

クイズその1 (締切は次回の講義の開始前)

シュライバー無機化学上巻第1章 練習問題 1.2

1.2 Born の解釈によると、体積要素 dr 中に電子を見出す確率は $\psi^* \psi dr$ に比例する。

- 基底状態にある水素原子中で電子を見出す確率が最も高いのはどこか。
- 確率が最高になる距離 (核からの) を求めよ。(a) の答えと違うのはなぜか。
- 2s 電子の確率が最高になる距離 (核からの) を求めよ。

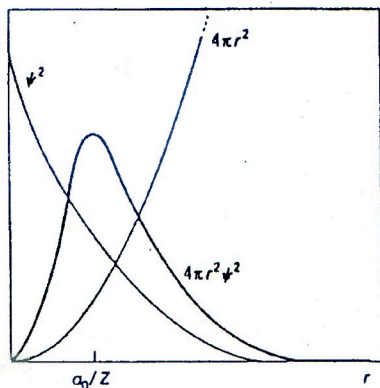


図 1.11 水素型原子の 1s 軌道の動径分布関数。 $4\pi r^2$ (r とともに増加) と ψ^2 (指数関数的に減少) との積は $r = a_0/Z$ で極大を示す。

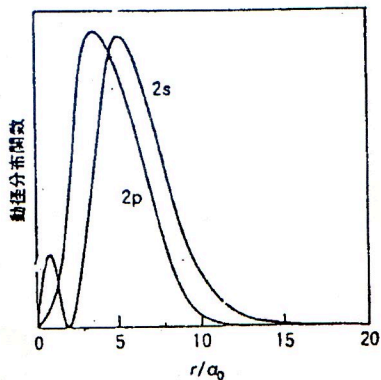


図 1.12 水素型 2s および 2p 軌道の動径分布関数。 2p の方が平均としては核に近い (極大の位置に注目せよ) が、2s 軌道の電-には内側の極大があるので、核の近くの確率は 2s の方が高い。

表 水素型軌道

(a) 動径波動関数			(b) 角波動関数		
$R_{n,l}(r) = f(r) \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\rho/2}$ <p>ここで a_0 は Bohr 半径 (53 pm), $\rho = 2Zr/na_0$. $f(r)$ は下記の通り.</p>			$Y_{l,m}(\theta, \phi) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2} y(\theta, \phi)$ <p>$y(\theta, \phi)$ は下記の通り.</p>		
n	l	$f(r)$	l	m_l	$y(\theta, \phi)$
1	0	2	0	0	1
2	0	$(1/2\sqrt{2})(2-\rho)$	1	0	$3^{1/2} \cos\theta$
2	1	$(1/2\sqrt{6})\rho$	1	± 1	$(3/2)^{1/2} \sin\theta e^{\pm i\phi}$
3	0	$(1/9\sqrt{3})(6-6\rho+\rho^2)$	2	0	$(5/4)^{1/2}(3\cos^2\theta-1)$
3	1	$(1/9\sqrt{6})(4-\rho)\rho$	2	± 1	$(15/2)^{1/2}(\cos\theta)(\sin\theta)e^{\pm i\phi}$
3	2	$(1/9\sqrt{30})\rho^2$	2	± 2	$(15/8)^{1/2}(\sin^2\theta)e^{\pm 2i\phi}$