

科目 【化学工学Ⅰ】 基礎化学 （1枚）

問題1 [20点]

幅 L の一次元井戸型ポテンシャル ($0 \leq x \leq L$, $V(x)=0$) に閉じ込められた質量 m の粒子を考える. 次の問いに答えよ.

(1.1) この1次元井戸型ポテンシャルを考えて, シュレディンガー方程式をたて, 基底状態のエネルギー固有値 E_1 を求めよ.

(1.2) 変分原理を用いて, この系の波動関数を求めることを検討する. 試行関数 $\psi(x)$ のエネルギーを検討し, エネルギーの最小値を与える波動関数から, 真の波動関数を推定する. 扱いが容易な次の試行関数を検討する. この試行関数 $\phi(x)$ が, 境界条件を満たしていることを示せ.

$$\psi(x) = Ax(L-x) \quad (0 < x < L) \quad A: \text{定数}$$

$$\psi(x) = 0 \quad (x \leq 0, x \geq L)$$

(1.3) $\psi(x)$ を規格化して, 定数 A を求めよ. A は実数の定数とする.

(1.4) 試行関数に対するエネルギー期待値 E_1' を求めよ.

(1.5) E_1' と E_1 を比べて, 差を求め, 試行関数 $\psi(x)$ が波動関数として適切か述べよ.

問題2 [15点]

光学活性な (*R*)-2-ブロモブタンをアセトン溶媒中でシアン化ナトリウムと反応させた. この反応は S_N2 反応機構に従って反応する. 次の問いに答えよ.

(2.1) 生成物の構造式を立体が分かるように示せ.

(2.2) 反応速度式を示せ. 反応速度定数は k とする.

(2.3) 同じ基質で溶媒をエタノール, 試薬をナトリウムエトキシドに変えて加熱条件下で反応を行ったところ, 別の生成物が得られた. 得られた生成物を示せ.

問題3 [15点]

次の反応の生成物を答えよ. 特異的な立体構造を有する場合には構造が分かるように示せ. 生成物が2種類以上あるときは, 全て示せ.

