

物理化学演習 II-2 試験

2025 年 7 月 22 日 (火)

次の問いに答えよ。必要であれば、以下を参考にしても良い。

• a_0 (Bohr半径) = 5.29×10^{-11} m

• $\int_0^{+\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}, \int_0^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \left(\frac{\pi}{4a}\right)^{1/2}, \int_0^{+\infty} x e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2a}, \int_0^{+\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{4a} \left(\frac{\pi}{a}\right)^{1/2}$

1. 原子番号 Z の水素型原子において、 $2p$ 電子の動径波動関数は半径 r の関数として、以下の式で表される。今、 $Z=1$ である時、この電子が見出される確率が一番高い半径 $r_{\max}$ を求めよ。(15 点)

$$R_{2,1} = \frac{1}{\sqrt{24}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} r e^{-\frac{Zr}{2a_0}}$$

2. パウリの排他原理とフントの最大多重則について、簡潔に説明せよ。(20点)

3. 水素型原子の発光スペクトルにおいて、次の遷移のうち許容されるものはどれか。

(i) $2s \rightarrow 1s$, (ii) $2p \rightarrow 1s$, (iii) $3d \rightarrow 2p$ (15点)

4. Born-Oppenheimer近似について説明せよ。(10点)

5. O_2 と O_2^- と O_2^+ の結合次数を求めよ。また、解離エネルギーと結合の長さについてこれら三つの酸素を比較せよ。(15点)

6. ヒュッケル法に基づいて、 H_3^+ , H_3 , H_3^- について、直線型 ($H-H-H^+$ など) と三角形状態でどちらが安定か決定せよ。(Tip: β はマイナスであることに注意) (15点)

7. 水素原子の基底状態の動径波動関数は Ne^{-r/a_0} である。規格化定数 N を求めよ。(10点)

8. 物理化学演習II-1および2の感想 (自由に記載してもらって構いません。何を書くか困った人は、本演習で十分に勉強したかどうか (毎回の問題を解くのに要した時間+自習時間)、等について教えて下さい。(10点)