

- [1] ボーアモデルは教科書 p.16-19 においては水素原子で解説されている。一般的には水素類似型原子に拡大して解釈できる。原子番号=陽子数を Z とし、式 (1.4)~(1.11) を書き替えよ。クーロン力の q_1q_2 項で、 $q_1 = -e, q_2 = +Ze$ になることをヒントとせよ。次に、軌道半径や軌道エネルギーに与える Z 依存性を説明せよ。要するに、 $E_n \propto -Z^2/n^2$ と $r_n \propto n^2/Z$ を証明せよ。
- [2] 水素の 1s 軌道のエネルギーは -13.6 eV 、軌道半径は 53 pm である。前者はリュードベリ定数 $-R_\infty$ 。(伝統的には波数単位で表されるが、ここでは、これを eV 単位に変換して負号を付したものとする)、後者はボーア半径 (a_0 ; これも伝統的には \AA 単位で (0.53 \AA) 表記される) という別の名称で親しまれている。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 の場合の値が $Z=1, n=1$ であることと、水素類似型原子の一般解の Z 依存性や n 依存性から簡単に求めることができる (上記問題 [1] 参照)。次のものを定数 R_∞ や a_0 を用いて答えよ。
 (1) H のイオン化エネルギー。 (2) 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) Li^{2+} の主量子数 1 の軌道半径。 (6) C^{5+} のイオン化エネルギー (つまり C の第 6 イオン化エネルギー)。
- [3] 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最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 の軌道は教科書表 1.1 にあるが、他にも「理工系学生のための化学基礎」第 5 または 6 版 (学術図書出版) p.63 などにあるので利用されたい。
 電子密度は、波動関数の二乗で表される。動径方向の積分について、微小球殻体積中の電子の存在確率が $\Phi^2 dv = 4\pi r^2 \Phi^2 dr$ であることから、動径分布関数は、 $4\pi r^2 \Phi^2$ と定義される。
- [4] 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 描け。動径方向に節を持つ場合にはそれとわかるようにせよ。
- [5] H, He, Li, Be, B, C, N, O, F, Ne, Na, Mg の第一イオン化エネルギー、 IE^1 、第二イオン化エネルギー IE^2 (水素以外)、および電子親和力 (EA) を調べ、原子番号を横軸に、エネルギーを縦軸にしたプロットを描いてみよ。 IE^1, IE^2, EA を同一のグラフに重ね書きする。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。 IE^1, IE^2, EA のそれぞれの規則性ではなく、三者相互の、あるいは全体の規則性を考えよ。
 これは EA が、 IE^0 の逆過程に相当することを学習するための演習である。 EA は必要に応じて -1 倍するなど、判りやすいプロットをしてみよう。 IE^2 等は「化学便覧基礎編」のようなデータ集にある。Web 検索でも見いだされるであろう。
- [6] 1913~14 年に Moseley は、一連の元素について特性 X 線 (K 線と L 線) の波長を測定した。波長から振動数 ν を求め、その平方根を原子番号 Z の順に配列したところ見事に直線上に並ぶことがわかった。これにより、原子番号が未確定であった元素、白金: 78、金: 79、鉛: 82 と、次々と言い当てるとともに、未知元素の存在も予言した。特性 X 線の放出にかかわる二つのエネルギー準位を理解するためには、当然量子論を必要とする。その当時発表されたばかりの Bohr の原子模型と調和させつつ、Moseley は実験結果を解釈した。この解釈を説明せよ。
 K 系列の場合: $\nu^{1/2} = Q_K \{(3/4) \nu_0\}^{1/2}$ $Q_K = Z - 1$
 L 系列の場合: $\nu^{1/2} = Q_L \{(5/36) \nu_0\}^{1/2}$ $Q_L = Z - 7.4$
- [7] 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持っているか。
 ${}^6\text{C}, {}^{20}\text{Ca}, {}^{25}\text{Mn}, {}^{26}\text{Fe}^{3+}, {}^{29}\text{Cu}^+, {}^{34}\text{Se}^{2-}, {}^{64}\text{Gd}^{3+}$
- [8] 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。