

学生番号 ( ) 氏名 ( )

[1] 次の文を読んで、以下の問1～問5に答えなさい。

原子の電子構造、すなわち原子核のまわりの電子の配置を説明するために、量子力学をどのように使うかを学ぶ際に出会う概念は、原子、分子の構造や反応を理解するために非常に重要であり、したがって、広い範囲にわたって化学に応用される。二つの型の原子を区別することが必要である。水素型原子は [ ① ] で、この例としては [ ② ] などがある。多電子原子は [ ③ ] で、水素以外のすべての中性原子がこれに含まれる。したがって、電子を2個しかもたない He でさえ、多電子原子である。水素型原子は、[ ④ ] で重要である。これらの水素型原子はまた、多電子原子の構造や分子の構造を説明するのにも使われる一連の概念を提供してくれる。

原子の電子構造を決定するための主な実験手段の一つは [ ⑤ ] であって、これは物質によって吸収または放出される電磁放射線の検出と解析を行う。スペクトル強度を、原子または分子によって放出または吸収される放射線の振動数 ( $\nu$ )、波長 ( $\lambda$ )、または波数 ( $\tilde{\nu}$ ) の関数として記録したものを [ ⑥ ] という。原子の [ ⑥ ] は、一連の線、つまりはつきり決まった放出あるいは吸収のピークから成っている。

問1. 水素型原子とはどういうものか、文中の [ ① ] にあてはまる文章を記せ。

原子番号がZの1電子原子またはイオン

問2. 水素型原子の例として文中の [ ② ] にあてはまるものを3つ記せ。

H, He<sup>+</sup>, Li<sup>2+</sup> など

問3. 多電子原子とはどういうものか、文中の [ ③ ] にあてはまる文章を記せ。

2個以上の電子をもつ原子やイオン

問4. 水素型原子はどのような理由で重要なのか文中の [ ④ ] にあてはまる文章を記せ。

そのシュレディンガー方程式が厳密に解ける (の) (大意が合っていれば正解とする)

問5. 文中の [ ⑤ ] および [ ⑥ ] にあてはまる語句を記せ。

⑤ [ 分光学 ] ⑥ [ スペクトル ]

問6. 波数 ( $\tilde{\nu}$ ) とは何か、波長 ( $\lambda$ ) との関係を示して説明せよ。また、通常用いられる単位は何か。

波数 ( $\tilde{\nu}$ ) とは  $\left[ 1/\lambda, 1\text{cm あたりの波の数} \right]$

通常用いられる単位 [  $\text{cm}^{-1}$  ]



[4] 次の文を読んで、以下の問1～問3に答えなさい。

水素型原子とは異なり、多電子原子では 2s オービタルと 2p オービタルは縮退していない。ある与えられた殻において、s オービタルは一般に p オービタルよりもエネルギーの低いところにある。

多電子原子中の電子は存在する他の全ての電子からのクーロン反発を受ける。もし電子が原子核から距離  $r$  のところであれば、それが受ける反発力は、原子核の位置にあつて半径  $r$  の球の内部にある電子の全電荷に等しい大きさを持つ負の点電荷で表すことができる。この負の点電荷は電子のあらゆる位置にわたって平均すると、原子核の全電荷を  $Ze$  から  $Z_{\text{eff}}e$  に引き下げる働きをする。 $Z_{\text{eff}}$  を [ ① ] という。このとき、電子は [ ② ] された核電荷のもとにあり、 $Z$  と  $Z_{\text{eff}}$  の差を [ ③ ] 定数  $\sigma$  という。すなわち、

$$Z_{\text{eff}} = [ \text{③} ]$$

である。[ ② ] 定数は s 電子と p 電子で異なる。これは、両者の動径分布が異なるためである。

問(1) 文中の [ ① ] ～ [ ④ ] に当てはまる語句、記号または式を記せ。

[① 実効(有効)核電荷], [② 遮蔽], [③  $Z - \sigma$ ]

問(2) 多電子原子では、ある与えられた殻において、s オービタルは一般に p オービタルよりもエネルギーの低いところにある理由を説明せよ。

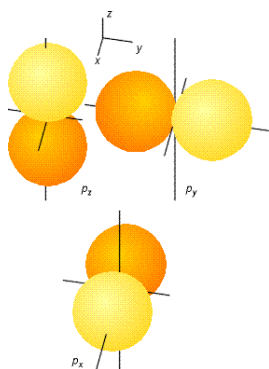
s 電子の方が同じ殻の p 電子よりも原子核の近くに見出される確率が高いという意味で内殻に大きく浸透している。s 電子は p 電子よりも内側に存在確率が高いので弱い遮蔽しか受けない。浸透と遮蔽の2つの効果が組み合わさった結果、s 電子は同じ殻の p 電子よりもきつく束縛されるようになるためにエネルギーの低いところにある。

問(3) リチウム Li の最外殻電子の [ ① ] は  $Z_{\text{eff}}=1.3$  と小さな値である。このことから、リチウムは低い第一イオン化エネルギーを持ち、その最外殻の電子は容易に取り除けることを説明せよ。

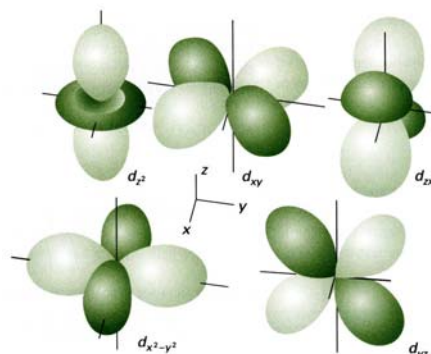
Li の核電荷は 3 であるにもかかわらず、実効核電荷  $Z_{\text{eff}}=1.3$  と非常に小さいことは、核の電荷が内殻によって良く遮蔽されていることを意味しており、最外殻の電子は容易に取り除ける。

[5] p オービタルと d オービタルの概形を描け。

[p オービタル]



[d オービタル]



[6] 次の文を読み、表1の空欄①～⑧にあてはまる適当な数値または文字式を記入せよ。

水素型原子の1電子波動関数  $\Psi(r, \theta, \varphi)$  は、次式のように3つの量子数  $n, l, m_l$  で定義される。

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = NR_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

ここで、 $N$  は規格化定数、 $Y$  は球面調和関数  $Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \Theta_{l,m}(\theta)\Phi_m(\varphi)$  である。3つの量子数の名称と取り得る値は表1の通りである。また、表には4番目の量子数  $m_s$  も示してある。

表1. 量子数  $n, l, m_l, m_s$  の名称と取り得る値

記号	名称	取り得る値
$n$	① 主量子数	② 1, 2, 3, …
$l$	③ 方位量子数	④ 0, 1, …, $n-1$
$m_l$	⑤ 磁気量子数	⑥ $-l, -l+1, \dots, l-1, l$
$m_s$	⑦ スピン量子数	⑧ $+1/2, -1/2$

[7] 原子のプディングモデルと惑星型モデルについて説明せよ。また、原子構造が惑星型モデルであることを実験的に証明したラザフォードの散乱実験について説明せよ。

原子のプディングモデル：原子は広がった分布を持つ正電荷の中に負電荷を持つ電子が運動している構造を持つというモデル。このモデルは小粒のフルーツが入ったプディングに例えられてプディング・モデルと呼ばれる。

惑星型モデル：中心に正電荷を持つ核があり、その周囲を電子が回転運動するというモデル。このモデルは太陽系になぞらえて惑星モデルと呼ばれる。

ラザフォードの散乱実験：ラザフォードはアルファ線の金箔での散乱を観察した。その結果アルファ線の大部分は金箔を透過するが、一部が大きな角度で散乱される現象を見いだした。アルファ線が金の原子と衝突する場合、大部分は核から離れたところを通過するので散乱角は小さい。しかし、ごく一部は核のすぐ近傍を通過するので、正電荷同士の強い電氣的斥力が働いて軌道が大きく曲げられ散乱角が大きくなる。これらのことから、原子の中心には正の電荷を持つ重い原子核が存在すると結論付けた。