

基礎物理化学 A 期末試験問題 (2013 年度)

以下の問 1 ~ 5 に答えよ。記号の意味は、特に断らない限り、講義と同じとする。

1. $\psi(\mathbf{r})$, $\phi(\mathbf{r})$, $\varphi(\mathbf{r})$ を相異なる 1 電子軌道関数、 α , β をスピン関数とする。次のうち可能な電子配置を選び、簡潔な理由とともに記号で答えよ。

- (a) $\psi(\mathbf{r}_1)\alpha(1) \psi(\mathbf{r}_2)\alpha(2)$
- (b) $\psi(\mathbf{r}_1)\alpha(1) \phi(\mathbf{r}_2)\alpha(2)$
- (c) $\psi(\mathbf{r}_1)\alpha(1) \phi(\mathbf{r}_2)\beta(2) \psi(\mathbf{r}_3)\alpha(3)$
- (d) $\psi(\mathbf{r}_1)\alpha(1) \phi(\mathbf{r}_2)\alpha(2) \phi(\mathbf{r}_3)\beta(3)$
- (e) $\psi(\mathbf{r}_1)\alpha(1) \phi(\mathbf{r}_2)\alpha(2) \phi(\mathbf{r}_3)\beta(3) \varphi(\mathbf{r}_4)\beta(4)$

2. (1) ナトリウムの電子配置は、 $\text{Na}:[\text{Ne}](3s)^1$ と書くことができる。これにならい、ベリリウム、アルミニウム、カリウムの電子配置を書け。
- (2) 水素類似原子において、主量子数 n が 4 であり、磁気量子数 m が $-2, -1, 0, 1, 2$ の値をとるとき、対応する方位量子数 l の値は何か。また、この原子軌道の名称 (例: $1s, 2p$) を記せ。
- (3) 水素類似原子において、主量子数 $n = 7$ の殻に含まれる軌道の数を記せ。
(例えば、 $n = 2$ の場合は、 $2s$ および $2p$ が 3 個で計 4 個である。)

3. $\text{H}_2, \text{He}_2, \text{Li}_2$ 分子の安定性について、分子軌道法に基いて定性的に議論せよ。

4. 一次元の箱の中の粒子 ($0 < x < L$ で $V(x) = 0$, $x \leq 0, x \geq L$ で $V(x)$ は $+\infty$ に発散) の最低エネルギー状態の量子数を $n = 1$ とする。粒子が $L/4 \leq x \leq 3L/4$ の範囲に見出される確率が $\frac{1}{2} - \frac{1}{3\pi}$ であるような n の値を求めよ。

5. シクロプロペリニウムイオン (C_3H_3^+) の π 分子軌道エネルギーを Hückel 法により求めよ。最低エネルギーの分子軌道の係数を求め、分子軌道の概形を描け。使用する変数やパラメータの定義を与え、途中の計算を明示すること。

以上。