



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 π 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 π 電子について、エネルギー準位図を示せ。
6. π 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, θ, ϕ を用いて記せ。定義域も示すこと。ここで、 θ は z 軸から降りてくる角、 ϕ 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 (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。