

解答者学籍番号		解答者氏名	
---------	--	-------	--

以下の問に、選択肢の番号を○で囲んで答えよ。ただし、妥当な解は1つとは限らない。

1. 上向きの△で表される数学の演算子の名称？

- ①ナブラ ②ハミルトニアン ③ラプラシアン ④ルジャンドリアン

2. 振動数（周波数）の単位？

- ①m ②s ③g ④ cm^{-1} ⑤ s^{-1} ⑥ kg^{-1} ⑦Js ⑧Hz ⑨eV ⑩N

3. 波動関数の値が0である場所？

- ①零点 ②振幅 ③位相 ④節 ⑤極値 ⑥平衡点

4. M殻に属する原子軌道（Atomic Orbital）？

- ①2s ②2p ③2d ④3s ⑤3p ⑥3d ⑦4s ⑧4p ⑨4d ⑩4f

5. z軸からのずれの角度？

- ①偏角 ②変角 ③辺角 ④極角 ⑤局角 ⑥曲角 ⑦方位角 ⑧中心角 ⑨錯角 ⑩対頂角

6. 水素原子の波動関数（原子軌道）の量子数で、エネルギー準位の高低と関係しないもの？

- ①n ②l ③m ④s ⑤主量子数 ⑥方位量子数 ⑦磁気量子数 ⑧スピン量子数

7. フックの法則に従う復元力で反復する運動？

- ①等速円運動 ②並進運動 ③剛体回転子 ④調和振動子

8. d軌道に対応する方位量子数の値？

- ①0 ②1 ③2 ④3 ⑤4 ⑥5

9. 3p軌道の動径分布関数の極大の数？

- ①0 ②1 ③2 ④3 ⑤4 ⑥5

10. 原子の電子配置で個々の原子軌道（たとえば3px）に配置される電子の数として可能な値？

- ①0 ②1 ③2 ④3 ⑤4 ⑥5

解答者学籍番号		解答者氏名	
---------	--	-------	--

問1. 有効核電荷 $Z-s$ を定める s は、静電遮蔽効果の大きさを表すため、遮蔽定数とよばれる。遮蔽定数 s は、次の規則を使うと簡単に求めることができる。

[遮蔽定数算出則]

(1) 静電遮蔽の原因は、着目する電子に対する他の電子のクーロン斥力であり、遮蔽定数 s は他の電子からの寄与を合計して求める。

(2) 遮蔽効果の大きさは、原子核に対し、各電子が着目した電子より内側を運動するか外側を運動するかによって決まるので、各軌道の相対的位置関係を、内側から外側へと/で区切ってグループ分けして示す。

$/1s/(2s, 2p)/(3s, 3p)/3d/(4s, 4p)/4d/4f/(5s, 5p)/5d/5f/$

ns と np は、同程度の位置にあることを考慮して同じグループとする。

(3) 着目した電子より内側の軌道の電子は、完全な遮蔽効果を与えるとしてその寄与を1とする。

(4) 着目した電子と同じグループの軌道の電子は不完全な遮蔽効果を示すのでその寄与を $1/3$ とする。

(5) 着目した電子より外側の軌道の電子は遮蔽効果がないので寄与を0とする。

以上の規則を用いて、原子番号 $Z=1$ から $Z=18$ までの基底状態の原子の最も外側にある電子に対し、遮蔽定数 s を求めて有効核電荷 $Z-s$ の周期性を調べ、原子のイオン化エネルギーの周期性の特徴を説明せよ。ただし、解答の途中まで以下に記すので、それ以降の解答を完成させよ。(ヒント:イオン化エネルギーは希ガスで最大になることが説明される。)

[解答] 最も外側の電子に対する、他の電子からの遮蔽効果の寄与を、すべて寄せ集めて遮蔽定数 s を求める。 $H(Z=1)$ では他に電子がないから $s(H)=0$ 、 $He(Z=2)$ では同じ $1s$ を回る電子が1個だけなので、 $s(He)=1/3$ 。 $Li(Z=3)$ では電子配置が $(1s)^2(2s)^1$ となるので、一番外側の $2s$ 電子に対し内側に $1s$ 電子が2個あるから、 $s(Li)=1 \times 2=2$ 。 $Be(Z=4)$ は $(1s)^2(2s)^2$ なので、一番外側の $2s$ 電子に対し、同じ $2s$ 電子が1個、内側に $1s$ 電子が2個あるから、 $s(Be)=1/3 \times 1 + 1 \times 2=7/3$ 。 $B(Z=5)$ は $(1s)^2(2s)^2(2p)^1$ なので、一番外側のL殻にある $2s$ または $2p$ の電子に対し、同じグループの $2s$ または $2p$ 電子が合計2個あり、内側に $1s$ 電子が2個あるから、 $s(B)=1/3 \times 2 + 1 \times 2=8/3$ 。以降、 $Ne(Z=10)$ までは、同じ $2s-2p$ グループの電子が1個ずつ増え、それにつれて遮蔽定数への寄与が $1/3$ ずつ増えるので、 $s(C)=s(B)+1/3=9/3=3$ 、 $s(N)=10/3$ 、 $s(O)=11/3$ 、 $s(F)=12/3=4$ 、 $s(Ne)=13/3$ 。 $Z=11$ の Na から $Z=18$ の Ar までは、内側に $1s$ から $2p$ までの10個の電子があり、 $3s-3p$ グループの電子が1個ずつ増えて行くので、 $s=1/3 \times (Z-11) + 1 \times 10=(Z-11)/3+10$ となる。以上求めた s を用いて $Z-s$ を計算すると、次の表が得られる。

解答者学籍番号		解答者氏名	
---------	--	-------	--

問2. 原子番号 $Z=1$ から $Z=18$ までの基底状態の原子に電子1個が追加されたと仮定して、その追加された電子に対し、問1の遮蔽定数算出則を用いて、遮蔽定数 s を求めて有効核電荷 $Z-s$ の周期性を調べ、原子の電子親和力の周期性の特徴を説明せよ。ただし、以下に途中までの解答例を示すので、それを参考にして解答を続けよ。(ヒント: 電子親和力はハロゲンで最大になることが説明される。)

[解答] 追加された1個の電子に対する遮蔽定数 s は、それ以外の Z 個の電子の寄与から求められる。 $H(Z=1)$ では電子は $1s$ に追加されるので、同じ $1s$ の電子1個が遮蔽に寄与し、 $s(1)=1/3$ で、有効核電荷は、 $Z-s=1-1/3=2/3$ となる。次の $He(Z=2)$ では、外側の電子殻の $2s$ に電子が追加されるから、その電子に対し、内側の $1s$ 電子2個が遮蔽に寄与し、 $s(2)=1 \times 2=2$ となり、有効核電荷は、 $Z-s=2-2=0$ となる。以降、 $Z=9$ の F までは、 $2s-2p$ グループに電子が1つずつ追加されていくので、 $s(Z=2\sim 9)=1/3 \times (Z-2)+1 \times 2$ 、 $Z-s=(2/3)Z-4/3$ となり、