

- 1) 水素原子の発光スペクトルは実験的にどのように整理され、理論的にどのように説明されるのか、詳しく述べよ。
- 2)a) 多電子原子のエネルギー準位の決定における遮蔽効果と侵入効果の役割についてできるだけ具体的に説明せよ。多電子原子の基底状態の電子配置は、どのような原理に基づいて構成されるのか、周期表第 2 周期の元素すべてについて説明せよ。
- b)  $_{47}\text{Ag}$  原子の基底状態の電子配置を示し、これに関連して Stern-Gerlach の実験を説明せよ。
- 3)  $\text{H}_2$ (水素分子)、 $\text{H}_2^+$ (水素分子陽イオン)、 $\text{H}_2^-$ (水素分子陰イオン) の結合エネルギー、結合距離は表 1 のように与えられる。各分子の結合の多重度(結合次数)を与えて、結合エネルギー、結合距離との関係を述べよ。また、 $\text{O}_2$ (酸素分子)、 $\text{O}_2^+$ (酸素分子陽イオン)、 $\text{O}_2^-$ (酸素分子陰イオン)について、結合エネルギー、結合距離の大小を推定せよ。 $\text{H}_2$ 、 $\text{H}_2^+$ 、 $\text{H}_2^-$ 、 $\text{O}_2$ 、 $\text{O}_2^+$ 、 $\text{O}_2^-$  分子の電子配置を示し、それに基づいて議論すること。

表 1  $\text{H}_2$ 、 $\text{H}_2^+$ 、 $\text{H}_2^-$  分子の結合エネルギーと結合距離

分子	結合エネルギー eV	結合距離 $\text{\AA}$
$\text{H}_2$	4.478	0.741
$\text{H}_2^+$	2.651	1.052
$\text{H}_2^-$	1 ~ 2	

4)a) 原子単位系を説明せよ。

b) 塩素原子  $^{17}\text{Cl}$  の AO の軌道エネルギーは、原子単位系で、 $\varepsilon_{1s} = -104.88$ 、 $\varepsilon_{2s} = -10.608$ 、 $\varepsilon_{2p} = -8.0725$ 、 $\varepsilon_{3p} = -0.5065$  である。AO 間の相互作用に関する 3 つの規則をすべて適用して、 $\text{HCl}$  分子の電子配置を説明せよ。各 AO の重なりの様子も図示し、永久双極子モーメントの生成にも触れること。

注意：以下の事項を守らない場合、カンニングとみなされることがある。  
 特に出題者からの許可がないかぎり、学生証、時計および筆記用具以外のものを机の上に置かない。  
 筆入れなども机の上に置かない。  
 教科書、参考書、ノート等は机の上に置かない。  
 解答用紙や計算用紙は所定の枚数以上に取らない。