生物応用化学演習 I

無機化学演習2

2012年6月15日

[演習問題]
[1]8章　自習問題8・6，理論的問題8・15と8・16(pp284)
[2]9章　自習問題9・4と9・8(2Hの質量は1Hの2倍とする)。
　　　演習9・10bと9・15b(pp327)
[3]10章　文章問題10・2(pp373)

[1]自習問題8・6

xy面内で円周上を動いている粒子の角運動量に対する演算子は，ϕを粒子の角度位置とすると，

$$\hat{l}_z = (\hbar/i)\mathrm{d}/\mathrm{d}\varphi$$

である．$e^{-2i\phi}$という波動関数で表される粒子の角運動量を求めよ．

[例解]波動関数$e^{-2i\phi}$が角運動量演算子 $\hat{l}_z$ の固有関数であれば固有値方程式が得られる．そして，固有値が求める角運動量である．

$$\hat{l}_z = \left(\frac{\hbar}{i}\right)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}$$

$$\Psi = e^{-2i\varphi}$$

$$\hat{l}_z\Psi = \left(\frac{\hbar}{i}\right)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}e^{-2i\varphi} = \left(\frac{\hbar}{i}\right)(-2i)e^{-2i\varphi}$$

$$\hat{l}_z\Psi = (-2\hbar)\Psi$$

$$\therefore l_z = -2\hbar$$

[1]理論的問題8・15　次の関数のどれが演算子 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ の固有関数であるかを調べよ．

(a) e^{ikx} , (b) $\cos kx$, (c) k , (d) kx , (e) $e^{-\alpha x^2}$.

固有関数であるものついては，その固有値を求めよ．

	関数 f(x)	$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x)$	定数×f(x)になっているか?	固有関数か?	固有値
(a)	e^{ikx}	ike^{ikx}	$ik \times f(x)$	yes	ik
(b)	$\cos kx$	$-k\sin kx$	$-k(\tan kx)f(x)$	no	-
(c)	k	0	$0 \times f(x)$	yes	0
(d)	kx	k	$(1/x) \times f(x)$	no	-
(e)	$e^{-\alpha x^2}$	$-2\alpha x e^{-\alpha x^2}$	$-2\alpha x \times f(x)$	no	-

[1]理論的問題8・16　次の関数のどれが反転の演算子 $\hat{i}$ の固有関数であるかを決定せよ．固有関数であればその固有値を示せ．

(a) x^3-kx

$$\hat{i}(x^3-kx) = (-x)^3 - k(x) = -x^3+kx = (-1)(x^3-kx)$$

固有関数である．

固有値－1

(b) $\cos kx$

$$\hat{i}(\cos kx) = \cos(-kx) = (-1)(\cos kx)$$

固有関数である．

固有値－1

(c) x^2+3x-1

$$\hat{i}(x^2+3x-1) = (-x)^2+3(-x)-1 = x^2-3x-1$$

固有関数でない．

[2]自習問題9･4　n＝1の状態にある電子が長さLの共役分子中でx=0.25Lとx=0.75Lの間に見出される確率を計算せよ.

[解答例]　P(0～0.75L)からP(0～0.25L)を引けばよい.

$$P(0-l)=\int_0^l \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)dx=\frac{l}{L}-\frac{1}{2n\pi}\sin\left(\frac{2n\pi l}{L}\right)$$

$$\begin{aligned}P&=P(0-0.75L)-P(0-0.25L)\\&=\frac{(0.75-0.25)L}{L}-\frac{1}{2\pi}\left\{\sin\left(\frac{2\pi\times 0.75L}{L}\right)-\sin\left(\frac{2\pi\times 0.25L}{L}\right)\right\}\\&=0.50-\frac{1}{2\pi}\left\{\sin\left(\pi\times\frac{3}{2}\right)-\sin\left(\pi\times\frac{1}{2}\right)\right\}\\&=0.50-\frac{-1-1}{2\pi}\\&=0.50+\frac{1}{\pi}=0.50+0.32\\&=0.82\end{aligned}$$

[2]自習問題9･8　$^{2}H^{127}I$分子について同じ計算をせよ($^{1}H^{127}I$と結合距離は同じである).

[解答例]

$$E=l(l+1)\frac{\hbar^2}{2I}$$

$$\frac{\hbar^2}{2I_D}=\frac{\hbar^2}{2m_D r^2}=\frac{\hbar^2}{2\times 2m_H r^2}\frac{1}{2}\times\frac{\hbar^2}{2m_H r^2}=\frac{1}{2}\times\frac{\hbar^2}{2I_H}$$

$$E_D=\frac{1}{2}E_H$$

$^{2}H^{127}I$分子の回転のエネルギーは，$^{1}H^{127}I$の半分である.

角運動量の大きさと成分の数は質量に関係ないので，$^{2}H^{127}I$分子でも $^{1}H^{127}I$分子と同じである.

[2]演習問題9･10b　酸素原子の質量(15.9949u)に等しい実効質量と力の定数544Nm^{-1}をもつ調和振動子の隣り合ったエネルギー準位間の遷移を励起するのに必要なフォトンの波長を計算せよ.

[2]演習問題9･15b　$^{14}N_2$分子の振動が，力の定数がk=2293.8Nm^{-1}の調和振動子の振動と等価であるとすると，この分子の振動のゼロ点エネルギーはいくらか. ^{14}N原子の質量は14.0031uである.

[3]文章問題10･2　水素型原子の内部の状態を指定するのに必要な量子数を列挙し，それぞれの意味を説明せよ.

水素型原子の中の電子の状態を指定するためには，4つの量子数，***n*，*l*，m_l，m_s** の値を与えることが必要である.

(1)主量子数　$n=1,2,3\cdots$　　$E_n=-\dfrac{Z^2\mu e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2 n^2}$

　エネルギーの値を決めている.

(2)角運動量量子数(方位量子数)　$l=0,1,2,\cdots,n-1$

　オービタル角運動量の大きさを決めている.　$\sqrt{l(l+1)}\hbar$

(3)磁気量子数　$m_l=-l,-l+1,\cdots,l-1,l$

　角運動量のz成分の値を決めている.　$m_l\hbar$

(4)スピン量子数　$m_s=\pm\dfrac{1}{2}$

　スピン角運動量のz成分の値を決めている.　$\pm\dfrac{1}{2}\hbar$

スピン量子数s:スピン角運動量の大きさを決めている.　$\sqrt{s(s+1)}\hbar$