

リュードベリ定数 $R=13.6\text{eV}$, プランク定数 $h=6.63\times 10^{-34}\text{J}\cdot\text{s}$, 光速 $c=3.00\times 10^8\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
 電子の質量 $m_e=9.11\times 10^{-31}\text{kg}$, 電子の電荷 $e=1.60\times 10^{-19}\text{C}$ として、以下の間に答えなさい。

問1. 原子番号 Z の水素様原子のエネルギーは $E_n = -R \times Z^2/n^2$ である。

- (1) A の第2イオン化エネルギーとは A を A^{2+} にするのに要するエネルギーのことである。
 He の第2イオン化エネルギーを eV 単位で求め、それより(第1)イオン化エネルギー 24.6eV のほうが小さい理由を簡単に説明しなさい。
- (2) Li と Be を比べると、イオン化エネルギーが小さいのはどちらか? また第2イオン化エネルギーについてはどちらが小さいか?
- (3) H を $1s$ 状態から $n=2$ の状態に励起するのに必要な光の波長を nm 単位で求めなさい。
 原子軌道関数 $\phi(\vec{r})$ に含まれる電子の位置ベクトルを原子核の位置について反転させたとき、
 $\phi(-\vec{r}) = \phi(\vec{r})$ の場合を $g(\text{gerade})$ 、 $\phi(-\vec{r}) = -\phi(\vec{r})$ の場合を $u(\text{ungerade})$ と呼ぶ。 s 軌道と p 軌道はそれぞれ g, u のどちらか? また、光励起は、 $g \rightarrow u$, $u \rightarrow g$ の場合しか起こらないことが知られている。光励起された $n=2$ の状態は、 $2s$ と $2p$ のどちらか?

問2. 次の表は N_2 , O_2 , CO , および NO のデータである。

分子	原子間結合距離 (\AA)	双極子モーメント (D)	イオン化エネルギー (eV)	磁性
(I)	1.10	0	15.6	反磁性
(II)	1.13	0.10	14.0	反磁性
(III)	1.15	0.16	9.3	常磁性
(IV)	1.21	0	12.1	常磁性

- (1) 分子(I), (II), (III), (IV) がそれぞれ何か答えなさい。
- (2) 分子(IV) が常磁性を示す理由を述べなさい。
- (3) He_2 などの希ガス分子は、中性状態では安定な化学結合を作らないが、正イオンでは安定に存在する。これらの理由を結合次数を用いて説明しなさい。

問3. 代表的有機分子である、エタン、エチレン、アセチレン、ベンゼンを考える。以下の(A) から(G)に最適な語句を入れ、文章を完成しなさい。

エタンの炭素の混成軌道は(A)であり、その p 性は(B) % である。 p 性の高い混成軌道ほど細長い形をしその電子分布は炭素原子から(C)ため、弱い σ 軌道を作る。このため、 CH 結合の結合エネルギーが一番大きく、 CH 結合距離が一番短い分子は(D)である。エチレン、アセチレン、ベンゼンの(E)軌道は、各炭素原子の(F)軌道から作られ、HOMO となる。一方、他の結合性 σ 軌道は、 s 性を含む混成軌道からなるため、より安定である。この HOMO のエネルギーは、炭素間結合距離と強く相関し、不飽和化合物の中で最も炭素間距離が長い(G)のものが一番不安定であり、そのイオン化エネルギーが一番小さい。