

[1] 原子軌道における動径分布関数の定義と、その物理的意味について説明しなさい。

1s 軌道 (球対称) の場合を考える。このとき、波動関数 $\psi$ は半径  $r$  のみに依存し、原子軌道における動径分布関数 $P(r)$ は

$$P(r) = 4\pi r^2 \psi^2$$

で与えられる。これは、半径 $r$ から $r + dr$ の球殻内に電子が存在する確率が

$$P(r)dr = 4\pi r^2 \psi^2 dr$$

で表されることを意味する。

[2] ギブズエネルギーと化学ポテンシャルの関係について、説明しなさい。

ギブズエネルギー $G$ は、次式で定義される熱力学関数である。

$$G = H - TS$$

ここで $H$ はエンタルピー、 $T$ は絶対温度、 $S$ はエントロピーである。化学ポテンシャル $\mu_i$ は、成分 $i$ の物質量 $n_i$ を変化させたときのギブズエネルギーの変化として定義される。

$$\mu_i = \left( \frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{T,p}$$

多成分系では、ギブズエネルギーは各成分の化学ポテンシャルの和として表される。

$$G = \sum_i n_i \mu_i$$

[3] 化学反応における衝突理論と遷移状態理論について、説明しなさい。

衝突理論では、化学反応は反応物分子同士の衝突によって起こると考える。すべての衝突が反応を引き起こすわけではなく、反応が起こるためには、分子が十分なエネルギー (活性化エネルギー) をもち、かつ適切な配向で衝突する必要がある。反応速度は、衝突の頻度によって決まる。一方、遷移状態理論では、反応物は反応の途中でエネルギー的に不安定な状態である遷移状態 (活性錯体) を経て生成物に変化すると考える。反応速度は、反応物と遷移状態との間の平衡と、遷移状態が生成物へ変換される速さによって決まる。遷移状態理論では、活性化エネルギーを用いて反応速度を記述する。