

2018年度 構造化学 試験問題 中田真秀

注意: ノート、教科書など持ち込み不可。

1. (用語) 10点

1-1. 状態が縮退している、ということを数式と実例を使って説明せよ。

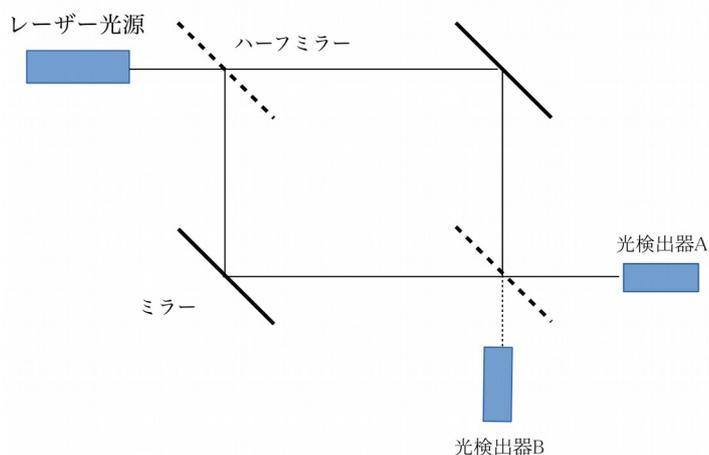
1-2. シュレーディンガー方程式 $\hat{H}\Psi = E\Psi$ について、各項の名称書け。

1-3. $n \times n$ のエルミート行列の定義を書き、固有値がすべて実数であることを示せ。

2. (光の波動性と粒子性) 30点

爆弾がたくさんある。その中には不発弾もあることがわかっている。ただし、爆弾は一光子吸収すると爆発し、不発弾は光子を吸収、反射できない。爆弾はいくつか爆発させても良いから、使える発弾だけを取り出したい。利用可能な爆弾を取り出す思考実験を提案し、説明せよ。(A. C. Elitzur & L. Vaidman: Found. Phys. 23, 987 (1993)).

ヒント: 下図のマッハ-ツェンダー干渉計を用いよ。レーザー光源は一光子ずつ出せ、光検出器Aのみに光が到達するように位相差(=光経路)を調整している。ハーフミラーは50%反射50%透過する鏡である。100%反射する鏡とともにそれぞれ2つずつ、合計4つ置いてある。



3. (水素原子と分子) 30点

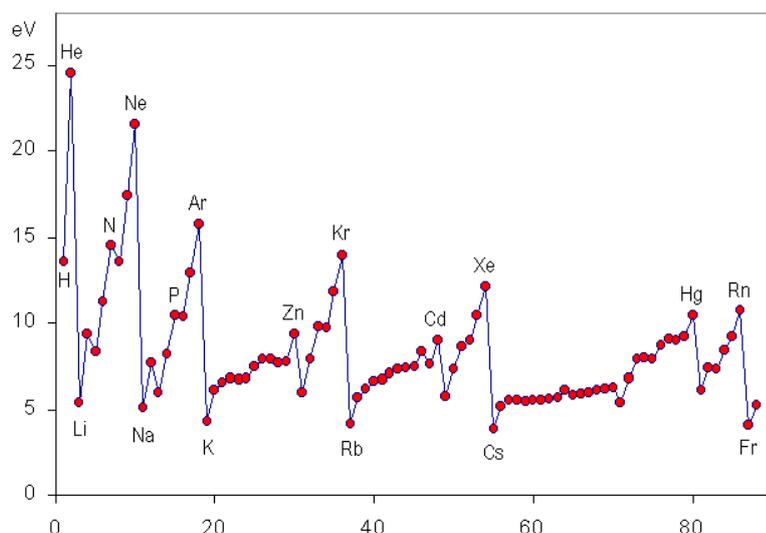
3-1. s, p, d 軌道の概略を書き、特徴を定性的に説明せよ。

3-2. 水素原子のハミルトニアンを SI 単位系、および原子単位系を使って表わし、各項について説明せよ。

3-3. SI 単位系を原子単位系に変換する方法を導出せよ [ヒント: 座標を定数倍せよ。
 $(x, y, z) \rightarrow (\lambda x', \lambda y', \lambda z')$ 、ハミルトニアンは定数倍してもシュレーディンガー方程式は不変]

4. (多電子原子、分子) 30 点

4-1. 下の図(Wikimedia/Tsemii より) は原子のイオン化ポテンシャルエネルギーをプロットしたものである。(縦軸はエネルギー、横軸は原子番号)。周期性があることがわかるが、よく見ると Be と B, N と O, Mg と Al, P と S では逆転している。なぜか説明せよ。



4-2. 量子化学では平均場近似を用いることが多い。これを用いる利点を説明せよ。ただし、次の用語集から必要に応じていくつか用語を使うこと [用語集: N 電子系、1電子系、波動関数、分子軌道、シュレーディンガー方程式、エネルギー準位、分子軌道、平均場、パウリの排他原理、 α スピン、 β スピン、Hartree-Fock 法、ディラック方程式、LCAO 近似]

4-3. σ 軌道 σ^* 軌道 π 軌道 π^* 軌道について説明せよ。これらはどう異なるか。どう生成されるか、化学結合に於いてどんな意味を持つか。実例も交えつつ、定性的に説明せよ。

5. 短い間でしたがお付き合いありがとうございました。コメント、感想など(加対象外)