

## 予習問題

当日までに、各自で解いておいて下さい。講義当日は4名に黒板で解いてもらいます。  
(人選しておいてもらっても構いません。)

第1問 1名

第2問 (1)(3)1名、(2)(4)1名、(5)(6)1名

第1問

**12.6** We normally think of the one-dimensional well as being horizontal. Suppose it is vertical; then the potential energy of the particle depends on  $x$  because of the presence of the gravitational field. Calculate the first-order correction to the zero-point energy, and evaluate it for an electron in a box on the surface of the Earth. Account for the result. *Hint.* The energy of the particle depends on its height as  $mgh$ , where  $g = 9.81 \text{ m s}^{-2}$ . Because  $g$  is so small, the energy correction is small; but it would be significant if the box were near a very massive star.

第2問

[4] 1次元調和振動子に関連する以下の問に答えよ。

- (1)  $\psi_1(x) = A e^{-ax^2}$  を規格化せよ ( $a$  は定数で  $a > 0$ )。
- (2)  $\psi_2(x) = B x e^{-bx^2}$  を規格化せよ ( $b$  は定数で  $b > 0$ )。
- (3) 変分法を用いて  $\psi_1$  を最適化し、そのエネルギー固有値  $E_1$  を求めよ。
- (4) 変分法を用いて  $\psi_2$  を最適化し、そのエネルギー固有値  $E_2$  を求めよ。
- (5) (3)と(4)で得たエネルギー固有値の差  $E_2 - E_1$  は零点振動エネルギーの何倍か。
- (6) (3)と(4)で最適化した  $\psi_1$  と  $\psi_2$  は互いに直交することを示せ。

## 出典

第1問は、Atkins, Physical Chemistry 8th editionからの抜粋です。

第2問は、大野公一、「量子化学演習」岩波書店からの抜粋です。

ただし、教科書末尾の解答はけっこう間違っていてあてになりません。

## レポート課題

(講義のあとで提出して下さい。)

(A-1)[周回軌道上の波動関数] 半径Rの円周上を周回する電子の波動関数は、

$$\phi_m(\psi) = A \exp^{im\psi}$$

で表される。規格化定数Aを求め、 $m=1..4$ に対応する電子エネルギー準位を求めよ。

(類題: 平成8年度問題8、平成14年度問題6)

(A-2)シクロブタジエンの $\pi$ 軌道にこのモデルをあてはめる。 $\pi$ 電子は4つのCを通る円軌道上を周回するものとする。この時、基底状態からの最低電子励起エネルギーに対応する光吸収の波長を求めなさい。ただし、シクロブタジエンのC-C間距離は150 pmとする。

(類題: 平成14年度問題6、平成9年度問題8、平成18年度問題6)

(A-3)[分子軌道] Hückel近似を用いて、同じシクロブタジエン分子の永年方程式とその解を求め、 $\pi$ 軌道の軌道エネルギーを第4番目の軌道まで計算しなさい。ただし、クーロン積分 $\alpha$ 、共鳴積分 $\beta$ 、4つのC原子のp軌道の波動関数 $\chi_1 \sim \chi_4$ を用い、導出過程を示しなさい。エネルギー準位図を描き、基底状態での電子配置を推定しなさい。

(類題: 平成16年度基礎物理化学ほか多数)