

- [1] 水素原子の電子が  $n = 1$  から  $n = 2$  および  $3$  に遷移するとき吸収するエネルギーの大きさを eV、波長(nm)および波数( $\text{cm}^{-1}$ )の単位で求めよ。  
(リュードベリ定数や、他の物理定数は教科書などを参照して下さい)
- [2] 次の事柄の相互関係について述べよ。  
(a) 波動関数 (b) 電子雲 (c) 電子の確率分布
- [3] 水素の 1s 軌道のエネルギーは  $-13.6 \text{ eV}$ 、軌道半径は  $0.053 \text{ nm}$  である ( $n$  (ナノ) は  $10^{-9}$  を意味する接頭語である)。ボーアモデルによれば、これらの数値は他の既知の物理量から導かれ、計算値と実測値の一致は大変によい。前者はリュードベリ定数 (正確には  $R$  を eV 単位に変換して  $-1$  倍したもの)、後者はボーア半径 ( $a_0$ ) という別の名称でも呼ばれる。中心核電荷を一般的に  $Z$  とし、主量子数を一般的に  $n$  とすると、軌道の半径やエネルギーは、水素 1s の場合の値に対する  $Z$  依存性や  $n$  依存性から簡単に求めることができる。次のものを求めよ ( $R$  や  $a_0$  を用いよ)。  
(1) H のイオン化エネルギー。 (2)  $\text{He}^+$  の 1s 軌道のエネルギー。 (3) He の第二イオン化エネルギー。 (4) 水素で主量子数 2 の軌道のエネルギー。 (5) 水素で主量子数 2 の軌道の半径。 (6)  $\text{He}^+$  の 1s 軌道の半径。
- [4] 原子番号  $Z$  の元素の水素類似 1s および 2s 軌道を占める電子が見いだされる確率がもっとも高い原子半径を求めよ。  
ヒント：動径分布関数が極値を持つときの半径を求める。動径分布関数から  $r$  に関する導関数をつくり、極大値の条件を出せばよい。1s と 2s の軌道は「理工系学生のための化学基礎」第 5 版 (学術図書出版) p.63 などにある。他の教科書類でも記載があるだろう。
- [5] 波動方程式から得られた水素の原子軌道の種類と軌道の形を、 $n = 3$  まですべて書け。
- [6] ある元素の中性原子は主量子数  $n = 1$  の電子を 2 個、 $n = 2$  の電子を 8 個、 $n = 3$  の電子を 10 個、 $n = 4$  の電子を 2 個有する。次の量を求めよ。  
(a) 原子番号 (b) s 電子の総数 (c) p 電子の総数
- [7] 5. 次のイオン半径の変化を説明せよ。  
(1) 

$\text{Se}^{2-}$	$\text{Br}^-$	$\text{Rb}^+$	$\text{Sr}^{2+}$	
200	196	152	116	/pm

  
(2) 

$\text{F}^-$	$\text{Cl}^-$	$\text{Br}^-$	$\text{I}^-$	
136	181	196	220	/pm

 および Mg
- [8] 6. Li, Be, B, C, N, O, F, Ne, Na の第 1 イオン化エネルギー  $I_1$  と第 2 イオン化エネルギー  $I_2$  を調べ、原子番号を横軸に、エネルギー (単位  $\text{kJ mol}^{-1}$ ) を縦軸にした折れ線グラフを描き、 $I_1$  と  $I_2$  の原子番号依存性を比較せよ。  
さらに、電子親和力 ( $EA$ ) もプロットしてみよ。 $I_1, I_2, EA$  を同一のグラフに重ね書きするとわかりやすいだろう。単位系を合わせる必要がある。ピーク位置の規則性を考えよ。第二イオン化エネルギーは、「化学便覧基礎編」のようなデータ集にある。以下からもダウンロードできる。[http://www.5f.biglobe.ne.jp/~rokky/kaisetu/0/syuukihyou\\_pdf03.pdf](http://www.5f.biglobe.ne.jp/~rokky/kaisetu/0/syuukihyou_pdf03.pdf)
- [9] 基底状態で次の原子あるいはイオンはそれぞれ何個の対電子をもっているか。  
 ${}^6\text{C}, {}^{20}\text{Ca}, {}^{25}\text{Mn}, {}^{26}\text{Fe}^{3+}, {}^{29}\text{Cu}^+, {}^{34}\text{Se}^{2-}, {}^{64}\text{Gd}^{3+}$
- [10]  $\text{CoCl}_2$  とアンモニアから  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$  という錯イオンを合成できる。しかしこれは比較的不安定であり、容易に酸化されて  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$  という安定な錯イオンになる。この不安定性・安定性の理由を説明せよ。Co の原子番号は 27 である。