

構造化学 10 回目 Quiz 中田真秀 略解

1. 教科書図 8.1

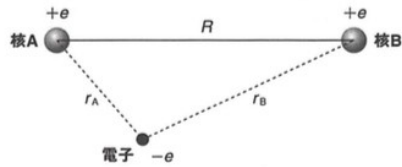


図 8.1 水素分子イオンの構造

電子と核 A の距離を r_A , 電子と核 B の距離を r_B , 核 A と核 B の距離 (核間距離) を R とおく.

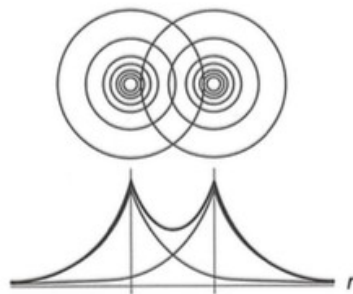
Hamiltonian は以下ようになる。教科書式(8.1)も参照せよ

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r_A} - \frac{1}{r_B} + \frac{1}{R_{AB}}$$

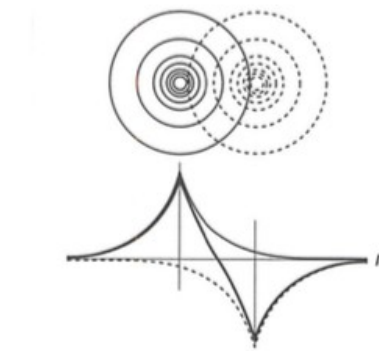
2. 1つ目から電子のエネルギー項、核 A と電子のクーロンポテンシャルエネルギー項、核 B と電子のクーロンポテンシャルエネルギー項、核 A と核 B のクーロンポテンシャルエネルギー項

3.

3.1. 教科書図 8.9



3.2 教科書図 8.10



3-3 波動関数の重ね合わせの原理より、または、波動関数は同士の線形結合が取れるから、など。

3-3.核間反発を打ち消すような負電荷を持った電子が結合間に存在するから

3.4 核間で電子の波動関数の節があり、電子の存在がゼロのところがある。その為核間反発を受けやすい。