応用化学演習Ⅰ　小テスト No1-7（H29.11.9）解答例

学籍番号＿＿＿＿＿＿＿氏名＿＿＿＿＿＿＿＿＿＿＿＿＿＿＿

定数：N_A=6.022045x10^{23}mol^{-1}，h=6.626176x10^{-34}Js，c=2.99792458x10^8ms^{-1}，e=1.6021892x10^{-19}C，π=3.14159265 ε_0=8.854x10^{-12}C^{2}m^{-1}J^{-1}，m_e=9.1091x10^{-31}kg，1eV=96.485kJmol^{-1}，R=109678cm^{-1}，J=Nm，N=kgms^{-2}

[1]家庭用の電子レンジは 2.45GHz のマイクロ波を用いている．このマイクロ波の下記の物理量を計算せよ．(各 5 点，20 点)

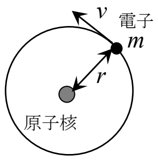
(1)mm 単位での波長：$\nu=c/\lambda$ より，$\lambda=c/\nu$
=(2.99792458x10^8ms^{-1})/(2.45x10^9s^{-1})=1.224x10^{-1}m
=122mm

(2)cm^{-1} 単位での波数
$\lambda=1/\bar{\nu}$ より，$\bar{\nu}=1/\lambda$
=1/(1.224x10^{-1}m x10^{-2}cm m^{-1})=8.17x10^{-2}cm^{-1}

(3)kJmol^{-1} 単位でのエネルギー：$E=N_A h\nu$ より
E=(6.022045x10^{23}mol^{-1})x(h=6.626176x10^{-34}Js) x (2.45x10^9s^{-1})=0.9776Jmol^{-1}=9.78x10^{-4}kJmol^{-1}

(4)eV 単位でのエネルギー
1kJmol^{-1}=(1/96.485)eV より，
E=(1/96.485)eV(kJmol^{-1})$^{-1}$x9.78x10^{-4}kJmol^{-1}=1.01 x10^{-5}eV

[2]次の図を参考にして水素原子における Bohr 半径(Å)を求めよ．ヒント，遠心力は mv^2/r，クーロン力は $e^2/4\pi\varepsilon_0 r^2$．(10 点)



遠心力とクーロン力との釣合いより，
$mv^2/r = e^2/4\pi\varepsilon_0 r^2$　①
Bohr の量子仮説より，$mvr=nh/2\pi$　②
②式より $v=nh/(2\pi mr)$となり，これを①式に代入して v を消去．さらに両辺に r^2 を掛けると，
$r=\varepsilon_0 n^2h^2/(\pi me^2)$
n=1 のとき Bohr 半径(a_0)という。各定数を代入して
a_0=(8.854x10^{-12}C^{2}m^{-1}J^{-1})x1^{2}x(6.626176x10^{-34}Js)^2/(3.14159265x9.1091x10^{-31}kgx(1.6021892x10^{-19}C)^2)
=5.2919x10^{-11}J/(kgms^{-2})=0.529x10^{-10}m=0.529Å

[3]清浄な W 表面に 200nm の紫外線を照射したところ，最大エネルギーが 2.69x10^{-19}J の電子が放出された．W の仕事関数を eV 単位で求めよ．(10 点)
$h\nu=E_e(=1/2m_ev^2)+P$ より，$P=hc/\lambda - E_e$
=6.626176x10^{-34}Js･2.99792458x10^8ms^{-1}/(200x10^{-9}m) – 2.69x10^{-19}J=7.24 x10^{-19}J
eV への換算
P=7.24x10^{-19}Jx6.022045x10^{23}mol^{-1}/96.485x10^3eVJmol^{-1}=4.52eV

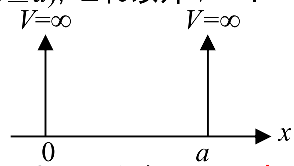
[4]^{235}U と ^{238}U の半減期はそれぞれ 7.04 億年と 44.7 億年である．また現在の ^{235}U 存在率は0.72%である．^{235}U 存在率が 3.67%であったのは今から何億年前か．ただし，地球の年齢を 45 億年(t=0)とする．(10 点)
$N_{235}=N_{0,235}\exp[-(\ln 2)t/\tau_{235}]$と $N_{238}=N_{0,238}\exp[-(\ln 2)t/\tau_{238}]$
よりt=-ln[(N_{235}/N_{238})/($N_{0,235}/N_{0,238}$)]/[(ln2)(τ_{235}^{-1}-τ_{238}^{-1})]
現在は t=45 億年であるから，
$N_{0,235}/N_{0,238}$=0.303.
t=-ln[3.67/96.33/0.303]/[(ln2)(τ_{235}^{-1}-τ_{238}^{-1})]=24.99=25 億年，約 20 億年前

[5]次の原子またはイオンの基底状態の電子配置をかけ．(各 2 点，12 点)

(1)Se	[Ar]4s^{2}3d^{10}4p^4
(2)Cu	[Ar]4s^{1}3d^{10}
(3)Mn^{2+}	[Ar]3d^5
(4)Y	[Kr]5s^{2}4d^1
(5)Br$^-$	[Ar]4s^{2}3d^{10}4p^6
(6)Cr^{4+}	[Ar]3d^2

[6]Zn と Ga のイオン化エネルギーを比べると原子番号の大きい Ga の方が小さい．このことを有効核電荷と軌道の貫入に基づいて説明せよ．(10 点)
それぞれの最外殻電子の有効核電荷を求める．
Zn:1s^{2}2s^{2}2p^{6}3s^{2}3p^{6}3d^{10}4s^2
Z*(Zn)= 30-(0.35x1+0.85x18+1.00×10)=4.35
Ga:1s^{2}2s^{2}2p^{6}3s^{2}3p^{6}3d^{10}4s^{2}4p^1
Z*(Ga)=31-(0.35x2+0.85x18+1.00×10)=5.00
Z*だけを考慮すると Zn のイオン化エネルギーが小さいことになり，説明できない．4s と 4p 軌道の形を考慮すると，4s 軌道は原子核により近くまで貫入し，遮蔽の効果を受けにくく，イオン化し難いのである．

[7]下図のような一次元の箱の中に電子が入っている．電子の質量を m，波動関数を $\psi(x)$，電子のもつエネルギーを E とし，V=0(0≦x≦a)，これ以外 V=∞.



(1)x=0 と∞における(8 点)
$\psi(x)$の値，境界条件を示せ．
$\psi(0)=0$
$\psi(a)=0$

(2)この箱の電子の Schrödinger 方程式を書け．(10 点)
ヒント：
$$\left\{-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(\mathbf{r})\right\}\psi(\mathbf{r})=E\psi(\mathbf{r})$$
上式より V=0 とし，整理す直すと，
$$\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}=-\frac{8\pi^2 m}{h^2}E\psi(x)$$

(3) Schrödinger 方程式を解け．ヒント：$\frac{\partial^2 y(x)}{\partial x^2}=-Cy(x)$ の一般解は，$y(x)=A\sin kx+B\cos kx$ 型になる．(10 点)
一般解を 2 回 x で微分して(2)問の式に代入すると
$$k^2=\frac{8\pi^2 mE}{h^2}\quad①$$
境界条件 $\psi(0)$=0 より，B=0,
境界条件 $\psi(a)$=0 より，$ka=n\pi$, $k=n\pi/a$（n=1,2,3…）②
よって，波動関数は $\psi_n(x)=A\sin n\pi\frac{x}{a}$
A は規格化条件より，
$$1=\int_0^a\psi(x)^2dx=A^2\int_0^a\sin^2 n\pi\frac{x}{a}dx=A^2\int_0^a(1-\cos 2n\pi\frac{x}{a})dx$$
$$A=\pm\sqrt{2/a}$$
$$\psi_n(x)=\pm\sqrt{2/a}\sin n\pi\frac{x}{a}$$
①と②より
$$E_n=\frac{n^2h^2}{8ma^2}$$