

# 無機化学 1 レポート試験問題 (平成 18 年度)

(全 5 題)

締め切り：2007 年 2 月 5 日 (月) 17:00

提出場所：理学部第二教務掛 (6 号館 1 階)

## 問題 1 (45)

問 A  $(nd)^2$  電子系のエネルギー項として存在しうる状態の記号 (例： $(np)^2$  の場合には、存在しうるのは  $^1S$ 、 $^3P$ 、 $^1D$  の 3 種類) を全スピン角運動量(S)、全軌道角運動量(L)について注意しながら (全スピンの磁気量子数  $M_S$  を x 軸、全軌道の磁気量子数  $M_L$  を y 軸にとって図示しながら) 記せ。また、フント則を考えたときに、それらをエネルギーの低い順に並べよ。また、その際、最もエネルギーの低い状態について、全角運動量(J)の量子数 J を示しながらその項記号を記せ (例： $(np)^2$  の場合には、 $^3P_0$  が基底状態)。

問 B  $(nf)^2$  電子系のエネルギー項として存在しうる状態の記号を、問 A と同様に記せ (例： $(np)^2$  の場合には、存在しうるのは  $^1S$ 、 $^3P$ 、 $^1D$  の 3 種類)。また、フント則を考慮した際に最もエネルギーの低い状態について、全角運動量(J)の量子数 J を示しながらその項記号を記せ (例： $(np)^2$  の場合には、 $^3P_0$  が基底状態)。

問 C 次の C-1、C-2、C-3 の自由イオンについてフント則を考慮した際の基底状態の項記号を答えよ (例： $(np)^2$  の場合には、 $^3P_0$  が基底状態)。また、それぞれの場合について、Lande の  $g_J$  を求め、強磁場をかけそえた時の磁気モーメント  $\mu_z = -g_J \mu_B J_z$  と有効磁気モーメント  $\mu_{eff} = g_J \mu_B \sqrt{J(J+1)}$  をボーア磁子  $\mu_B$  を単位に求めよ。

ただし、 $g_J = 1 + \alpha = \frac{3}{2} + \frac{\vec{S}^2 - \vec{L}^2}{\vec{J}^2}$  である。

C-1:  $Pr^{3+}$       C-2:  $Tm^{3+}$       C-3:  $Ni^{3+}$

## 問題 2 (10)

ルビジウム (Rb) と銀 (Ag) の第 1 イオン化エネルギーはそれぞれ 4.18 eV and 7.57 eV である。ここで、Rb と Ag の原子番号 (Z) はそれぞれ 37 と 47 である。以下の間に答えよ。

問 A Rb と Ag の全電子の配置 (構造) を答えよ。 [ 例： $(1s)^2(2s)^2(2p)^1$  ]

問 B Rb と Ag において (第 1) イオンされる電子と同じ軌道を仮定し、以下の水素原子様モデルを用いて、この軌道電子の場合の仮想的な水素原子 (Z=1) のイオン化エネルギーを計算せよ。

$$E_n = -\frac{me^4 Z^2}{8h^2 \epsilon_0^2 n^2} = -13.60 \times \frac{Z^2}{n^2}, \quad (\text{eV})$$

ここで、 $\epsilon_0$  は真空の誘電率、 $h$  はプランク定数、 $m$  は電子の質量、 $-e$  は電子の電荷、 $n$  は主量子数である。

問 C 問 B で求められた値と、Rb および Ag の第 1 イオン化エネルギーの値との間の違いを説明せよ。(300 字程度)

### 問題 3 (10)

原子半径、イオン半径と有効核電荷の関係について簡単に説明せよ。(500 字程度)

### 問題 4 (10)

結晶中では結晶場の効果で、d 電子系の軌道角運動量は凍結（消失）する。その際の固有関数である  $d_{xy}$ 、 $d_{yz}$  関数を用いて、軌道角運動量の期待値  $\langle \vec{l} \rangle$  がゼロとなること、しかし軌道角運動量の二乗（大きさの二乗）、 $\langle \vec{l}^2 \rangle$  はゼロでなく  $l(l+1)$  となることを示し、軌道角運動量子数  $l$  は良い量子数ではないが、その二乗  $l^2$  は良い量子数であることを示せ。

### 問題 5 (25)

以下の { } 内の語句または関係を 5 つ選んでそれぞれ 500 字程度で説明せよ。図や数式を用いても良い。

{ド・ブロイ波、原子のボーアモデル、リュードベリ定数、シュレディンガー方程式、パウリの排他原理とフェルミ・ディラック分布関数、動径分布関数と球面調和関数、方位量子数（軌道角運動量子数）と磁気量子数、磁気モーメントと角運動量、スピン・軌道相互作用、フント結合と J-J 結合、ディラック方程式とスピン角運動量、磁化率のキュリーの法則、交換相互作用、フェルミ粒子とボーズ粒子、スレーターの有効核電荷}