

構造化学 (加納) 試験問題 (H20.2.10)

〈注意事項〉

- ・解答の道筋も示すこと。
- ・必要に応じて、以下を用いよ。

$$\int_0^{\infty} x^n \exp(-\alpha x) dx = n!/\alpha^{n+1}$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2) ds = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

- ・以下の数値を具体的に代入する必要はない。

$$\pi = 3.141592\dots$$

$$e = 2.718281\dots$$

問 1. 一次元の調和振動子について以下の問いに答えよ。

問 1-1. $\psi(x) = \exp(-ax^2)$ が $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2$ の固有関数になるように a を求めよ。

問 1-2. 問 1-1 で求めた固有関数を用いて \hat{H} の期待値を求めよ。

問 2. 一辺の長さが L である二次元の箱中に、質量 m の粒子があるとする。 $x = 0, L$ 及び $y = 0, L$ においてポテンシャルエネルギーは無限大 (∞) となり、粒子は箱の中 ($0 < x < L$ かつ $0 < y < L$) に閉じ込められているとして、以下の問いに答えよ。

問 2-1. 箱の中 ($0 < x < L$ かつ $0 < y < L$) の粒子の Schrödinger 方程式を書け。

問 2-2. 問 2-1 の式を、境界条件として

$$\psi(0, y) = \psi(L, y) = 0 \quad (\text{すべての } y \text{ に対して})$$

$$\psi(x, 0) = \psi(x, L) = 0 \quad (\text{すべての } x \text{ に対して})$$

を用いて解くことで、エネルギー固有値、規格化された波動関数を求めよ。(一次元のときの解を既知のものと用いてもよい。)

問 2-3. 問 2-2 で得られたエネルギー固有値を用いて、エネルギー準位を図示せよ。固有エネルギーのことなる準位を、最低エネルギー準位を含め、低いものから四つ示せ。

問 3. 水素原子の基底状態にある電子の波動関数は、

$$\psi_{1s} = \left(1/\sqrt{\pi a_b^3}\right) \exp(-r/a_b)$$

で示される。ただし、 a_b は Bohr 半径である。

問 3-1. 電子の存在する確率が最も高い距離 r を求めよ。

問 3-2. 電子と原子核の距離 r の期待値 $\langle r \rangle$ を求めよ。

問 3-3. 電子が原子核から距離 $\langle r \rangle$ の内側にいる確率を求めよ。

問 4. 基底状態における N_2, O_2 分子と N_2^+, O_2^+ 分子の解離エネルギー*は以下の表のとおりである。 N_2 の結合は N_2^+ の結合よりも強いものに対して、 O_2 の結合は O_2^+ の結合よりも弱いのは何故か。それぞれの分子と分子イオンの電子配置と結合次数を用いて説明せよ。

分子または分子イオン	N_2	N_2^+	O_2	O_2^+
解離エネルギー (kJ mol ⁻¹)	712	612	490	625

*解離エネルギー: 分子を個々の原子に解離させるために必要なエネルギー