2005 年 11 月 28 日

化学第二 2005 年度中間試験	担当　真島 豊

適宜下記の物理定数と式とを用いること:

プランク定数 h =6.62×10^{-34} [Js]、ディラック定数 $\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$、光速 c =3.00×10^{8} [m/s]、

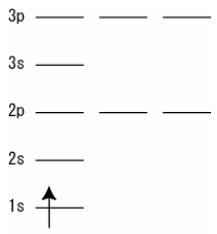
真空の誘電率 ε_0 =8.85×10^{-12} [F/m]、単位電荷 e =1.60×10^{-19} [C]、電子の質量 m =9.11×10^{-31} [kg]、

水素原子のシュレディンガーの波動方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)\Psi(r,\theta,\phi)-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\Psi(r,\theta,\phi)=E\Psi(r,\theta,\phi) \quad (1)$$

水素原子の1s軌道にある電子のエネルギー $E_{1s} = -\dfrac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0{}^2\hbar^2}$

1. 多電子原子について次の問に答えよ。



Hの電子配置

1－1　原子番号7、8番の窒素、酸素および11番のナトリウムから18番アルゴンまでの単原子の電子配置について、右図を参考にして示せ。

なお、右図は、水素原子の例であり、図における矢印は上向きスピンの電子一つをあらわしている。なお、下向きスピンの電子は下向きの矢印で示すこと。

1－2　第一イオン化エネルギーとは、どのようなエネルギーであるかを符号も含めて説明せよ。

1－3　ベリリウム **Be**（原子番号4）の第一イオン化エネルギー I_{Be} とホウ素 **B**（原子番号5）の第一イオン化エネルギー I_B を比較すると、$I_{Be} > I_B$ であった。このような大小関係となる理由を述べよ。

2. 水素原子のある軌道における波動関数が $\Psi = c\dfrac{r}{a}e^{\left(-\frac{r}{2a}\right)}\cos\theta$ とあらわされる時、次の問に答えよ。

2－1　波動関数 Ψ を(1)式に代入することにより、a の値を求めよ（計算過程を記すこと）。

2－2　波動関数 Ψ であらわされる軌道のエネルギー E を求めよ

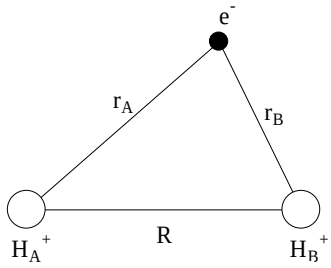
（この問2－2の答案には、変数 a を含めないこと）。

2－3　波動関数 Ψ を規格化せよ（答案用紙の枠の中に適当な数字または式を入れること、

この問2－3の答案では、変数 a を使うこと）。

2－4　波動関数 Ψ の主量子数 n と方位量子数 l のそれぞれの値とそのように考えられる二つの理由を記せ。

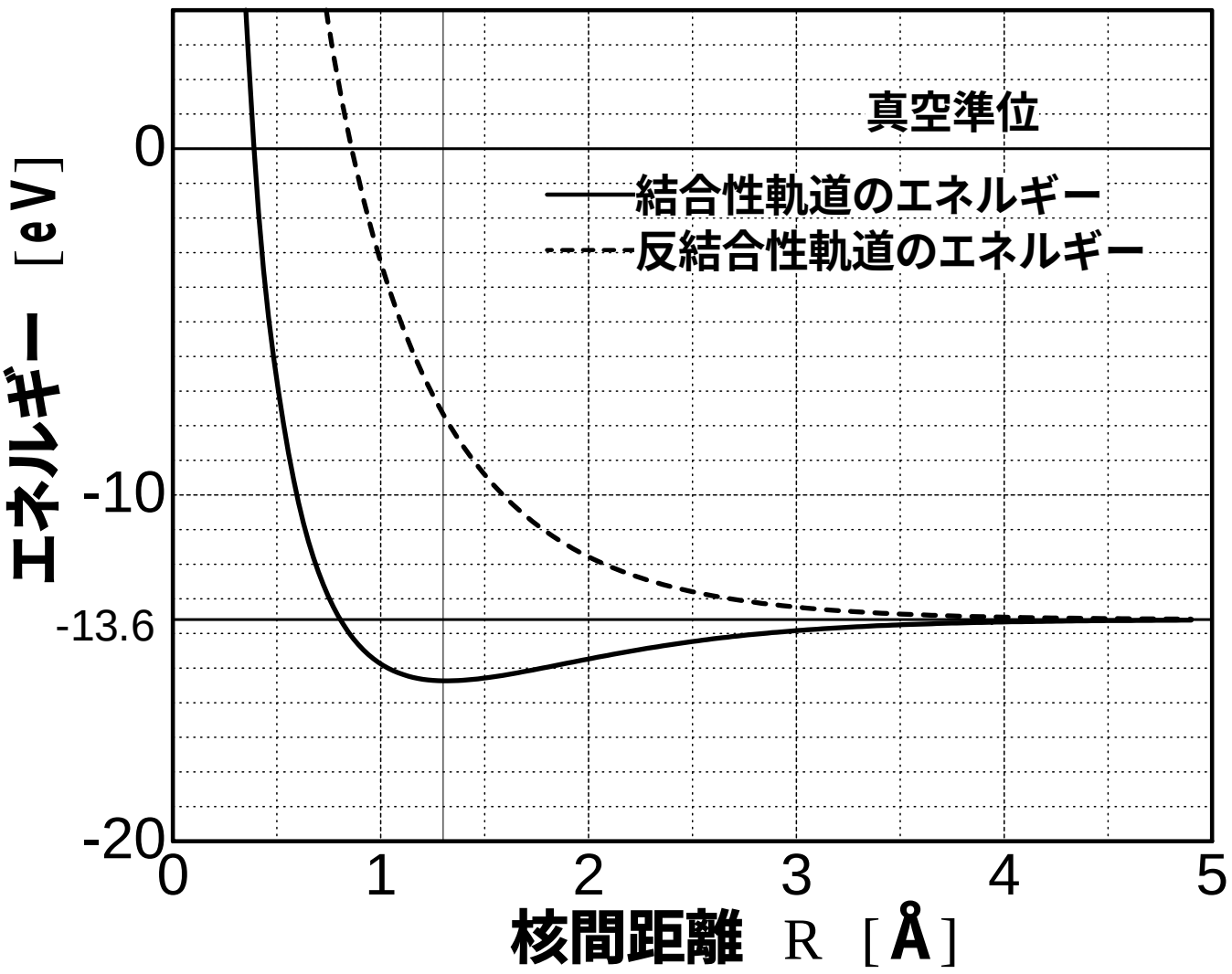
3. 水素分子イオン $H_2{}^+$ について次の問いに答えよ。



水素分子イオン $H_2{}^+$

3－1　水素分子イオンのハミルトニアンを記し、それぞれの項の意味を説明せよ。

3－2　結合性軌道と反結合性軌道の波動関数を $\Psi_1 = c_1(\Psi_A \pm \Psi_B)$ とするとき、それぞれの波動関数を規格化せよ（導出過程も書くこと）。ただし、Ψ_A および Ψ_B は、それぞれ水素原子 A と B の電子の波動関数とする。

３－３　結合性軌道と反結合性軌道のエネルギーの核間距離依存性を次ページに示す。水素分子イオン $H_2{}^+$ を、光を照射することにより水素原子と陽子に分解させるための光の波長を理由と共に記せ。

水素分子イオンH_2^+の結合性軌道と反結合性軌道のエネルギーの核間距離依存