８章

［5］設問

（１）塩化水素 $H^{35}Cl$ のマイクロ波スペクトル間隔は 6.26X10^{11} Hz である。

(a) 最もエネルギー幅の狭い遷移((14)式の $J=0$)のエネルギー幅を計算せよ。

熱運動の運動エネルギーは k_BT のオーダーである。計算した値と k_BT を比較せよ。

$T=300K$ とせよ。ボルツマン定数は $k_B=1.380\times10^{-23}$ J/K である。

$$k_BT=(1.380\times10^{-23})\times300\ \ \mathrm{J}=\ 4.14\times10^{-21}\ \mathrm{J}$$
$$=(4.14\times10^{-21})\times(6.022\times10^{23})\ \ \mathrm{J/mol}=2.493\ \mathrm{kJ/mol}$$

k_BT は数キロジュールパーモルです。

さて問題ですが、スペクトル間隔＝最小のエネルギー幅　なので、

エネルギー幅は 6.26X10^{11} Hz です。単位をジュールに変換する。

$$E=h\nu=(6.626\times10^{-34})\times(6.26\times10^{11})\ \mathrm{J}=4.15\times10^{-22}\ \ \mathrm{J}$$

よってエネルギー間隔は k_BT の 1/10 ほどです。

(b) (a)に対応する遷移によって吸収する電磁波(光)の波長を求めよ。

$$\lambda=\frac{c}{\nu}=\frac{3.00\times10^{8}}{6.26\times10^{11}}=0.479\times10^{-3}\ \ \mathrm{m}=479\ \mu\mathrm{m}$$

(c) $H^{35}Cl$ の結合長を計算せよ。アボガドロ定数を $6.0221\times10^{23}\,/\,\mathrm{mol}$ とする。

$$h\nu=\frac{h^2}{4\pi^2I}\ \ \rightarrow\ I=\frac{h}{4\pi^2\nu}$$

ここで慣性モーメントは、換算質量を μ とすると、次式となる。

$$I=\mu r^2$$

従って、　$r=\sqrt{\dfrac{h}{4\pi^2\nu\mu}}$

ここでアボガドロ定数が必要だろうと思ってアボガドロ定数の値を書いておいたのですが、これまでの演習でプロトンの質量などは無条件で使っていたので、ここでいまさらアボガドロ数から計算する必要もないですね

^{35}Cl の質量がプロトンの 35 倍として(プロトンの質量が1.67×10^{-27}Kg)、

$$\mu=\frac{m_p(35m_p)}{m_p+(35m_p)}=\frac{35}{36}m_p$$

従って、原子間距離は、

$$r=\sqrt{\frac{h}{4\pi^2\nu\mu}}=\sqrt{\frac{6.626\times10^{-34}\times36}{4\times3.14^2\times6.26\times10^{11}\times1.673\times10^{-27}\times35}}$$
$$=\sqrt{0.10329\times10^{-20}}=0.128\times10^{-9}\ \ \mathrm{m}=128\ \mathrm{pm}$$

128 ピコメーター、1.28Å(オングストローム)です。

（２）（a）球面調和関数$Y_{0,0}(\theta,\phi)$、$Y_{1,0}(\theta,\phi)$、$Y_{1,1}(\theta,\phi)$、$Y_{1,-1}(\theta,\phi)$、の関数形を具体的に、規格化された形で書け。

$$Y_{0,0}(\theta,\phi)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}、\quad Y_{1,0}(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta、\quad Y_{1,\pm1}(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\cdot e^{\pm i\phi}$$

（b）$Y_{1,0}(\theta,\phi)$が規格化されていることを実際に積分することによって示せ。

$$\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{\phi=0}^{2\pi}Y_{1,0}(\theta,\phi)^{*}Y_{1,0}(\theta,\phi)\sin\theta d\theta d\phi=A_{1,0}^{2}\int_{\theta=0}^{\pi}P_1^0(\cos\theta)^2\sin\theta d\theta\int_{\phi=0}^{2\pi}d\phi$$

$$=A_{1,0}^{2}\int_{\theta=0}^{\pi}\left[P_1^0(\cos\theta)\right]^2\sin\theta d\theta\int_{\phi=0}^{2\pi}d\phi=2\pi A_{1,0}^{2}\int_{\theta=0}^{\pi}\cos^2\theta\sin\theta d\theta$$

$$=2\pi\frac{3}{4\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}\cos^2\theta\sin\theta d\theta=2\pi\frac{3}{4\pi}\frac{2}{3}=1$$

$\int_{\theta=0}^{\pi}\cos^2\theta\sin\theta d\theta=2/3$は積分公式から採れば十分です。

（積分値を与えておく事を忘れておりました。）

（c）$Y_{0,0}(\theta,\phi)$、$Y_{1,0}(\theta,\phi)$、$Y_{1,1}(\theta,\phi)$、$Y_{1,-1}(\theta,\phi)$の関数値のプラスーマイナスの領域を図示せよ（マイナスの領域に斜線を引いて図示する）。極座標の（θ, ϕ）は球面上の一点を示すので、まず球面を書いて、その球面を分割するような絵を示せばよい。略図でよい。複素関数なので、１個の関数に対して、実部と虚部の球面を２つ用意するとよい。

省略