



## 構造化学 期末試験

担当: 岡林潤  
2015.12.24

以下の【1】から【5】に答えよ。解答の順序は問わない。

### 【1】

以下について説明せよ。式を用いる場合は、講義で用いた文字をそのまま使用してよい。

1. 水素原子について、電子の運動方程式、エネルギー保存の式、ボーアの量子条件の式を記せ。これらを用いて、ボーア半径を導出せよ。
2. 前問 1. の場合に、エネルギーが下記の式になるときの  $X$  を求めよ。 $n$  は正の整数を表す。

$$E = X \cdot \frac{1}{n^2}$$

3. 時間に依存しない1次元波動方程式

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + \frac{\omega^2}{v^2}\phi(x) = 0$$

と、ド・ブロイの関係式から、1次元の Schrödinger 方程式を導け。

4.  $1s$ ,  $2p$ ,  $3d$  軌道の波動関数の形をすべて描き、関数型も示せ。(答えのみでよい)
5. 水素原子について、動径分布関数と期待値の違いは何か、説明せよ。
6. 有効核電荷の考え方について、説明せよ。
7. 二原子分子の結合長を求める方法を述べよ。
8. 炭素の二原子分子  $C_2$  は存在することができるか。分子軌道を用いて説明せよ。

### 【2】

$N_2$ ,  $O_2$ ,  $O_2^+$  について、電子配置を示して、以下の 1. ~ 4. の各量の大小関係を答えよ。理由も記すこと。

1. 結合次数  $P$
2. 解離エネルギー (結合エネルギー)  $D$
3. 結合の長さ  $R$
4. 磁気モーメント  $M$

**【3】**

一次元井戸型ポテンシャル（幅  $a$ ）を使って、ブタジエン ( $\text{C}=\text{C}-\text{C}=\text{C}$ ) の  $\pi$  電子が吸収する電磁波を調べよう。ただし、電子の質量を  $m$  とし、 $k > 0$  とする。

1. 電子が 0 から  $a$  の範囲にあるときの Schrödinger 方程式を求めよ。
2. 一般解  $\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$  において、 $A$  と  $B$  の関係、 $k$  の満たすべき条件を求めよ。
3. プランク定数  $h$ ,  $m$ ,  $a$ , 自然数  $n$  を用いて、エネルギー固有値を式で表せ。
4. 規格化条件により、波動関数の係数を決めよ。
5. ブタジエンの 4 つの  $\pi$  電子について、エネルギー準位図を示せ。
6.  $\pi$  電子が吸収する電磁波の最小のエネルギーを式で表せ。そして、その波長を記せ。
7. その電磁波の波長はエチレンの場合と比べて長いのか短いのか。また、その理由を簡潔に記せ。

**【4】**

水素原子の基底状態の波動関数は、 $\Psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0}$  と表される。ここで、ボーア半径を  $a_0$  とする。必要があれば、以下の公式を用いよ。

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\}$$

1. 3次元座標  $(x, y, z)$  を 3次元極座標表示  $r, \theta, \phi$  を用いて記せ。定義域も示すこと。ここで、 $\theta$  は  $z$  軸から降りてくる角、 $\phi$  は  $xy$  平面内の角度とする。
2. 極座標表示にて、微小空間の体積が、 $d\tau = r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi$  となることを示せ。
3. 位置エネルギー (Coulomb potential) の期待値  $\langle U \rangle$ , 運動エネルギーの期待値  $\langle K \rangle$  をそれぞれ求め、それらの比はいくらになるか。
4. 動径方向の Schrödinger 方程式を記せ。
5.  $\mathcal{H}\Psi_{1s}$  を演算することにより、エネルギー固有値を求めよ。結果を【1】2. と比較せよ。

**【5】**

異核二原子分子 CO および NO の化学結合について、以下の設問に答えよ。

1. 分子軌道によるエネルギー図、電子配置をそれぞれの分子について記せ。ただし、NO では、準位の逆転が起こらないものとして扱ってよい。
2. 双極子モーメントの向きを分子軌道に基づいて論ぜよ。
3. 双極子モーメントの値は、NO より CO の方がはるかに小さくなる。その理由を論ぜよ。
4. 窒素分子 ( $\text{N}_2$ ) と一酸化窒素 (NO) では、どちらの第一イオン化エネルギーが大きいか。理由とともに述べよ。

○ 時間の余った人は、講義への要望などを自由に記載してください。