

## 5.25 学修相談実施報告

来室学生

三回生 男子 一名

### 質問内容

#### I. 物理化学(量子化学)に関するもの

演習問題で課された問題7について、いずれもよく理解できないので教えて欲しい。

### 回答内容

波動方程式と固有関数、固有値に関するもので、何処まで学生が学習しているかわからないので、問題を一つ一つ解きながら、理解できていないところを掘り下げて行くことにした。

1. 水素様原子とは何か尋ねたが、知らなかったなので、まず水素様原子の定義からはじめた。
2. テキストとしてはサイモン・マッカーリーを使用しているとのことなので、テキストに書かれている水素様原子の波動関数から、問題にある3s-軌道の関数を示し、関数の値が何処でゼロになるか尋ねた。その上で実際に計算をさせた。

この計算をする上で大切なことは

波動関数を $\psi$ で表すと、 $\psi$ 、 $\psi^2$ 、 $\psi^2 d\tau(\psi^2 4\pi r^2 dr)$ の3つの関数を持つ意味をはっきり区別して理解することが大切であると説明。

3. 波動関数と節面(ゼロの値をとるところ)と固有エネルギーの一般的な関係については知っていた。
4. 1s-軌道の波動関数の規格化定数を求める問題は、実際に計算をしてもらったが、 $\int_0^{\infty} x^n e^{-ax} dx$ の積分ができないので、巻末の公式を見て計算するように言った。正しく計算ができ学生は喜んでいて、公式を利用するのはもちろんよいが、自分でも部分積分を用いて計算できるようにいった。
5. 調和振動子の波動関数に関するもので、力の定数 $k$ の求め方の説明をした。具体的な数値で $k$ の値を求めるには、(赤外)吸収または発光波長の値が必要であると説明。
6. 同じく調和振動子の問題で、 $^{35}\text{Cl}-^{35}\text{Cl}$ の結合距離と平衡位置( $x=0$ )からのずれの2乗の平均値 $\overline{x^2}$ の平方根 $\sqrt{\overline{x^2}}$ を与える式が与えられていて、 $v=0$ におけるそ

の値と結合距離との関係を論じる問題については、調和振動の波動関数からは結合距離は求められないのでその問題には答えられない、わかるのは平衡位置の周りにどれだけ変位しているかだけであると説明した。

後で考えると、問題の意味は振動状態により結合の距離の何分の一程度結合が伸び縮みしているかを訊ねている解釈し、具体的に何分の一程度答えるべきだったと思う。なお、この計算に必要な積分関数も巻末に与えられているので、同様の質問がまたあれば、そのことにも触れておくことにする。

以上