

以下の問 (1) ~ (4) に答えよ。

(1) ボーアモデルによる水素原子のエネルギーは

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} \quad (\text{式1})$$

で与えられる。ここで、 h はプランク定数、 m_e は電子の質量、 e は電気素量、 ϵ_0 は真空の誘電率、 n は主量子数である。電子の質量は原子核の質量に比べ非常に小さいとする。以下の問(a), (b)に答えよ。計算の過程も示せ。必要ならば、光の速度 $c = 3.00 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$, $h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J s}$, $e = 1.60 \times 10^{-19} \text{ C}$, $m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$, $\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \text{ J}^{-1} \text{ C}^2 \text{ m}^{-1}$ を用いよ。

- (a) (式1) を用いて、基底状態の水素原子のイオン化エネルギーは 13.61 eV と求められる。このとき、主量子数 $n=2, 3$ の状態の軌道エネルギーを有効数字 3 桁で求めよ。
- (b) 水素原子のバルマー系列は、 n' ($n' > 2$) の始状態から、 $n=2$ の終状態への遷移である。始状態 $n' = 3$ の電子励起状態から遷移するバルマー α 線の波長をナノメートル単位、有効数字 2 桁で求めよ。

(2) 水素類似原子において、主量子数 $n = 2$ 、方位量子数 (オービタル角運動量量子数) $l = 1$ 、磁気量子数 $m = 0, \pm 1$ をもつ波動関数 $\psi_{n,l,m}$ は、ボーア半径 a 、原子番号 Z 、および三次元極座標 (r, θ, ϕ) を用いて

$$\psi_{2,1,0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a} e^{-\frac{Zr}{2a}} \cos\theta \quad (\text{式2})$$

$$\psi_{2,1,\pm 1} = \mp \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a} e^{-\frac{Zr}{2a}} \sin\theta e^{\pm i\phi} \quad (\text{式3})$$

で与えられる。以下の問(c), (d)に答えよ。計算の過程も示せ。

- (c) (式2) および (式3) で与えられた三つの波動関数を用いて、 $2p_x, 2p_y, 2p_z$ 軌道がそれぞれ x, y, z の関数として表せることを示せ。
- (d) 動径 r における微小体積要素 $d\tau$ に見いだされる電子の存在確率は、 $|\psi|^2 d\tau$ で与えられる。ここで、 $d\tau = r^2 dr \sin\theta d\theta d\phi$ である。 $2p_z$ 軌道において、 $r \sim r + dr$ の範囲に電子が存在する確率が最大となる動径 r_{max} を求めよ。

- (3) アルカリ金属 Na 原子において、ある電子励起状態から基底状態への遷移は、589.76 nm と 589.16 nm に分裂して観測され、D 線と呼ばれる。以下の問(e), (f)に答えよ。
- (e) Na の D 線の二つの遷移の始状態、終状態の項の記号を答えよ。また、D 線の分裂の起源となる相互作用を答えよ。
- (f) D 線の遷移強度は、始状態と終状態の多重度の積に比例すると考えて良い。D 線の遷移強度比を求めよ。
- (4) 炭素原子 ($Z = 6$) の基底状態の電子配置 $[\text{He}] 2s^2 2p^2$ について、以下の問(g), (h)に答えよ。
- (g) この電子配置において、とりうる項の記号をすべて記せ。また、その理由も述べよ。
- (h) (g)で記した項の記号に対応する電子状態について、エネルギーの低い順に項の記号を示せ。また、その理由を 100 字程度で説明せよ。