

構造化学試験問題

染田清彦教員

平成17年2月9日

90分

次の物理定数および単位の換算値を用いよ。

プランク定数 ; $h = 6.63 \times 10^{-34}$ Js, 光速 : $c = 3.00 \times 10^8$ ms⁻¹,

原子質量単位 : 1.66×10^{-27} Kg

原子質量 : ¹H 1.01, ²D 2.01, ³⁵Cl 35.0 (いずれも原子質量単位)

エネルギーの単位の換算値 : 1 a. u. (原子質量単位) = 27.2 eV ; 1 eV = 1.60×10^{-19} J

$\sqrt{2} = 1.414$, $\sqrt{3} = 1.732$, $\sqrt{5} = 2.236$, $\sqrt{7} = 2.646$, $\sqrt{10} = 3.162$

1. 水素原子は波長 121.6 nm の光を吸収して主量子数 $n = 1 \rightarrow 2$ の遷移を起こす。水素原子を光照射でイオン化するにはどのような波長の光が必要か。
2. 水素型原子のエネルギー順位は原子質量単位を用いると

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{Z^2}{n^2}$$

と表される。ただし、 n は主量子数、 Z は有効核電荷である。下表の有効核電荷のデータを用いて次の間に答えよ。

- (1) Li および Ne 原子のイオン化エネルギー (原子単位) を推定せよ。
- (2) Li 原子に光を照射してイオン化するには、どのような波長 (単位m) の光が必要か答えよ。
- (3) Li⁺ イオンからさらに電子を1個取り去るのに必要なエネルギー (原子単位) を推定せよ。
- (4) 「アルカリ金属はイオン化しやすく、希ガスはイオン化しにくい」という事実を遮蔽効果・有効核電荷の観点から簡潔に説明せよ。

原子 (原子番号)	オービタル	有効核電荷
Li (3)	1s	2.69
	2s	1.28
Ne (10)	1s	9.64
	2s,2p	5.76

3. 以下の間に分子軌道論の立場から答えよ。
 - (1) 酸素原子 (原子番号 8) の基底状態の電子配置を答えよ。

- (2) 酸素分子の基底状態の電子配置を答えよ。
- (3) 酸素分子は磁気モーメントを持つ。この理由を説明せよ。
- (4) 等核二原子分子 N_2 、 O_2 、 F_2 のうち、正イオンになった時に結合が強くなるものを択び、その理由を記せ。

4. HeF^+ 分子イオンは安定な分子イオンとして存在するか、分子軌道の立場から答えよ。

5. 調和振動子の零点振動の振幅を、変位 x の 2 乗平均の平方根

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle}$$

で定義する。塩化水素 ($^1H^{35}Cl$) および塩化重水素 ($^2D^{35}Cl$) 分子の零点振動について以下の間に答えよ。

(1) 調和振動子の振動量子数 $n = 0$ の固有状態の波動関数は

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{a}{\pi}\right)^{1/4} e^{-ax^2/2}$$

で与えられる。ただし、 $a = 4\pi_2\mu\nu/h$ であり、 ν は振動数、 μ は換算質量である。零点振動の振幅を表す式を導出せよ。積分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{a^3}\right)^{1/2}$$

を用いてよい。

- (2) HCl 分子は波数 (波長の逆数) 2991 cm^{-1} の赤外線を吸収し、 $n = 0 \rightarrow 1$ の振動遷移を起こす。 HCl 分子の分子振動が調和振動であるとみなし、その振動数 ν_{HCl} (単位 s^{-1}) を求めよ。
- (3) HCl 分子の零点振動の振幅 Δx_{HCl} (m) を有効数字 2 桁で求めよ。 N 乗根の計算では $X \ll 1$ の時に成立する近似式

$$(1 + X)^{1/N} \simeq 1 + \frac{X}{N}$$

を利用してよい。

- (4) 塩化重水素 (DCl) 分子の零点振動の振幅は Δx_{HCl} の何倍になるか、有効数字 2 桁で求めよ。