

問 1

- (1) (ア) 9 (イ) $45^\circ (\pi/4)$ 、 $90^\circ (\pi/2)$ 、 $135^\circ (3\pi/4)$
 (2) (ウ) 遮蔽 (エ) 方位
 (3) (オ) 2 (カ) スピン
 (4) (キ) 窒素 (N) (ク) $N: (1s)^2(2s)^2(2p_x)^1(2p_y)^1(2p_z)^1$ 、または $N: (1s)^2(2s)^2(2p)^3$
 (5) (ケ) (コ) ボロン (ホウ素) 酸素 (サ) $B_2: (\sigma_g 1s)^2(\sigma_u^* 1s)^2(\sigma_g 2s)^2(\sigma_u^* 2s)^2(\pi_u 2p_x)^1(\pi_u 2p_y)^1$
 または、 $B_2: (\sigma_g 1s)^2(\sigma_u^* 1s)^2(\sigma_g 2s)^2(\sigma_u^* 2s)^2(\pi_u 2p)^2$ (シ) 磁場 (磁石)

問 2

(1) ボーア半径

(2) N^{6+} 、 Ne^{9+}

(3) $E_n = -\frac{Z^2 R}{n^2}$

(4) $13.6 \times 3^2 \times (1.60 \times 10^{-19}) = 1.958 \times 10^{-17} = 1.96 \times 10^{-17} \text{ J}$

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

(6) $D(r) = \left[\int_0^{2\pi} \left(\int_0^\pi \Psi_{1s}^* \Psi_{1s} r^2 \sin \theta d\theta \right) d\varphi \right] = \frac{1}{\pi} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 r^2 \exp\left(-\frac{2Z}{a_0} r\right) \left(\int_0^\pi \sin \theta d\theta \right) \left(\int_0^{2\pi} d\varphi \right)$
 $= \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3} \right) r^2 \exp\left(-\frac{2Z}{a_0} r\right) (2)(2\pi) = \left(\frac{4Z^3}{a_0^3} \right) r^2 \exp\left(-\frac{2Z}{a_0} r\right)$

$D(r)$ を r で微分すると

$$\left(\frac{a_0^3}{4Z^3} \right) \frac{dD(r)}{dr} = 2r \exp\left(-\frac{2Z}{a_0} r\right) - r^2 \left(\frac{2Z}{a_0} \right) \exp\left(-\frac{2Z}{a_0} r\right) = 2r \left(1 - \frac{Z}{a_0} r \right) \exp\left(-\frac{2Z}{a_0} r\right)$$

最大値をとる条件は、 $dD(r)/dr=0$ 、すなわち

$$2r \left(1 - \frac{Z}{a_0} r \right) \exp\left(-\frac{2Z}{a_0} r\right) = 0$$

であるから、これを解くと $r = 0$ 、 a_0/Z となり、このうち $r = a_0/Z$ で最大値 $\frac{4Z}{a_0 e^2}$ をとる。

問 3

(1) sp^2 混成 (ただし、 $C=C-C=C$ では、 sp^2 、 $C=C=C-C$ では、 sp と sp^2 と sp^3 と、区別していれば正解)

(2) $n=3$

(3) 最低の励起状態では、HOMO($n=2$) LUMO($n=3$) で $E_0 = h^2/(8ma^2) \cdot (3^2 - 2^2) = 5h^2/(8ma^2)$

$n=2$ $n=4$ に比べて $n=1$ $n=3$ の方がエネルギー差は小さいから、次に高い励起状態は、 $n=1$ $n=3$ によって生成される。 $n=1$ $n=3$ のエネルギー差は $h^2/(8ma^2) \cdot (3^2 - 1^2) = 8h^2/(8ma^2)$ であるから、 E_0 を用いて書くと、 $(8/5) E_0$ となる。 $(12/5) E_0$ は不正解。

ただ、問題文の解釈によっては、 $n=2$ $n=3$ に引き続いて励起があるとする、 $n=3$ $n=4$ 、もしくは $n=1$ $n=2$ とが可能であり、 $n=1$ $n=2$ の方がエネルギー差は小さいから、 $h^2/(8ma^2) \cdot (2^2 - 1^2) = 3h^2/(8ma^2)$ である。 E_0 を用いて書くと、 $(3/5) E_0$ となり、こちらも正解とした。 $(7/5) E_0$ は不正解。