

1. Bohr が水素原子の電子状態を記述する上で、古典物理学とはかけはなれたいくつかの仮定、条件をおいた。その条件の名称と内容について箇条書きで記せ。(第1回参照)

- ・定常状態 電子は、エネルギーが飛び飛びの値をとる定常状態でのみ存在する。
- ・状態間の遷移と振動数条件 ある定常状態から別の定常状態に移行するときに電磁波の吸収・放出が起きる。
- ・量子条件 電子の角運動量は量子化されている。

2. 水素原子の1s軌道のエネルギーは -13.6 eV である。水素原子の2s, 2p, 3s, 3p, 3d軌道のエネルギーをeV単位で記せ、算出不可能と思う場合はUCと記せ。(第1回参照)

水素原子の軌道のエネルギーは主量子数の2乗に反比例し、主量子数が同じならエネルギーも同じになるから、

$$2s, 2p \quad -13.6 \times \frac{1}{2^2} = -3.40\text{ eV}$$

$$3s, 3p, 3d \quad -13.6 \times \frac{1}{3^2} = -1.51\text{ eV}$$

3. 以下の問いに答えよ。(第1回参照)

3-1 可視光の線スペクトルの波長 λ を表す式を記せ。

$$\lambda = H \frac{m^2}{m^2 - 2^2} \quad H = 364.56\text{ nm}, m = 3, 4, 5, \dots$$

3-2 線スペクトルを波数 ν で表すと3-1の式はどのようになるか。

$$\nu = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{H} \left(1 - \frac{4}{m^2}\right) \quad H = 364.56\text{ nm}, m = 3, 4, 5, \dots$$

3-3 可視領域に現れるスペクトル線は水素のどのような準位間の遷移に相当するか。
量子数 $n \geq 3$ から $n=2$ への遷移

4. 水素の2s軌道と2p軌道の特徴の共通点と違いを記せ。(第2回参照)

共通点 主量子数が同じであるためエネルギーが等しい。

違い 方位量子数が異なるため軌道の形が異なる。

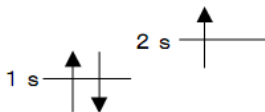
5. 水素と炭素の2p軌道の比較をして、共通点と違いを記せ。(第2回参照)

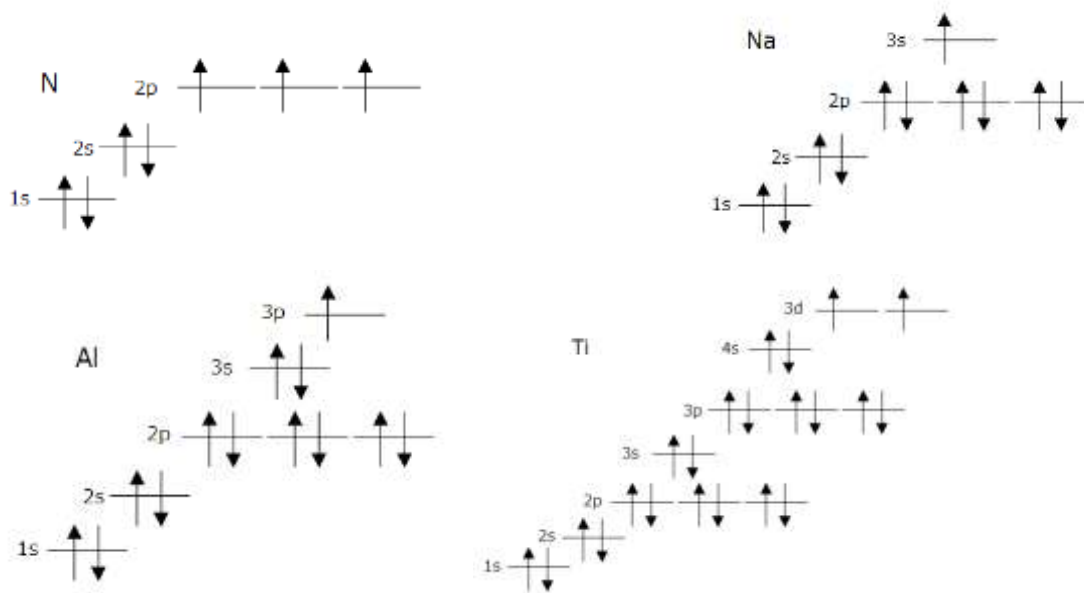
共通点 どちらも2p軌道であるから軌道の形は同じである。

違い 炭素は内側に電子があるため遮蔽の影響でエネルギーが下がる。それに対して水素では遮蔽は起こらず、エネルギーは下がらない。

6. ${}_3\text{Li}$ の例に倣って ${}_7\text{N}$ 、 ${}_{11}\text{Na}$ 、 ${}_{13}\text{Al}$ 、 ${}_{22}\text{Ti}$ の基底状態での電子配置を記せ。(第3回参照)

(例)





7. 構成原理（築き上げの原理）とは何か。（第3回参照）

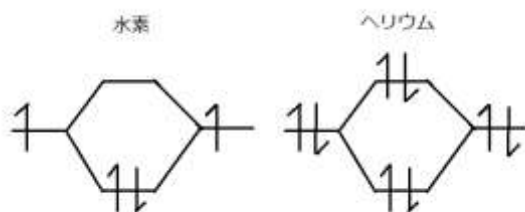
構成原理とは、原子の電子配置についての以下の3つの規則のことである。

1. 電子はエネルギーの低い軌道から順に詰まっていく。
2. Pauliの排他原理 電子は同じ量子状態をとることができない。
3. Hundの規則 縮退した複数の軌道に電子が配置されるときには、なるべく異なる軌道にスピンの向きを揃えるように配置される。

8. 水素は二原子分子を作って安定するのに対して、ヘリウムは二原子分子を構成しない。

その理由を分子軌道法を用いて説明せよ。（第4回参照）

水素、ヘリウムの電子配置は下のようになる。

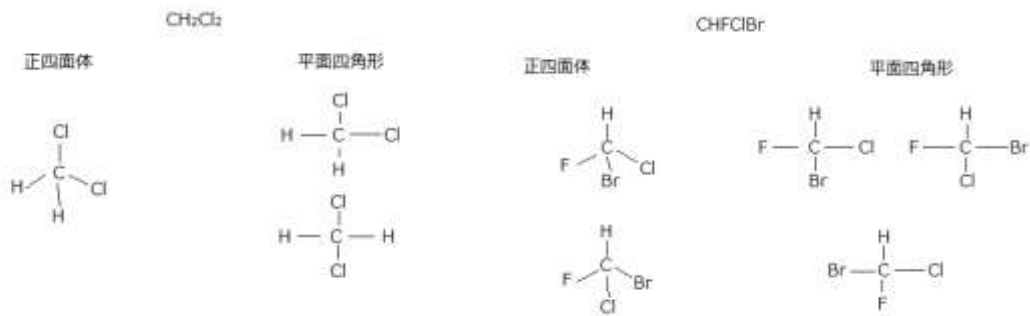


上図のように、水素では結合性分子軌道に電子が2つとも入るため安定する。この時の結合次数は1である。それに対して、ヘリウムでは結合性分子軌道に2個、反結合性分子軌道に2個入るためエネルギーは変化しない。この時の結合次数は0である。従って、水素は二分子原子をつくるがヘリウムは二分子原子をつくらない。

9. 炭素の結合が正四面体か平面四角形であるかによってどのような異性体が何種類できるか。CH₂Cl₂、CHFClBrを例にとって記せ。（第5回参照）

CH₂Cl₂ 正四面体の場合：1種類 平面四角形の場合：2種類

CHFClBr 正四面体の場合：2種類 平面四角形の場合：3種類



10. エチレンの水素原子はすべて同じ平面内に存在する。その理由を説明せよ。(第 5 回参照)

原子価結合法で考えると、エチレンの炭素原子は sp^2 混成軌道を形成する。この時、混成軌道は同一平面上にあり、混成していないもう一つの $2p$ 軌道は混成軌道と垂直な方向を向いている。二つの炭素原子の $2p$ 軌道は π 結合をつくるため同じ方向を向く。従って、混成軌道同士は同一平面上にある。エチレンの水素原子は混成軌道と結合しているから、これらはすべて同一平面上に存在する。

11. 活性化エネルギーとは何か。(第 10 回参照)

活性化エネルギーとは、化学反応の際、反応物を活性化状態にするのに必要な最小のエネルギーである。

12. 有機物の色の発現を構造と結合から説明せよ。(第 7 回参照)

有機物のなかには、炭素原子の共役二重結合を持つものがある。このような化合物では、共役系が伸びるに連れて HOMO と LUMO の間のエネルギー差が小さくなる。その結果、 π - π^* 遷移により光吸収が起こり、色が発現する。

13. 水素結合の重要性は何か、説明せよ。

水素結合とは、水素原子と電気陰性度が大きい原子（フッ素、酸素、窒素）結合したときに生じる分子間力である。水はこの力のために多くの極性分子の溶媒として働く。また、生物にとっては、たんぱく質や DNA、RNA の結合に関与しているために重要である。

14. エントロピー、エンタルピーとは何か、説明せよ。(第 11,12 回参照)

エントロピーとは、系の乱雑さを表す指標である。系と外界を合わせて考えると、自発反応はエントロピーが増大する方向に進む。

エンタルピーとは、系のエネルギーである。 $H=U+pV$ (H : エンタルピー、 U : 系の内部エネルギー、 p : 系の圧力、 V : 系の体積) で定義される。