

平成 9 年 7 月 18 日 (金) 1 時限施行		学部	学科	年	組	番	採点欄	※
担当者名	荒牧, 茅, 伊藤, 大場 数下, 中嶋	学籍番号						
科目名	化学 A	氏名						
指示事項	持込 ① (電卓のみ可) 不可	答案用紙	要 (B4大) B5(小) 不要					
		計算用紙	要 (回収一要・不要) 不要					

以下の間に答えなさい。ただし次の数値を用いてよい。

プランク定数 $h = 6.63 \times 10^{-34}$ Js、電子の質量 $m_e = 9.11 \times 10^{-31}$ kg、

光速 $c = 3.00 \times 10^8$ ms⁻¹、リュードベリ定数 $R = 1.097 \times 10^7$ m⁻¹

問1. 次の文章の空欄①～④を埋めなさい。また、図1と図2のグラフの形を概略で示しなさい。

水素類似原子（1電子原子）の1s軌道の波動関数は次のように書ける。

$$\Psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{Z}{a_0} r\right)$$

ここで、 a_0 は ① 半径と呼ばれる定数である。1s軌道の動径分布関数 $D(r)$ は

$D(r) =$ ② $\exp\left(-\frac{2Z}{a_0} r\right)$ となり、図1（たて軸 $D(r)$ 、よこ軸 r ）に示すように、

$r =$ ③ で最大である。一方、1sの電子密度 $\rho(r)$ は図2（たて軸 $\rho(r)$ 、よこ軸 r ）に示すように、原子核位置で最大である。この2つのことがらは矛盾しない。その理由は、s軌道の $D(r)$ は半径 r の球の ④ と $\rho(r)$ との積だからである。

問2. 原子番号1から10までの等核2原子分子について、以下の問いに答えなさい。

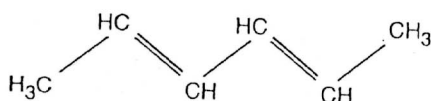
- (1) 安定に存在しない等核2原子分子を元素記号で3つ答えなさい。
- (2) 結合エネルギーの最も大きな等核2原子分子を元素記号で示し、その電子配置を下の例にならって答えなさい。

例: Li_2 では $(\sigma_{1s})^2(\sigma_{1s}^*)^2(\sigma_{2s})^2$

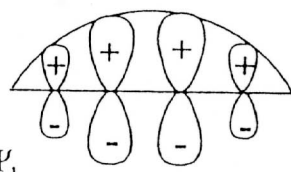
ただし、 $(1s\sigma_g)^2(1s\sigma_u^*)^2(2s\sigma_g)^2$ と書いてもよい。

問3. 下の化合物Aは紫外部に吸収を持ち、その吸収極大波長 λ_{max} は 227 nm である。

- (1) 下の分子構造式を書き写し、それぞれの炭素原子の混成の種類を答えなさい。
- (2) 化合物Aの π 電子を、1次元の箱（長さ L ）の中の粒子と近似することができる。量子数を n とすると、 $n=1$ の分子軌道 Ψ_1 は下図のように模式的に書ける。これにない、 Ψ_2 を図示しなさい。
- (3) HOMO（最高被占軌道）と LUMO（最低空軌道）の量子数 n をそれぞれ答えなさい。
- (4) HOMOとLUMOのエネルギー差を、箱の長さ L などを用いて表しなさい。
- (5) 化合物Aの紫外部の吸収はHOMOからLUMOへの電子遷移に対応する。 λ_{max} の値から箱の長さ L を求めなさい。（単位は nm）



化合物A



Ψ_1