

●問4: ある水素型原子が次の規格化された波動関数で表されるような電子励起状態にあるとする。

$$\psi_{ex,1} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{2r}{a_0}\right) \exp\left[-\frac{r}{a_0}\right] \quad (\text{式4-1})$$

$a_0$  はボーア半径、 $r$  は電子と原子核の間の距離である。(ここでは換算質量が電子質量に等しいと仮定している)

A) この原子軌道に節面は何個あるか?

節面があれば、それらの形状、大きさを決定できる必要十分な情報を簡潔に記述せよ。

B) この原子の原子番号  $Z$  はいくつか? (理由記述は不要)

C) 極座標系 ( $0 \leq r \leq \infty$ ,  $0 \leq \theta \leq \pi$ ,  $0 \leq \phi \leq 2\pi$ ) で原子核を座標原点に置き、電子の座標を示すとする。座標が  $r$  から  $r+dr$  の間であり、かつ  $\theta$  から  $\theta+d\theta$ , なおかつ  $\phi$  から  $\phi+d\phi$  という条件を満たす微小な空間の体積は  $r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$  である。電子の位置をこの微小体積中に見いだす確率は  $P(r, \theta, \phi) dr d\theta d\phi$  と表される。(式4-1) を用いて  $P(r, \theta, \phi)$  を求めよ。結論だけ書けば十分である(途中を書いても減点しない)。

D) 次の積分を実行し、動径分布関数  $P_{RD}(r)$  を与えよ。 $P_{RD}(r) dr$  は電子と原子核の間の距離が  $r$  と  $r+dr$  の間に見いだされる確率を表す。

$$\int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} P(r, \theta, \phi) d\phi d\theta dr = P_{RD}(r) dr \quad (\text{式4-2})$$

E) (D)の結果を利用し、次の式を用いて電子と原子核の間の距離の期待値  $\langle r \rangle$  を求めよ。

$$\langle r \rangle = \int_0^{\infty} r P_{RD}(r) dr \quad (\text{式4-3})$$

ただし、次の式を利用してよい。

$$\int_0^{\infty} r^n \exp[-br] dr = \frac{n!}{b^{n+1}} \quad (\text{式4-4})$$

●問5  $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$  (塩化水素) の気体の赤外線領域に現れる吸収極大は  $2886 \text{ cm}^{-1}$  である。 $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$  と  $^2\text{H}^{35}\text{Cl}$  の原子間結合力が同じ力の定数  $k$  で表される調和振動子であると仮定し、 $^{35}\text{Cl}$ ,  $^1\text{H}$ ,  $^2\text{H}$  の原子質量をそれぞれ 35.0, 1.01, 2.01 (原子質量単位) とするとき、次の二つの量を求めよ。

A)  $^2\text{H}^{35}\text{Cl}$  (塩化重水素) の吸収極大波数。  $\text{cm}^{-1}$  単位で有効数字 3 桁まで求めよ。

B)  $^2\text{H}^{35}\text{Cl}$  (塩化重水素) の吸収極大波長。  $\mu\text{m}$  単位で有効数字 3 桁まで求めよ。