

【1998年試験問題】

以下の問に答えなさい。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, 電子の電荷 $e=1.602 \times 10^{-19}$ C, 光速 $c=3.00 \times 10^8$ ms⁻¹

問 1 規格化された水素様原子の1sおよび2p_z軌道は次のとおりである。

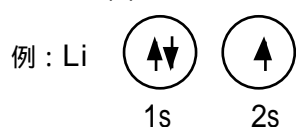
$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{Zr}{a_0} \right), \quad \psi_{2p_z} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} \exp \left(-\frac{Zr}{2a_0} \right) \cos\theta$$

(1) この二つの軌道の概形を模式的に表しなさい。ただし関数値の正負をはっきり書き入れること。

(2) この二つの軌道について、電子密度 $|\psi|^2$ が最大となる点の極座標およびその最大値を答えなさい。

(2p_z軌道は、動径部分と角度部分の積で与えられるので、それぞれの最大値を独立に考える。電子密度と動径分布関数の違いに注意すること。)

問 2 (1) Be, B, N, O 原子の基底状態における電子配置を次の例にならって示しなさい。



(2) 原子Aの第一イオン化エネルギーIE(A)は、(i) 一般的に同じ周期の原子では右側のものほど大きくなるが、(ii) IE(Be) > IE(B) の様な例外的な振る舞いも示す。(i), (ii)のそれぞれの理由を説明しなさい。

(3) 58.43 nm の光をBe気体 (蒸気) に照射したところ、11.93 eVの電子が放出された。

Be 原子のイオン化エネルギーをeV単位で有効数字3桁まで求めなさい。

問 3 次の(A)~(L)に適当な語句または式を入れて文章を完成させなさい。ただし(B), (C), (F) には分子名ではなく結合次数を含めた構造式 (例 : N≡N) を入れること。また ψ_{2s} と ψ_{2p} は規格化されているものとして、(G), (H)は規格化因子も含めて答えること。

エタン、エチレン、アセチレンの3つの分子の炭素原子は、いずれも混成軌道を含むが、p軌道の含まれる割合が最も大きい混成は(A)混成とよばれ、これらの分子のうち(B)でみられる。非直線平面分子(C)の炭素原子の混成は(D)混成とよばれ、そのCCH原子のなす角度は、ほぼ(E)度である。またCC原子間距離が最も短い分子は(F)である。炭素原子の原子価軌道は1つの ψ_{2s} と3つの ψ_{2p} であるが、アセチレンの炭素原子では、そのうちの、 ψ_{2s} と結合軸方向を向いた ψ_{2p_z} が混成して、(G)と(H)のように表現され、水素原子の1s軌道とともに、H-C-C-Hの骨格の軌道を作る。そして隣り合った炭素上の残った2つの原子価軌道は、そのままで(I)結合を作る。この炭素原子間の結合次数は合計(J)であるが、そのうち 軌道の結合次数は(K)で、(I)結合のものは(L)である。