

期末試験(基礎講義・構造化学) 担当: 増田 茂 1999年2月

◎S-I 16, 25-26; S-II, III 15-16

◎答案用紙: 両面用1枚、試験時間: 90分

◎参考書、ノート、計算機持ち込み不可

[問題1] 質量 $m$ の粒子が $x$ - $y$ 平面内で原点からの距離 $r$ に比例した力( $\mathbf{F}=-k\mathbf{r}$ )のもとで振動運動している。このような2次元の調和振動子に対するSchorödinger方程式は、1次元の調和振動子の解を用いて容易に解くことができる。以下にその固有値と固有関数を示す。

$$\square \quad E_{n_x, n_y} = (n_x + n_y + 1)\hbar\omega$$
$$\Psi_{n_x, n_y}(x, y) \sim H_{n_x}(\alpha^{1/2}x)H_{n_y}(\alpha^{1/2}y)\exp(-\alpha x^2/2)\exp(-\alpha y^2/2)$$

$$\square \quad n_x = 0, 1, 2, \dots, n_y = 0, 1, 2, \dots, \omega = (k/m)^{1/2}, \alpha = \omega/\hbar$$

ここで、 $\hbar = h/2\pi$  ( $h$ : Planck定数)、また $H_{n_x}(\alpha^{1/2}x)$ および $H_{n_y}(\alpha^{1/2}y)$ は

$$\square \quad H_0(\xi) = 1, H_1(\xi) = 2\xi, H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12, \dots$$

で与えられる。以下の設問に答えよ。

- (1)この系のSchorödinger方程式を、座標 $(x, y)$ をあらわに含む形で記せ。
- (2)エネルギー順位を低い方から4つ求め、それぞれについて縮重度を調べよ。
- (3)粒子が $n_x = 0, n_y = 1$ の状態にあるとき、粒子を見出す確率にはどのような特徴が出現するであろうか? 古典的な粒子の場合と比較して述べよ。

[問題2] 基底状態にある水素原子の波動関数とエネルギーは

$$\square \quad \square \quad P_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = N \exp(-r/a_0), E_n = -me^4/8h^2\epsilon_0^2$$

である。ここで、 $a_0$ はBohr半径、 $m$ は電子の質量、 $e$ は電気素量、 $h$ はPlanck定数、 $\epsilon_0$ は真空の誘電率を表す。以下の設問に答えよ。

- (1) $n, l, m$ の名称と値を記せ。
- (2)規格化定数 $N$ を求めよ。ただし、必要なら公式( $\int_0^{+\infty} x^n \exp(-ax) dx = n!/a^{n+1}$ )を用いよ。
- (3) $r \sim r+dr$ の領域で電子を見出す確率 $P(r)dr$ を求めよ。また、 $P(r)$ は $r$ がBohr半径 $a_0$ に等しくなるとき、最大になることを示せ。
- (4)水素原子のイオン化エネルギーを求めよ。
- (5)水素原子を励起状態へ遷移させる方法について述べよ。

[問題3] 窒素分子は、酸素分子やフッ素分子と比べると、結合エネルギーが著しく大きく、また結合距離も短い(下表)。このような窒素分子の強固な化学結合を次の語句を用いて論じよ。

(語句)  $(1s)^2(2s)^2(2p)^3$ 、結合性軌道、反結合性軌道、三重結合

	電子数	結合エネルギー(eV)	結合距離(Å)
N <sub>2</sub>	14	9.8	1.1
O <sub>2</sub>	16	5.1	1.2
F <sub>2</sub>	18	1.6	1.4

[問題4] 量子論を導入しないと説明のつかない現象を1つ取り上げて、その具体的な内容を述べよ。

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。

筆入れなども鞆等にしまい、鞆は机の中、脇の椅子または床の上に置く。

※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。