

基礎物理化学A 期末試験問題題 (2007年度)

1. 量子力学または量子化学の確立、発展にむけて活躍した人物を一人挙げ、その功績について簡単に説明せよ。
2. 一次元系で運動している、質量 m の粒子を考える。
 - (a) ポテンシャルが座標だけによる ($= V(x)$) として、時間に依存しないシュレディンガー方程式を書け。
 - (b) 次式のように表される一次元ポテンシャル系について考える。

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

波動関数 $\psi(x)$ を、

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$$

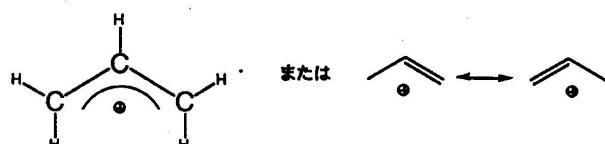
とおいて、境界条件、規格化条件を書け。ただし、量子数を n とする。

- (c) 以上より、量子数 n を含んだ波動関数、エネルギー固有値を導け。
3. 水素類似原子を考える。

- (a) 原子内の電子の状態を表すのに用いられる 4 つの量子数を全て書け。
- (b) 上で用いた量子数の取り得る値、そして取り得る軌道の数について説明せよ。

次に、多電子原子について考える。

- (c) 典型元素の中から一つ原子を挙げ、その基底状態の電子配置と項記号（全角運動量 J も含む。以下同様）を書け。
- (d) 遷移金属元素の中から一つ原子を挙げ、その基底状態の電子配置と項記号を書け。
- (e) 電子配置 $(2p)^1(3p)^1$ から生じ得る項記号を書け。
4. アリルカチオン（下図）の π 分子軌道をヒュッケル法によって計算し、その概形と軌道エネルギー図を描け。また、分子軌道の節（node）の数も記入せよ。



5. 前期講義を終えて、最も印象に残ったことについて、思うままに述べよ。

以上。