質問は twitter で
@ Naokipupu
理科I類 20組
ぽぴぽぺ.

構造化学(岡林潤) 過去問解答集(2013～2015)

1. 記述問題対策

(1)「原子内の電子はその軌道がド・ブロイ波の波長の整数倍であるときに限って どのような放射波も放出せず、円軌道を描いて回る」というのが、ボーアの定常状態の仮説であった。このとき、どのような軌道が許されるか。(2013)

答) 電子の角運動量が $\frac{h}{2\pi}(=\hbar)$ の整数倍であり、電子が円軌道上で、定在波を作る条件について言及すれば ok. $mvr = n\hbar$, $mv = \frac{h}{\lambda}$ といった式も書いていいでしょう.

(2) ボーアモデルについて、電子のエネルギー $E = X \cdot \frac{1}{n^2}$ として、X を求めよ. (2014, 2015)

* 2015年は誘導あり、2014年は誘導なし(高校物理なので関係ないとは思いますが)

答) 次の3つの式が立てられればあとは計算のみです.

$$m\frac{v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{e^2}{r^2}, \quad mvr = \frac{nh}{2\pi}, \quad E = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r}$$

($mvr = n\hbar$ としても良いですが、面倒になります)

$$mvr = \frac{nh}{2\pi} \quad \therefore\ v = \frac{nh}{2\pi m r}$$

$$m\frac{1}{r}\cdot\left(\frac{nh}{2\pi m r}\right)^2 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{e^2}{r^2} \quad \therefore\ r = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2}\cdot n^2$$

$$\therefore\ E = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{\pi m e^2}{\varepsilon_0 h^2}\cdot\frac{1}{n^2} = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}\cdot\frac{1}{n^2} \quad \therefore\ X = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}$$ (マイナスを忘れないように)

(3) プランク定数を求める方法を述べよ. (2013)

答) 光電効果の実験を行えば良いです. 横軸に光の振動数、縦軸に金属表面から飛び出す電子の運動エネルギーをプロットすると、直線が得られ、この傾きがプランク定数となります.

(4) 時間に依存しない波動方程式から Schrödinger eq. を導け (2014, 2015)

答) $\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{\omega^2}{v^2}\psi(x) = 0 \quad \cdots ①$

$v = \lambda\cdot\nu$, $\omega = 2\pi\nu$ より $\frac{\omega^2}{v^2} = \frac{4\pi^2}{\lambda^2}$

$\lambda = \frac{h}{p}$ より $\frac{4\pi^2}{\lambda^2} = \frac{4\pi^2}{h^2}p^2 = \frac{1}{\hbar^2}\cdot 2m(E - V(x))$

①に代入して $\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) = 0$

$\therefore\ -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$ (Schrödinger. eq.)

(5) 水素原子について、動径分布関数、位置の期待値の違いを求めよ (2013, 2014, 2015)

答) 数式による違いは最低条件で、それだけ書いても満点は来ないでしょう.

まず、動径分布関数は、$P(r) = |R_{nl}(r)|^2\cdot r^2$, 位置の期待値は $\langle r\rangle = \int\psi^* r\psi\, d\tau$ で表されます

両者の違いとして、次の2つを書いておくと良いです.

1. $P(r)$ は $r\sim r+dr$ の区間に電子が存在する確率で、r についての関数だが、$\langle r\rangle$ は定数
2. $P(r)$ の最大値を与える r が $\langle r\rangle$ に等しくなるわけではない

(6) 水素原子について、s, p, d 軌道の概形と関数系を示せ (2014, 2015)

* 規格化定数は不要です(岡林情報)

答) 教科書にキレイな図があるのでそっち見て下さい.

(7) 有効核電荷とは何か説明せよ. (2013, 2014, 2015)

答) 1. ある1つの電子に着目すると、周囲の電子は正電荷を部分的に遮へいしていると見なせる

2. 1.に基づいて算出した正味の電荷を有効核電荷という　でokです (スレーターの規則を書いてもよいかと)

(8) 電気陰性度とは何か。説明せよ。(2013)

答) 1. 原子の電子の引きつけやすさを表す度合いで、フッ素が最も電気陰性度が高く、周期表の左下ほど小さくなっていく。

2. 異核二原子分子では、原子間の電気陰性度の違いから、共有電子対がどちらか一方の原子に引きつけられて、極性が生じる

* 双極子モーメントについて書いても良いですが蛇足な気もします

(9) 二原子分子の結合長を求める方法を述べよ (2013, 2014, 2015)

答) 二原子分子の回転のスペクトルを測定すると、そのピーク幅が回転定数 $B\left(=\frac{h}{8\pi^2 I}\right)$ の2倍で与えられる。π, h の値は分かっているので、ここから慣性モーメント I が分かる。$I=\mu r^2$ の関係から r が分かり、二原子分子の結合長が分かる。

(10) N_2, O_2 について、・エネルギー図、・電子配置、・結合次数、・磁性の有無 を述べよ。

答) エネルギー図については教科書がキレイなのでそちらを参照。N_2 の軌道の逆転を忘れないように。

N_2) $(1\sigma_g)^2(1\sigma_u)^2(2\sigma_g)^2(2\sigma_u)^2(1\pi_u)^4(3\sigma_g)^2$, 結合次数 3, 磁性無し

O_2) $(1\sigma_g)^2(1\sigma_u)^2(2\sigma_g)^2(2\sigma_u)^2(3\sigma_g)^2(1\pi_u)^4(1\pi_g)^2$, 結合次数 2, 磁性有り

(11) イオン化エネルギーは周期的に変化するが、BeとB / NとO / MgとAl / PとS では大小の逆転が生じる。この理由を求めよ。(2013)

答) Be, N, Mg, P の電子配置を見れば分かります。

Be: $(1s)^2(2s)^2$, N: $(1s)^2(2s)^2(2p_x)^1(2p_y)^1(2p_z)^1$, Mg: $(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2$,

P: $(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p_x)^1(3p_y)^1(3p_z)^1$ であり、どれも安定な構造です(閉殻)

なので、B, O, Al, S から電子1個を取り去ると安定な電子配置になる。よって、イオン化エネルギーの大小にこのような逆転が生じる

(12) HF, F_2 のイオン化エネルギーに差が生じる理由を求めよ (2014)

答) HFは極性が有り、F_2 は極性が無い。よって、HFの共有電子対はフッ素の側に引き寄せられている。よって、HFから電子を取り去る方が多くのエネルギーを要するので、このような差が生じる。

(13) C_2 は存在するかどうか考察せよ (2015)

答) C_2 の電子配置は C_2: $(1\sigma_g)^2(1\sigma_u)^2(2\sigma_g)^2(2\sigma_u)^2(1\pi_u)^4$ となり、結合次数は2なので、C_2 は存在する (*結合次数は2で、磁性無し)

2. 井戸型ポテンシャル (問題文省略。2013~2015 で同じ問題が出題)

(1) Schrödinger eq. は $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)=E\psi(x)$

(2) 境界条件、規格化条件を適用しましょう ($\psi(0)=\psi(a)=0$, $\int_0^a\psi^*\psi\,dx=1$ です)

$\psi(x)=A\exp(ikx)+B\exp(-ikx)$ という形で与えられていますが、

結局は $\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x$ の形にもっていきたいので、逆算しても良いですね。

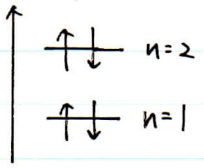
$\psi(0)=0 \Leftrightarrow A+B=0$, $\psi(a)=0 \Leftrightarrow k=\frac{n\pi}{a}$, $\int_0^a\psi^*\psi\,dx=1 \Leftrightarrow A=\sqrt{\frac{1}{2a}}$ となります。

(次のページへ続く)

(3) エネルギー固有値は覚えてしまうといいです。 $\frac{n^2h^2}{8ma^2}$

(Schrödinger eq. からの導出： $\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x$ より、$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2\cdot\left(-\psi(x)\right)=E\psi(x)$)

(4) ブタジエンのπ電子は4個なので、



(5) ブタジエンが吸収する電磁波の波長の最大値は $\frac{ch}{\lambda}=\frac{5h^2}{8ma^2}$ ∴ $\lambda=\frac{8mca^2}{5h}$

(6) これはエチレンと比べて長い。共役ポリエンの共役鎖が長くなる程井戸型ポテンシャルの幅 a が長くなるため

3. 水素原子（変分法編） (2013)

$\epsilon(a)=\frac{\int\psi^*\hat{H}\psi\,d\tau}{\int\psi^*\psi\,d\tau}$ を最小化， $\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ $\left(\nabla^2=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\Lambda,\quad \Lambda=\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)$

ポイント → 積分公式の活用 ($\int x^n\exp(-ax)\,dx=\frac{n!}{a^{n+1}}$)

(1)
$$\int\psi^*\psi\,d\tau=\int\exp(-2ar)\,r^2\sin\theta\,dr\,d\theta\,d\phi$$
$$=\int_0^{2\pi}d\phi\int_0^{\pi}\sin\theta\,d\theta\int_0^{\infty}r^2\exp(-2ar)\,dr$$
$$=4\pi\int_0^{\infty}r^2\exp(-2ar)\,dr=4\pi\cdot\frac{2!}{(2a)^3}=\frac{\pi}{a^3}$$

(計算のコツ) $\int_0^{2\pi}d\phi\int_0^{\pi}\sin\theta\,d\theta=4\pi$

(2)
$$\int\psi^*\hat{H}\psi\,d\tau=\int\exp(-ar)\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)\exp(-ar)\;r^2\sin\theta\,dr\,d\theta\,d\phi$$
$$=4\pi\int_0^{\infty}\exp(-ar)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}r\right)\exp(-ar)\,dr$$
$$=4\pi\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^{\infty}\exp(-ar)\frac{d}{dr}\left(-ar^2\exp(-ar)\right)-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\int_0^{\infty}r\exp(-2ar)\,dr\right)$$
$$=4\pi\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^{\infty}\exp(-ar)\left(-2ar\exp(-ar)+a^2r^2\exp(-ar)\right)-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\int_0^{\infty}r\exp(-2ar)\,dr\right)$$
$$=4\pi\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-2a\cdot\frac{1!}{(2a)^2}+a^2\cdot\frac{2!}{(2a)^3}\right)-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\cdot\frac{1!}{(2a)^2}\right)$$
$$=4\pi\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{1}{2a}+\frac{1}{4a}\right)-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\cdot\frac{1}{4a^2}\right)$$
$$=4\pi\left(\frac{\hbar^2}{8ma}-\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 a^2}\right)=\frac{\pi\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{a}-\frac{e^2}{4\epsilon_0}\cdot\frac{1}{a^2}$$

(3) $\epsilon(a)=\frac{\hbar^2}{2m}a^2-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}a$ ∴ $\epsilon'(a)=\frac{\hbar^2}{m}a-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ ∴ minimize $\epsilon(a)\to a=\frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}$

∴ $a=\frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}$ ($\hbar=\frac{h}{2\pi}$ として $a=\frac{\pi me^2}{\epsilon_0 h^2}$)

4. 水素原子（Schrödinger eq. 編） (2014, 2015)

2015は極座標についての数学的な問題もありました。

(1) 極座標を設定し $d\tau=r^2\sin\theta\,dr\,d\theta\,d\phi$ を示せ

$$\begin{cases}x=r\sin\theta\cos\phi\\ y=r\sin\theta\sin\phi\\ z=r\cos\theta\end{cases}\qquad\left(\begin{array}{l}r\geq0\\ 0\leq\theta\leq\pi\\ 0\leq\phi\leq2\pi\end{array}\right)$$

$d\tau=r^2\sin\theta\,dr\,d\theta\,d\phi$ については (1) 図示する or (2) ヤコビアンの計算

… (1)の方が圧倒的にラクです。

(次ページに続く)

(2) $\langle r \rangle$, $\langle K \rangle$, $\langle V \rangle$ を求めよ, ビリアル比を求めよ.

$\langle r \rangle = \int \psi^* r \psi \, d\tau$, $\langle K \rangle = \int \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right) \psi \, d\tau$, $\langle V \rangle = \int \psi^* \left(-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right) \psi \, d\tau$ です

裏技としては $E = K + V \Leftrightarrow \langle E \rangle = \langle K \rangle + \langle V \rangle \Leftrightarrow \langle K \rangle = E - \langle V \rangle$ から $\langle K \rangle$ を求められます

$$\langle r \rangle = \int \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \exp(-r/a_0) \right) r \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \exp(-r/a_0) \right) d\tau$$
$$= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \int_0^{\infty} \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{a_0}\right)^3 r^3 \exp(-2r/a_0) \, dr$$
$$= 4\pi \cdot \frac{1}{\pi} \cdot \left(\frac{1}{a_0}\right)^3 \cdot \int_0^{\infty} r^3 \exp(-2r/a_0) \, dr = \frac{4}{a_0^3} \left(\frac{a_0}{2}\right)^4 \cdot 3! = \frac{3}{2} a_0$$

$$\langle V \rangle = \int \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \exp(-r/a_0) \right) \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \exp(-r/a_0) \right) d\tau$$ ＊マイナスを忘れないようにしましょう

$$= \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{a_0}\right)^3 \cdot \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \int_0^{\infty} -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} r \exp(-2r/a_0) \, dr$$
$$= 4 \cdot \left(\frac{1}{a_0}\right)^3 \cdot \left(-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right) \cdot \left(\frac{a_0}{2}\right)^2 \cdot 1!$$
$$= -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_0} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{\pi m e^2}{h^2 \varepsilon_0} = -\frac{m e^4}{4\varepsilon_0^2 h^2}$$

ボーアモデルで考えると $E = -\frac{m e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}$ $\therefore \langle K \rangle = \frac{m e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}$ $\therefore$ ビリアル比は $-2 \cdot (-1) = 2$

(3) 動径方向の Schrödinger 方程式を求めよ.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + U(r) \right) \psi_{1s}(r) = E \psi_{1s}(r)$$

(4) Schrödinger 方程式に $\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \exp(-r/a_0)$ を代入し, エネルギー固有値を求めよ

＊ とにかく計算が面倒なので, 答えが分かっている前提で解いていきましょう. 答えは $-\frac{m e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}$ になります

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \right) \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \exp(-r/a_0)$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \left(-\frac{1}{a_0}\right) \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \exp(-r/a_0) \right) - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \exp(-r/a_0)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \left(-\frac{1}{a_0}\right) \left(2r\exp(-r/a_0) - \left(\frac{1}{a_0}\right) r^2 \exp(-r/a_0) \right) - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \exp(-r/a_0) \right)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(-\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} \exp(-r/a_0) + \left(\frac{2\hbar^2}{2ma_0} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \right) \cdot \frac{1}{r} \exp(-r/a_0) \right)$$

$a_0 = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2}$ 代入して, $\frac{\hbar^2}{m a_0} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}$ なので, $\frac{1}{r}\exp(-r/a_0)$ の係数は 0

$$\therefore E = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} = -\frac{m e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}$$ となる.

5. N_2, O_2, O_2^+ の比較 (2013, 2015)

N_2, O_2, O_2^+ の結合次数, 解離エネルギー, 結合距離, 磁気モーメントの大小を比較する問題です

まず, 各々の電子配置は,

N_2: $(1\sigma_g)^2 (1\sigma_u)^2 (2\sigma_g)^2 (2\sigma_u)^2 (1\pi_u)^4 (3\sigma_g)^2$

O_2: $(1\sigma_g)^2 (1\sigma_u)^2 (2\sigma_g)^2 (2\sigma_u)^2 (3\sigma_g)^2 (1\pi_u)^4 (1\pi_g)^2$

O_2^+: $(1\sigma_g)^2 (1\sigma_u)^2 (2\sigma_g)^2 (2\sigma_u)^2 (3\sigma_g)^2 (1\pi_u)^4 (1\pi_g)^1$

になるので,

(1) 結合次数は, N_2) 3, O_2) 2, O_2^+) $5/2$ なので, $N_2 > O_2^+ > O_2$

(2) 結合次数が大きくなる程解離エネルギーは大きくなるので, $N_2 > O_2^+ > O_2$

(3) 結合次数が大きくなる程結合距離は小さくなるので, $O_2 > O_2^+ > N_2$

(4) まず, N_2には磁性が無く, O_2, O_2^+ には磁性が有る. 磁気モーメントは結合距離にも関係するため, $O_2 > O_2^+ > N_2$

6. 軌道エネルギー α_A, α_B の異核二原子分子について考える. 共鳴積分 $\beta\ (<0)$, 重なり積分 $S=0$ とする (2013)

(1) $\psi = C_A\phi_A + C_B\phi_B$ として. secular eq. は

$$\begin{vmatrix} \alpha_A - E & \beta \\ \beta & \alpha_B - E \end{vmatrix} = 0$$

(2) (1)の secular eq. を解いて. $(\alpha_A - E)(\alpha_B - E) - \beta^2 = 0$

$$\therefore\ E^2 - (\alpha_A + \alpha_B)E + \alpha_A\alpha_B - \beta^2 = 0$$

$$\therefore\ E = \frac{1}{2}\left(\alpha_A + \alpha_B \pm \sqrt{(\alpha_A+\alpha_B)^2 - 4(\alpha_A\alpha_B - \beta^2)}\right)$$

$$= \frac{1}{2}\left(\alpha_A + \alpha_B \pm \sqrt{(\alpha_A - \alpha_B)^2 + 4\beta^2}\right)$$

$\therefore$ bonding : $\frac{1}{2}\left(\alpha_A + \alpha_B - \sqrt{(\alpha_A-\alpha_B)^2 + 4\beta^2}\right)$, anti-bonding : $\frac{1}{2}\left(\alpha_A + \alpha_B + \sqrt{(\alpha_A-\alpha_B)^2 + 4\beta^2}\right)$

(3) $\Delta = \frac{1}{2}\sqrt{(\alpha_A - \alpha_B)^2 + 4\beta^2}$

$$= \frac{1}{2}(\alpha_A - \alpha_B)\left(1 + \left(\frac{2\beta}{\alpha_A - \alpha_B}\right)^2\right)^{1/2}$$

$$= \frac{1}{2}(\alpha_A - \alpha_B)\left(1 + \frac{1}{2}\left(\frac{2\beta}{\alpha_A - \alpha_B}\right)^2\right)$$

$$= \frac{1}{2}(\alpha_A - \alpha_B) + \frac{\beta^2}{\alpha_A - \alpha_B}$$

* 安定化エネルギーは $\frac{1}{2}\left(\epsilon_{\text{anti-bonding}} - \epsilon_{\text{bonding}}\right)$ です

7. HF のエネルギー図, 電子配置を示し. HF の電荷の偏りとイオン性を求めよ.
HF の結合距離 0.096 nm, 双極子モーメント 1.98 D, 電子の電荷 1.6×10^{-19} C とする (2013)
(1 D = 3.36×10^{-30} C·m)

エネルギー図は教科書参照. 電子配置は

よって 双極子モーメント, 結合距離の値から電荷の偏りは $3.36\times10^{-30}\times1.98 = \delta\times0.096\times10^{-9}$ より.
$\delta \fallingdotseq 7.2\times10^{-20}$

よって イオン性は $\frac{\delta}{1.6\times10^{-19}}\times100 = 45.3\%$

8. CO と NO の比較 (2014. 2015)

(1) いつものごとくエネルギー図は教科書参照です. 電子配置は下のようになります.
CO: $(1\sigma)^2(2\sigma)^2(3\sigma)^2(4\sigma)^2(1\pi_x)^2(1\pi_y)^2(5\sigma)^2$, NO: $(1\sigma)^2(2\sigma)^2(3\sigma)^2(4\sigma)^2(5\sigma)^2(1\pi_x)^2(1\pi_y)^2(2\pi_x)^1$

(2) 双極子モーメントの向きは. 正から負なので.
CO: 酸素 → 炭素, NO: 窒素 → 酸素 となります. 電子配置からも求めることができます.

(3) 次の2つの効果が相殺し合うことを明記しましょう
1. C, O の電気陰性度の違いから. O側に電子対が引きつけられ. $C^{+\delta} \equiv O^{-\delta}$ になろうとする
2. CO の分子軌道は 5σ 軌道が 2p 軌道よりも上にあり. $C^{-\delta} \equiv O^{+\delta}$ になろうとする
結果的に 2. の効果が勝って. C が わずかに負の電荷を帯びることも明記しておくとよいでしょう

(4) NO は反結合性軌道に電子が1つ入っているため. イオン化しやすいことに着目しましょう
(N_2 はイオン化しようとすると 結合性軌道から電子を取り去る必要があります)
なので. N_2 の方がイオン化エネルギーは大きくなります.

9. 分子振動の変分法 (2014)

3.と同じく. $E(a) = \dfrac{\int \psi^* \hat{H} \psi \, d\tau}{\int \psi^* \psi \, d\tau}$ を最小化. $\hat{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2} + \dfrac{1}{2}kx^2$

注意!!

ポイント → ガウス積分の使用 $\left(\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} \exp(-ax^2)\,dx = (2n-1)!! \left(\dfrac{\pi}{a}\right)^{1/2} \left(\dfrac{1}{2a}\right)^n ,\ \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2)\,dx = \left(\dfrac{\pi}{a}\right)^{1/2} \right)$

(1) $\displaystyle \int \psi^* \psi \, d\tau = \int \exp(-2ax^2)\,dx = \sqrt{\frac{\pi}{2a}}$

(2)
$$\begin{aligned}
\int \psi^* \hat{H} \psi \, d\tau &= \int \exp(-ax^2) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2 \right) \exp(-ax^2)\,dx \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \int \exp(-ax^2) \frac{d^2}{dx^2} \exp(-ax^2)\,dx + \frac{k}{2} \int x^2 \exp(-2ax^2)\,dx \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \int \exp(-ax^2) \frac{d}{dx} \left(-2ax \exp(-ax^2) \right) dx + \frac{k}{2} \int x^2 \exp(-2ax^2)\,dx \\
&= \frac{a\hbar^2}{m} \int \exp(-ax^2) \left(\exp(-ax^2) - 2ax^2 \exp(-ax^2) \right) dx + \frac{k}{2} \int x^2 \exp(-2ax^2)\,dx \\
&= \left(\frac{k}{2} - \frac{2a^2\hbar^2}{m} \right) \int x^2 \exp(-ax^2)\,dx + \frac{a\hbar^2}{m} \int \exp(-ax^2)\,dx \\
&= \left(\frac{k}{2} - \frac{2a^2\hbar^2}{m} \right) \sqrt{\frac{\pi}{2a}} \cdot \frac{1}{2 \cdot 2a} + \frac{a\hbar^2}{m} \sqrt{\frac{\pi}{2a}} \\
&= \frac{a\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{\pi}{2a}} + \frac{k}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2a}} \cdot \frac{1}{4a} \\
&= \sqrt{\frac{\pi}{2a}} \left(\frac{\hbar^2}{2m} a + \frac{k}{8a} \right)
\end{aligned}$$

(3) $E(a) = \dfrac{\hbar^2}{2m} a + \dfrac{k}{8a}$ より. minimize $E(a)$ → $\dfrac{\hbar^2}{2m} a = \dfrac{k}{8a} \Leftrightarrow a^2 = \dfrac{mk}{4\hbar^2}$ ∴ $a = \dfrac{\sqrt{mk}}{2\hbar}$

岡林潤の構造化学はここから出ていると思われます

このシケプリ読めば優は狙えるはず!! 健闘をお祈りします!!

質問はtwitterで → @Naokipmpm "ぽむぽむ"

以上