

構造化学 10 回目 Quiz 中田真秀

1. 水素分子イオンの図を書いて、Born-Oppenheimer 近似でのハミルトニアンを書き下せ。原子単位を用いること。
2. 1. で得られたハミルトニアンの各項に説明をつけよ。
3. 水素原子 2 つを離して置く。1s 軌道をそれぞれ $\psi_A(r_A)$ とし $\psi_B(r_B)$ とする。
 - 3.1. 2 つの軌道の和の概形を図で示せ。
 - 3.2. 2 つの軌道の差の概形を図で示せ。
 - 3.3. 軌道の和や差を考えられる理由を説明せよ。
 - 3.4. 2 つの軌道の和に電子が入っているとき、水素分子が形成されていると考えられる理由を書け
 - 3.5. 2 つの軌道の差に電子が入っているとき、水素分子が形成されないと考えられる理由を書け
4. 感想、要望、質問(コメント返し 95%以上)