

化学A宿題6 解答用紙

提出日 平成2018年 月 日 授業名 化学A

学年: 学科: クラス: 学籍番号 氏名

問題1. 各軌道の動径分布関数が極大値をとる半径  $r$  の値を求めよ。① 1s 軌道、② 2s 軌道、③ 2p 軌道

【解答欄】

問1-1

$$P(r)dr = \left\{ 2 \left( \frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \right\}^2 r^2 dr = \frac{4}{a_0} \left( \frac{r}{a_0} \right)^2 \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) dr$$

$$\frac{dP(r)}{dr} = -\frac{4}{a_0^3} 2r \left( 1 - \frac{r}{a_0} \right)^2 \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) = 0$$

よって  $r = a_0$  が得られる。 ◆

問1-2

$$P(r)dr = |R_{2,0}(r)|^2 r^2 dr$$

$$= \left\{ \sqrt{\frac{1}{8}} \left( \frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \left( 2 - \frac{r}{a_0} \right) \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) \right\}^2 r^2 dr$$

$$= \frac{1}{8a_0} \left( 2 - \frac{r}{a_0} \right)^2 \left( \frac{r}{a_0} \right)^2 \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$$

$$\frac{dP(r)}{dr} = \frac{r}{8a_0^3} (r - 2a_0) (-r^2 + 6a_0r - 4a_0^2) \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) = 0$$

これより

$$r = 0, (3 \pm \sqrt{5}) a_0, 2a_0$$

で  $dP(r)/dr = 0$  となる。このうち極大値をとるのは

$$r = (3 \pm \sqrt{5}) a_0 \approx 0.76a_0, 5.24a_0$$

問1-3

$$P(r)dr = |R_{2,1}(r)|^2 r^2 dr$$

$$= \frac{1}{24} \left( \frac{1}{a_0} \right)^3 \frac{r^4}{a_0^2} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) dr$$

同様にして  $r = 4a_0$