

構造化学 Quiz 9 回目 略解

1. 2つの電子が1つの軌道にスピンの異なる場合は入れるが、スピンの同じ場合は入れない。

2. 二電子系の波動関数を $\Psi(x_1, x_2)$ とする。粒子を入れ替えると、区別がないということは、 $\Psi(x_1, x_2) = \exp(i\theta)\Psi(x_2, x_1)$ となるはずである(位相程度違う場合は観測しても物理量が変わらないため)。ただ、電子の場合は1/2スピンを持つ粒子のため必ず反対称となり、 $\Psi(x_1, x_2) = -\Psi(x_2, x_1)$ となる。

3. Heは核が電荷+2で、電子が2個の系である。原子核は省略してよいので

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{|r_1 - r_2|}$$

とかける。

1. 1つ目の電子の運動量項、2. 2つ目の電子の運動量項 3. 核-1つ目の電子とのポテンシャルエネルギー項、4. 核-2つ目の電子とのポテンシャルエネルギー項、5. 電子1-電子2の反発項

4. s軌道1重に縮退(または縮退してない), p軌道3重、d軌道5重に縮退、f軌道は7重に縮退している。

5. p. 118 そのままなので略

以上