電子の質量 m_e：9.109×10^{-31} kg

電気素量 e：1.609×10^{-19} C

プランク定数 h：6.626×10^{-34} Js

ディラック定数 $h/2\pi$ ：1.055×10^{-34} Js　　いわゆる「h バー」

中性子の質量 m_n：1.674×10^{-27} kg

ボルツマン定数 k：1.381×10^{-23} JK^{-1}

ボーア半径 a_0：5.292×10^{-11} m

光の速さ c：2.998×10^{8} ms^{-1}

陽子の質量：1.673×10^{-27} kg

リュードベリ定数 R_H：1.09677×10^{7} m^{-1}

1 eV=1.602×10^{-19} J

例題 11･2

静止状態の電子が 40kV の電位差で加速された場合の、この電子の波長を求めよ。

自習問題 11･2

300K で kT に等しい並進エネルギーをもつ中性子の波長を計算せよ。

例題 11･3

水素原子の最低エネルギー状態にある電子の波動関数は e^{-r/a_0} に比例する。この電子を(a)核の位置、(b)核から a_0 離れた位置にある、体積 1.0pm³ の、原子スケールで見ても小さな領域に見出す相対的な確率を計算せよ。

{(a)の 1.0pm³ で電子を見出す確率÷(b)の 1.0pm³ で電子を見出す確率} を求めればよい。

自習問題 11･3

He+イオンにおける最低エネルギーの波動関数は e^{-2r/a_0} に比例する。このイオンについて、例題 11･3 と同じ計算を行え。

以上２題では比を求めるだけなので、波動関数を規格化する必要はない。

例題 11･4

例題 11･3 で水素原子に対して使った波動関数を規格化せよ。

自習問題 11･4

自習問題 11･3 で与えられた波動関数を規格化せよ。

例題 11･5

e^{ax} が演算子 d/dx の固有関数であることを示し、対応する固有値を求めよ。e^{ax^2} が d/dx の固有関数ではないことを示せ。

言葉の意味を知ってもらいたくて出題しました。解答を見て納得してもらえれば OK です。

自習問題 11･5

cos(ax)は、(a)d/dx、(b)d^2/dx^2 の固有関数か。

例題 11･6

最低エネルギー状態にある水素原子において、原子核から電子までの距離の平均値〈r〉を計算せよ。

例題 11･4 で求めた波動関数を用いる。

自習問題 11･6

水素原子において、原子核から電子までの根平均二乗距離 $\langle r^2 \rangle^{1/2}$ を求めよ。

例題 11･7

質量 1.0g の弾丸の速さが $1\times10^{-6}ms^{-1}$ の精度で分かっている。その位置の不確かさの下限を計算せよ。

自習問題 11･7

長さが $2a_0$ の一次元領域における電子の速さの不確かさの下限値を求めよ。

演習 11･4a

波長が 3.0cm の電子の速さを計算せよ。

演習 11･4b

波長が 3.0cm の中性子の速さを計算せよ。

演習 11･7a

ある原子のイオン化に要するエネルギーが $3.44\times10^{-18}J$ である。波長が未知のフォトンを吸収して、この原子がイオン化し、$1.03\times10^{6}ms^{-1}$ の速さをもつ電子を放出した。入射光線の波長を計算せよ。

フォトンの持つエネルギーは $h\nu$。

演習 11･8a

速さが $4.5\times10^{5}ms^{-1}$ の陽子がある。その運動量の不確かさを 0.0100 パーセント以内に押えようとすると、どれだけの位置の不確かさを我慢せねばならないか。

演習 11･8b

速さが $995kms^{-1}$ の電子がある。その運動量の不確かさを 0.0010 パーセント以下に押えようとすると、どれだけの位置の不確かさを我慢せねばならないか。

演習 11･16a

(a)$1.0cms^{-1}$ で動いている質量 1.0g の物体、(b)$100kms^{-1}$ で動いている同じ物体、(c)$1000ms^{-1}$ で動いている He 原子（室温における代表的な速度である）のド・ブローイ波長を計算せよ。

演習 11･16b

静止状態にある電子を(a)100V、(b)1.0kV、(c)100kV の電位差で加速したときの、ド・ブローイ波長を計算せよ。

演習 11.17a

質量 500g のボールが、バットの上のある決まった点から 1.0μm 以内のところにあることがわかっている。このボールの速度の不確かさの下限値を計算せよ。質量 5.0g の弾丸の速さが 350.00001ms-1 と 350.00000ms-1 の間のどこかにあることが分かっている。その位置の不確かさの下限はいくらか。

演習 11･17b

電子が原子の直径と同じ程度の長さ（約 100pm）の直線領域に閉じ込められている。その位置と速さの不確かさの下限の値を計算せよ。

問題 11･5

長さ L の一次元の箱に閉じ込められた粒子の基底状態の波動関数は、

$$\Psi=(2/L)^{(1/2)}\sin(\pi x/L)$$

である。箱の長さを 10.0nm として、粒子が(d)箱の右半分、(e) 3 等分した箱の中心部にある確率を計算せよ。

問題 11･6

水素原子の基底状態の波動関数は、

$$\Psi=(1/\pi a_0{}^3)^{(1/2)}e^{-r/a0}$$

で、a_0=53pm（ボーア半径）である。(a)電子が原子核を中心とする半径 1.0pm の小球の中のどこかに見出される確率を計算せよ。(b)同じ球を $r=a_0$ の位置に移したとする。電子がこの中にある確率はいくらか。

数値計算はパソコンなしでは出来ないので、考え方だけチェックすれば OK です。

例題 12･1

ド･ブローイの関係式と波動関数の境界条件から、箱の中の粒子のエネルギー準位を導け。

長さ L の一次元の箱を考えればよい。

自習問題 12･1

量子数 n をもつ箱の中の粒子の直線運動量の平均値はいくらか。

自習問題 12･2

原子核の直径（1fm）とだいたい等しい長さの一次元の無限に深い井戸に閉じ込められたプロトンの第一励起エネルギーを計算し、代表的な原子核励起エネルギーを求めよ。

例題 12･2

長さ 1.0nm の箱の中で、x=0（左の端）と x=0.2nm の間に最低エネルギー状態の電子がある確率 P はいくらか。

$\Psi=(2/L)^{(1/2)}\sin(\pi x/L)$ を用いる。

自習問題 12･3

n=1 の状態にある粒子が長さ L の箱の中で、x=0.25L と x=0.75L の間に見いだされる確率を計算せよ（左側の壁の位置を x=0 とおけ）。

演習 12･1a

長さ 1.0nm の箱の中の電子の二つの準位(a)n=2 と n=1、(b)n=6 と n=5、の間のエネルギー間隔を計算し、ジュール(J)、1 モル当たりのキロジュール(kJ/mol)、電子ボルト(eV)および 1 センチメートル当たりの端数(cm^{-1})で答えよ。

演習 12･1b

長さ 1.5nm の箱の中の電子の二つの準位(a)n=3 と n=1、(b)n=7 と n=6、の間のエネルギー間隔を計算し、ジュール(J)、1 モル当たりのキロジュール(kJ/mol)、電子ボルト(eV)および 1 センチメートル当たりの端数(cm^{-1})で答えよ。

演習 12･2a

一辺の長さが L の箱の中の 0.49L から 0.51L の間に(a)n=1、(b)n=2 の粒子を見出す確率を計算せよ。波動関数はこの範囲で一定であるとせよ。

$\Psi=(2/L)^{(1/2)}\sin(\pi x/L)$ を用いる。

演習 12･2b

一辺の長さが L の箱の中の 0.65L から 0.67L の間に(a)n=1、(b)n=2 の粒子を見出す確率を計算せよ。波動関数はこの範囲で一定であるとせよ。

演習 12･4a

一辺の長さが L の箱の中で n=3 の状態にある粒子が一番よく存在する位置はどこか。

演習 12･4b

一辺の長さが L の箱の中で n=5 の状態にある粒子が一番よく存在する位置はどこか。

問題 12･2

おおざっぱな一次近似では、直鎖ポリエン中の π 電子は一次元の箱の中の粒子であると考えてもよい。ポリエンである β-カロテンは、共役 C 原子を 22 個含んでおり、平均核間距離は 140pm である。n=11 までのおのおのの状態は 2 個の電子で占められている。つぎの量を計算せよ。(a)基底状態と、1 個の電子が n=12 の状態を占めた第一励起状態の間のエネルギー間隔、(b)これらの二つの状態の間で遷移を起こすのに必要な放射線の振動数、(c)22 電子分子の基底状態で、11 番目と 12 番目の C 原子の間に電子を見出す総確率。

数値計算はパソコンなしでは出来ないので、考え方だけチェックすれば OK です。

自習問題 13･1

パッシェン系列の最短波長の遷移の波長を計算せよ。

水素原子のスペクトル系列の名前は、$n_1=1$：ライマン、$n_1=2$：バルマー、$n_1=3$：パッシェン、$n_1=4$：ブラケット。

自習問題 13･2

原子核の位置における 2s 電子の確率密度を計算せよ。

水素型原子の 2s 軌道の波動関数は、$\Psi=1/(2\sqrt{2})\times(Z/a_0)^{(3/2)}\times(2-Zr/a_0)e^{-Zr/2a0}$

例題 13･2

水素型オービタルを使って、1s オービタルの平均半径を計算せよ。

水素型原子の 1s 軌道の動径波動関数は、$R=2\times(Z/a_0)^{(3/2)}\times e^{-Zr/a0}$

例題 13･7

(a)Na と(b)F の基底配置と(c)C の励起配置 $1s^2 2s^2 2p^1 3p^1$ に対する項の記号を書け。

全角運動量のことです。授業では ^3D（ディー・トリプレット）が例に上がりました。

意味が分からない人は　http://rhp.ninja-x.jp/shikepuri/NOTE/　を参照のこと。

自習問題 13･10

配置(a)$2s^1 2p^1$、(b)$2p^1 3d^1$ から生じる項を書け。

演習 13･2a

2s 動径波動関数を考える。この振幅に極地が二つあることを示し、その位置を決定せよ。

水素型原子の 2s 軌道の動径波動関数は、$R= 1/(2\sqrt{2})\times(Z/a_0)^{(3/2)}\times(2-Zr/a_0)e^{-Zr/2a0}$

演習 13･3a

H 原子の 3s オービタルにおける半径方向の節の位置を決定せよ。

水素原子の 3s 軌道の動径波動関数は、$R= 1/(9\sqrt{3})\times(1/a_0)^{(3/2)}\times(6-r/a_0+4r^2/9\ a_0^2)e^{-r/3a0}$

演習 13･4a

水素原子の基底状態の波動関数は $Ne^{-r/a0}$ である。規格化定数 N を決定せよ。

アトキンスにはこう書かれていますが、動径波動関数 R のことを言いたいようです。

演習 13･6a

水素型原子における 2s 電子の動径分布関数の式を書き、この電子が見いだされる確率が一番高くなる半径を決定せよ。

水素型原子の 2s 軌道の動径波動関数は、$R= 1/(2\sqrt{2})\times(Z/a_0)^{(3/2)}\times(2-Zr/a_0)e^{-Zr/2a0}$

演習 13･10a

水素原子において、つぎのエネルギーをもつ準位のオービタルの縮退度を求めよ。

(a)$-hcR_H$、(b) $-hcR_H/9$、(c) $-hcR_H/25$

演習 13･12a

H 原子において、半径がいくらになったら、電子を見いだす確率がその最大値の50%に落ちるか。

水素原子の 1s 軌道の波動関数は、$\Psi=1/\sqrt{(\pi a_0^3)}\times e^{-r/a0}$

演習 13･14a

つぎの副殻を占有できる電子の数はいくらか。(a)1s、(b)3p、(c)3d、(d)6g。

演習 13･14b

つぎの副殻を占有できる電子の数はいくらか。(a)2s、(b)4d、(c)6f、(d)6h。

演習 13･16a

あるイオンが、異なるオービタルに(a)2 個、(b)3 個、の電子をもっているとする。全スピン量子数 S の可能な値はいくらか。それぞれの場合の多重度はいくらか。

演習 13･16b

あるイオンが、異なるオービタルに(a)4 個、(b)5 個、の電子をもっているとする。全スピン量子数 S の可能な値はいくらか。それぞれの場合の多重度はいくらか。

演習 13･19a

(a) Li [He]$2s^1$、(b)Na [Ne]$3p^1$ に対して可能な項の記号を求めよ。

問題 13･2

水素原子のスペクトルの中に、波長が 656.46nm、486.27nm、434.17nm、410.29nm の系列がある。この系列でつぎに現れる線の波長はいくらか。原子がこれらの遷移それぞれの低い側の状態にあるときには、この原子のイオン化エネルギーはいくらになるか。

問題 13･9

電子が 2s オービタルにいるときと 2p オービタルにいるときのどちらが平均して原子核から遠くにあるか。

問題 13･11

厳密な積分を行って、水素型原子の(a)1s と 2s オービタル、(b)$2p_x$ と $2p_y$ オービタルが互いに直交することを示せ。

例題 14･2

次の式で表される分子オービタルΨ_+を規格化せよ。

$\Psi_+=N(A+B)$

原子 a のオービタルを A、原子 b のオービタルを B として、LCAO-MO 法で合成した波動関数である。重なり積分を S として計算する。

自習問題 14･3

次の式で表される分子オービタルΨ_-を規格化せよ。

$\Psi_-=N(A-B)$

例題 14･3

N_2^+ では N_2 より解離エネルギーが大きくなるか､あるいは小さくなるかを調べよ。

自習問題 14･4

F_2 と F_2^+ のどちらが高い解離エネルギーをもつと予想できるか。

演習 14･1a

つぎの分子の基底状態の電子配置と結合次数を求めよ。(a)Li_2、(b)Be_2、(c)C_2

演習 14･1b

つぎの分子の基底状態の電子配置を求めよ。(a)H_2^-、(b)N_2、(c)O_2

演習 14･3a

B_2 と C_2 の基底状態の電子配置から、どちらの分子の方が結合解離エネルギーが大きかを考えよ。

演習 14･3b

つぎの分子の中で、(a)電子を加えて AB^- にするとき、(b)電子を取除いて AB^+ にするとき、安定化すると予想できるのはどれか。N_2、NO、O_2、C_2、F_2、CN。

演習 14･7a

NO と N_2 の電子配置を使って、どちらの結合長が短くなりそうかを予想せよ。

演習 14･7b

つぎの化学種を結合長の増加する順に並べよ。O_2^+、O_2、O_2^-、O_2^{2-}。

おまけ　～SI 接頭辞について～

この問題集の中でも、k（キロ）、G（ギガ）、n（ナノ）、p（ピコ）、f（フェムト）などの接頭辞が出てきました。いい機会なので、接頭辞についてまとめておきます。

指数	記号	読み方	用例・解説
10^{24}	Y	ヨタ	
10^{21}	Z	ゼタ	
10^{18}	E	エクサ	
10^{15}	P	ペタ	スーパーコンピュータが 1 秒間こなせる計算回数。
10^{12}	T	テラ	日本の国債残高は 850T 円くらい。
10^{9}	G	ギガ	携帯電話(3G)の電波の周波数は 2GHz くらい。
10^{6}	M	メガ	ピカチュウ（死語？）の 10 万ボルトは 0.1MV。
10^{3}	k	キロ	SI 単位系で、重量を表す g（グラム）にだけ、標準で k（キロ）がついていることにお気づきでしたか？
10^{2}	h	ヘクト	hPa（ヘクトパスカル・気圧）、ha（ヘクタール・面積）
10^{1}	da	デカ	
10^{0}	なし		
10^{-1}	d	デシ	dl（デシリットル・容積）
10^{-2}	c	センチ	ドルの補助単位セントやパーセントでおなじみ。
10^{-3}	m	ミリ	百分率・パーセント(%)は有名ですが、千分率・パーミル(‰)はご存じですか？
10^{-6}	μ	マイクロ	電子レンジのマイクロ波の波長は μm オーダー。携帯電話の電波と同じくらいです。
10^{-9}	n	ナノ	パソコンの CPU 設計は nm オーダー。原子 10 個分くらいの幅の導線で回路を作ります。
10^{-12}	p	ピコ	原子の大きさはこれくらい。ボーア半径は 52.9pm。
10^{-15}	f	フェムト	携帯電話の超小型基地局「フェムトセル」の由来。
10^{-18}	a	アト	
10^{-21}	z	ゼプト	
10^{-24}	y	ヨクト	