

構造化学(山下) 試験問題(H19.2.13)

問題1 e^{ikx} が演算子 $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$ の固有関数であることを示し、また固有値をもとめよ。

この固有値方程式の物理的意味を説明せよ。

問題2 無限に深い一次元箱

$$V(x) = \begin{cases} \infty & (x \leq 0) \\ 0 & (0 < x < L) \\ \infty & (L \leq x) \end{cases}$$

の場合について、以下の問に答えよ。

(1) 波動関数の一般解を $\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$ として、箱の内側 ($0 < x < L$) での粒子の波動関数とエネルギーを求めよ。ただし $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ 。

(2) 異なる量子数の波動関数は直交していることを示せ。

問題3 水素様原子の 2s 原子軌道の平均半径を計算せよ。

$$2s \text{ 原子軌道の動径成分: } \Psi_{2s} = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$$

ただし a_0 はボーア半径、 Z は原子番号を示す。

必要に応じて積分公式: $\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$ を用いてよい。

また角度成分についての積分は規格化されていることに注意せよ。

問題4 もし電子の波動関数がパウリの原理を満たさないと、どのようなことが起こるかを予測せよ。

問題5 等核二原子分子の分子軌道と電子配置について例をあげて説明せよ。