

量子化学 I 2011 年度

1. $-a < x < a$ ではポテンシャルエネルギーが 0(外では ∞)である井戸型ポテンシャルの中に閉じ込められた電子を考える

・(a)電子の取りうるエネルギー順位を求めよ。またその固有関数のパリティについて考察せよ。

・(b)エネルギーに井戸の大きさ a が入ってくる理由を説明せよ。

・(c)井戸の外が有限の高さ $V_0 > 0$ であるとき、偶のパリティを持つ解が唯一になる場合の条件を求めよ。

2. 質量 m 、角振動数 ω の調和振動子を考える。

・(a)分子振動が量子化されている実例をいくつか挙げ、それについて説明せよ。

・(b)2 原子分子の振動を考えると、上の質量 m は換算質量 $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ になる。その理由を説明せよ。

・(c)上の 2 原子分子で原子 1 の質量が m_1 から M_1 に変わった。すると振動のエネルギーはどのように変化するか。力の定数(バネ定数)が同位体置換でどうなるかについて注意せよ。

3. 原子の電子状態について以下の問に答えよ。

・(a)中心力ポテンシャル($V=V(r)$)の中の 1 電子エネルギー固有関数は $R_l(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ のような形にかける。特に、 $Y_{10}(\theta, \phi)$ は $A \cos \theta$ の角度依存性を示す。 R_l, Y_{10} をそれぞれ 1 に規格化するとき、規格化定数 A を決めよ。 $l=1$ の状態には m としてどのような値を取りうるか。

・(b)窒素原子は球対称でない p 軌道に 3 個の電子が詰まっているが、その電子分布は球対称になる。その理由を述べよ。ただし $Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}$ 。対スピン数はいくらか。

・(c)水素の $1s$ 関数は $\Psi_{1s}(r) = N \exp(-r)$ の形にかける。ただし、 N は規格化定数、長さの単位は原子単位を用いている。 N を求め、 $\langle r \rangle$ を $1s$ 状態に対して計算せよ。

・(d)水素の $2p$ 関数の動径部分は $R_{2p}(r) = \frac{r}{2\sqrt{6}} e^{-r/2}$ の形にかける。 $\langle r \rangle$ を $2p$ 状態に対して計算せよ。 $1s, 2p$ 軌道ではどちらが核から離れて分布しているか。