

構造化学（平尾）試験問題

問題 1

水素原子のスペクトルには波数 82259, 97492, 102824, 105292, 106632, 107440 cm^{-1} のところに線がある。この系列はどのような遷移か？

$$\tilde{\nu} = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

また、下の順位のイオン化エネルギーを求めよ。

問題 2

1 次元の箱の中の粒子を考えよう。この箱の中の粒子は x 軸の方向に $x=0$ から $x=L$ までを運動している。粒子の質量は m で、速度は v とする。x が 0 から L までの間のポテンシャルエネルギー U は一定（例えば、 $U=0$ ）である。箱の外のポテンシャルエネルギーは無限大で、粒子は $0 < x < L$ の箱の外には抜け出すことができないものとする。

- (1) この粒子の運動を古典論で扱うとどうなるか。
- (2) この粒子に対する Schrödinger 波動方程式を記せ。
- (3) この波動方程式の答えは

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$$

$$E_n = \frac{\pi^2}{2m} \left(\frac{\hbar}{L} \right)^2 n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

で与えられる。m, L とエネルギー準位との関係を述べよ。

- (4) 上の結果からベンゼンやブタジエンは無色透明であるのに 22 個の π 電子を持つ β -カロチン（ニンジンに含まれる赤い色素）は着色していることを説明せよ。

問題 3

次の表は酸素、窒素分子およびそのイオンの結合距離、結合エネルギーをまとめたものである。分子軌道法、結合次数を使って、この表を解説せよ。

分子	結合距離 (Å)	結合エネルギー (eV)
O_2	1.208	5.116
O_2^+	1.116	6.663
O_2^-	1.35	4.09
N_2	1.098	9.759
N_2^+	1.116	8.713
N_2^-	1.19	7.93

問題 4

Na, Mg, Al, Si, P, S, Cl, Ar の第 1 イオン化エネルギーはそれぞれ、5.1, 7.6, 6.0, 8.1, 10.5, 10.4, 13.0, 15.8 eV である。このような傾向にあることを原子の電子構造をもとに説明せよ。また、この中で電子親和力が最も大きい原子を予測し、その理由をのべよ。