

1 水素原子のスペクトルの波数 $\bar{\nu}$ は次の式で表される。

$$\bar{\nu} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad m, n = 1, 2, \dots$$

これについて、以下の問いに答えよ。

(a) R の単位(ディメンション)を記せ。

(b) 水素原子のエネルギー順位 E_n (< 0 、 n は主量子数)を R を用いて表せ。必要ならば、さらに追加の記号を任意に定義せよ。

(c) 基底状態の水素原子のイオン化エネルギー(イオン化ポテンシャル) I_p を R を用いて表せ。

2 下表に示すのは2～10番元素の第1イオン化エネルギーである。この表を参考にしてに関する以下の問いに答えよ。ただし、第2イオン化エネルギーとは

$A^+ \rightarrow A^{2+} + e^-$ に要するエネルギーである。

第1イオン化エネルギー(イオン化ポテンシャル) / eV

${}_2\text{He}$	Li	Be	B	C	N	O	F	${}_{10}\text{Ne}$
24.59	5.39	9.32	8.30	11.26	14.53	13.62	17.42	21.56

(1) Beの第1イオン化エネルギーがLi、Bよりも大きいのはなぜか。

(2) どの元素の第2イオン化エネルギーも、その第1イオン化エネルギーよりも大きいのはなぜか。

(3) He～Neで第2イオン化エネルギーが最大となるのはどの元素か。そう判断した理由は？

(4) He~Ne で第 2 イオン化エネルギーが最小となるのはどの元素か。そう判断した理由は？

(5) B~F で第 2 イオン化エネルギーが最大となるのはどの元素か。そう判断した理由は？

3 オクテット則に配慮して、以下の設問に答えよ。

(a) 窒素分子の電子配置を構造を電子を点で表す方法で記せ。

(b) 同様にしてアンモニア NH_3 の構造を電子を点で表す方法で記せ。

(c) 同様にしてアンモニウムイオン NH_4^+ の構造を記せ（アンモニウムイオンは電子が 1 個少ない－正電荷を帯びている－ことに注意）。

(d) アンモニウムイオンの水素原子は全て等価である。このことから推測して、窒素原子はどのようにして（どのような混成状態で）等価な 4 本の結合を作っていると考えられるか。

(e) 二酸化炭素 CO_2 の結合を示せ（結合は O, C, O の順序である）。

4 水素分子の結合を理論的に説明するために、近似波動関数を用いる。

(a) 近似の波動関数を求める主要な方法の名称を二つ上げよ。

(b) 水素分子を構成する 2 個の水素原子 H_A 、 H_B について、それぞれの 1s 原子軌道関数を χ_A 、 χ_B として、各方法による近似波動関数（1 個の電子についての） ϕ を記せ（原子軌道関数以外に記号が必要になった場合はその定義も記すこと）。

(c) これらの波動関数はいずれも近似のあらい関数であるにもかかわらず、定性的には満足すべき結果を与えた。満足すべき結果とは何か。