

構造化学 試験問題

S2,3-13,14

担当 平澤 冷

1996.2.19

- ・ノート、参考書などの持ち込み不可
- ・解答時間 90 分
- ・答案用紙 両面 1 枚

[1] 次の各事項について、水素原子を例として ((5) はこの限りではない)、各々 3 行以内で説明せよ。

- (1) シュレディンガー方程式
- (2) ハミルトニアン
- (3) 変数分離
- (4) 動径分布関数
- (5) SCF

[2] 原子の角度方向に関する電子分布について次の問いに答えよ。

- (1) 電子分布はどのような定義のもとに示されるか。定義を示せ。
- (2) 水素様波動関数の場合、 $2p_z$ に関する角波動関数は係数部分を除いて $\cos \theta$ で表される。 $2p_z$ 方向の電子分布を (1) の定義のしたがって導き、図示せよ。

[3] 水素原子を例として次の問いに答えよ。

- (1) 原子価結合法と分子軌道法による波動関数を示し、その根拠となる近似の考え方の違いについて述べよ。
- (2) 近似の程度は、分子軌道法とハイトラー ロンドンの原子価結合法とではどちらが良いか。どの理由とともに述べよ。
- (3) 共有結合の概念は、原子価結合法と分子軌道法でそれぞれどのように説明されるか。知るところを記せ。

[4] Na の発光スペクトルについて考えた。

- (1) Na 原子の基底状態と第 1 励起状態の電子配置を示せ。
- (2) それぞれの状態の項の記号を導き、Hund の規則を用いてエネルギー状態の準位を推定せよ。
- (3) (2) で導いた電子間の遷移により発光スペクトルは何本できるか。遷移する状態間の関係を図解して示せ。

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おかない。
筆入れなども鞆等にしまい、鞆は机の中、脇の椅子または床の上におく。
教科書、参考書、ノート等は鞆等にしまう。
解答用紙や計算用紙は所定の枚数以上に取らない。

