

基礎現代化学 期末試験 (担当: 増田 茂)

試験時間: 90 分, 問題用紙・答案用紙各 1 枚, ノート・プリント・参考書持込不可

問題 1 H, He⁺, Li²⁺, Be³⁺ など 1 個の原子核と 1 個の電子からなる系を水素様原子という。原子番号を Z とすると, 水素様原子内の電子のエネルギー準位は次式で与えられる。

$$E_n = -RhcZ^2 \frac{1}{n^2} \quad (n=1, 2, 3, \dots)$$

ここで, $R (=1.1 \times 10^7 \text{ m}^{-1})$ はリドベリ定数, $h (=6.6 \times 10^{-34} \text{ J s})$ はプランク定数, $c (=3.0 \times 10^8 \text{ m s}^{-1})$ は真空中の光速を表す。また, 水素様原子の 1s 軌道の動径部分は,

$$R_{1s}(r) = \sqrt{\frac{4Z^3}{a_0^3}} \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right)$$

で与えられる。ここで, a_0 はボーア半径, r は原子核からの距離を表す。以下の問に答えよ。[30 点]

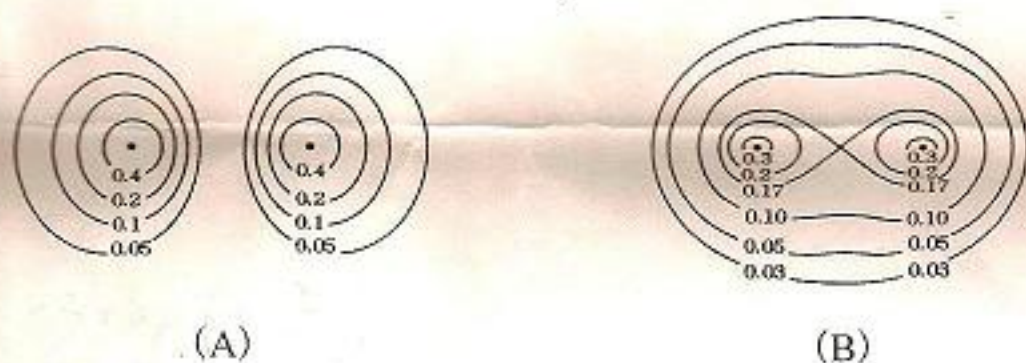
1. n の名称を記せ。
2. ボーア半径の値を次の中から選べ。① $5.3 \times 10^{-13} \text{ m}$, ② $5.3 \times 10^{-11} \text{ m}$, ③ $5.3 \times 10^{-9} \text{ m}$, ④ $5.3 \times 10^{-7} \text{ m}$, ⑤ $5.3 \times 10^{-5} \text{ m}$ 。
3. H 原子において, 電子が $n=2$ の状態から $n=1$ の状態に遷移するとき放出される光の波長 λ を数値で求めよ。また, この光は紫外光, 可視光, 赤外光のどれに属するか。
4. 水素様原子において, イオン化エネルギー I が原子番号 Z とともに大きくなることを示せ。
5. 動径分布関数は次式で定義される。

$$D(r) = 4\pi r^2 R_{1s}(r)^2$$

H 原子について, $D(r)$ の概形をグラフに描け。また, 得られたグラフについて簡単に説明せよ。

6. 水素様原子において, 原子の半径は原子番号 Z とともに大きくなるか, 小さくなるか, 根拠とともに記せ。

問題 2 水素分子イオン H_2^+ の電子密度を等高線で描いたものを下図に示す。以下の問に答えよ。[15 点]



1. (A) と (B), いずれが結合性軌道か, 根拠とともに記せ。
2. (A) および (B) のもとになった分子軌道の概形を描け。また, 節の位置も示せ。

問題 3 窒素分子 (N_2) について, 以下の問に答えよ。[20 点]

1. N 原子の電子配置を例にならって記せ。例. H (1s)¹。
2. 2p 軌道から何個の分子軌道が形成されるか。また, それらの概形を描け。
3. 分子軌道および電子配置の観点から, N_2 分子の化学結合を説明せよ。

問題 4 先日の洞爺湖サミットでも「CO₂ による地球温暖化」が取り上げられた。CO₂ による温室効果とは何か, 以下の語句を用いて説明せよ。[25 点]

語句: 黒体放射, 運動の自由度, 赤外光, 分子振動

問題 5 本講義で扱った概念や現象を 1 つ取り上げ, 高校生にも分かるように平易に説明せよ。[10 点]

08 夏 基礎現代科学(増田)過去問回答

問題 1

1. 量子数

2. ボーア半径 $a_0=0.0529\text{nm} \doteq 5.3 \times 10^{-11}\text{m}$ より②

3. 光速 $c = \lambda \nu$ より $\nu = c/\lambda$

$$|E_1 - E_2| = RhcZ^2(3/4) = h(c/\lambda)$$

$$Z=1 \text{ より } 4/3R = \lambda \doteq 1.21 \times 10^{-7}\text{m} = 121\text{nm}$$

可視光の領域は $380 \sim 780\text{nm}$ よりこれは赤外光である。

4. $I = |E_\infty - E_1| = RhcZ^2$ より I は Z^2 に比例して増大する。

5. 概形省略(原子核を中心とした円形)

$Z=1$ の時、 dD/dr が $r=a_0$ で 0 となり、この時 $D(r)$ は極大値をとる。つまり原 o だけ離れた位置に最も多く電子が分布している。

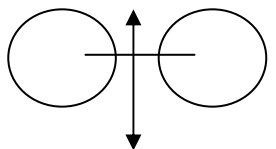
6. ある Z に対して、 dD/dr は $r=a_0/Z$ で 0 となり、この時 $D(r)$ は極大値をとる。 r は Z に反比例するので、 Z が大きくなるほど原子の半径は小さくなるといえる。

問題 2

1. 結合性軌道は(B)

根拠: (A)には二つの原子核の間に、電子の存在しない節が存在するが、(B)では結合領域である核間に電子が存在するから。

2.



↑ 節の位置

問題 3

1. $N: (1s)^2(2s)^2(2p)^3$

2. N 2 原子の 2 p 軌道は合わせて 6 個。軌道相互作用の原理より、6 個の原子軌道からできる分子軌道の数は 6 個。

3. 1 s、2 s 軌道は非結合性軌道なので N_2 分子の結合に関与しない。

Hund の規則より 2 p 軌道ではそれぞれの原子の 2 p_x , 2 p_y , 2 p_z 軌道にひとつずつの電子が入っている。エネルギー順位の低いほうから順に電子が入っていくので、

$3\sigma_g, 1\pi_u, 1\pi_u$ の順に電子が入って行き、3 重結合を形成する。

(ここで $1\pi_u$ が二つあるのは、結合軸を z 軸とすると、 z 軸周りに分子が回転することができるため、 $2p_x$ と $2p_y$ は同様であるとみなせるからです。うまく説明できないけど…。)

問題 4

地球は太陽光から吸収した熱を黒体放射によって赤外光として放出し、地表の温度を約 300K に保っているが、3 原子による直線型分子である CO_2 は振動運動も含め、運動の自由度が 9 であり、分子振動を行う。この時変角振動や逆対象伸縮振動によって赤外光を吸収し、その一部を地表に向けて放出することで、地表温度が上昇する。これを CO_2 による温室効果という。

問題 5

省略