

第1問 電子のような粒子が狭い領域に閉じ込められたときに、電子が持ちうるエネルギーが特定の値に量子化される様子を下記のように考えた。それぞれの問に答えよ。

(1) 電子が1次元の直線上0から a の範囲のみを動けるとする。電子は

$$\Psi(x) = A \sin kx$$

で表される波動として振舞うとして、定在波の条件から k の満たすべき式を書け。

(2) ドブロイの関係式、 $\lambda = h/p$ から電子の取りうるエネルギーの式を導け。運動エネルギーのみを考慮すればよい。

(3) a が 10^{-9}m の時、電子の取りうるエネルギーで最も低い状態と、その次に低い状態のエネルギーの差を J 単位で求めよ。ただし、 $h = 6.6 \times 10^{-34}\text{Js}$ 、 $m = 8.1 \times 10^{-31}\text{kg}$ である。有効数字は1桁でよい。 m は電子の質量である。

(4) (1)の波動の式は、量子力学ではシュレディンガー方程式の解として得られる。解の関数は波動関数と呼ばれるが、通常は規格化の条件を満たすように係数 A が決められる。規格化の式を示せ。

(5) 規格化された波動関数はどのように解釈されるか。

第2問 原子に関する以下の問に答えよ。

(1) 水素原子の電子の波動方程式は、量子数 n 、 l 、 m を用いて $\Psi_{nlm}(\mathbf{r})$ と表されるが、これはまた、 $3s$ 、 $2p$ 、 $4d$ などとも表される。 $3s$ 、 $2p$ 、 $4d$ のそれぞれに対応する量子数を示せ。複数の値の可能な量子数についてはすべて示せ。

(2) Na原子の電子配置を考える。電子が配置される軌道の軌道エネルギーを図示せよ。エネルギーの絶対値は正確でなくてよいが、その順序は正しく再現すること。

(3) (2)で示した軌道エネルギーの図に電子を配置せよ。配置される電子は、上向き、あるいは下向きの矢印で示すこと。なお、Naは $Z = 11$ である。

(4) Na中の電子エネルギーは、水素原子の式がそのまま使えたとすると、

$$E_n = -R(Z^2/n^2)$$

で表されるはずである。これを元にNaの第1イオン化エネルギーを eV 単位で求めよ。

ただし、 $R = 1.1 \times 10^7\text{m}^{-1}$ 、 $1\text{eV} = 8.1 \times 10^{-5}\text{m}^{-1}$ である。有効数字2桁でよい。

(5) 実際のイオン化エネルギーはこれよりずっと小さい。その理由を簡単に説明せよ。

第3問 等核2原子分子の結合に関する下記の問に答えよ。

(1) $2p$ 軌道同士の重なりにより、結合性と半結合性の軌道の出来る様子を波動関数の概念的な図を書くことにより示せ。

(2) $2p$ 軌道同士の重なりのみを考えたときの分子軌道のエネルギー準位を示し、それぞれの軌道に名前を付けよ。ちなみに、 $1s$ 軌道同士から出来る軌道は、 σ_g と σ_u である。

(3) 縮重のある軌道は、このうちどれか。

(4) 酸素分子の場合に、電子が配置される最もエネルギーの高い軌道はどれか。

(5) その軌道にどのように電子が配置されるか、第2問の(3)と同様の方法で示せ。

(6) 酸素分子が1価の陽イオンになったとき、結合は強くなるか、弱くなるか。理由も書け。