

量子化学1 演習(5)

学籍番号： _____ 氏名： _____

問題

1s 原子軌道 ϕ_{1s} を持つ原子同士が相互作用することで、結合性分子軌道 Ψ_0 と反結合性分子軌道 Ψ_1 を形成する。1s 原子軌道 ϕ_{1s} の軌道エネルギー ϵ_{1s} を -0.50 a.u., 結合性分子軌道 Ψ_0 の軌道エネルギー ϵ_0 を -0.58 a.u., 反結合性分子軌道 Ψ_1 の軌道エネルギー ϵ_1 を -0.26 a.u. とする。下記の問いに答えよ。

問1) 水素原子は 1s 原子軌道 ϕ に 1 個の電子を持つ。水素原子の全電子エネルギーの値 E_H を求めよ。

問2) 2 個の水素原子が相互作用することで分子を形成し、エネルギーの低い方の分子軌道を 2 個の電子が占有した。このときの水素分子の全電子エネルギーの値 E_{H_2} を求めよ。

問3) 問1と問2から、2 個の水素原子から 1 個の水素分子が形成される反応 $2H \rightarrow H_2$ に伴うエネルギー変化の値 ΔE_{H_2} を求めよ。

問4) 問3の結果に基づいて、2 個の水素原子から 1 個の水素分子が形成される理由を書け。

問5) ヘリウム原子 (1s 原子軌道 ϕ に 2 個の電子を持つ) の全電子エネルギーの値 E_{He} を求めよ。

問6) 2 個のヘリウム原子が相互作用することで分子を形成するときのヘリウム分子の全電子エネルギーの値 E_{He_2} を求めよ。

問7) 問5と問6から、2 個のヘリウム原子から 1 個のヘリウム分子が形成される反応 $2He \rightarrow He_2$ に伴うエネルギー変化の値 ΔE_{He_2} を求めよ。

問8) 問7の結果に基づいて、2 個のヘリウム原子から 1 個のヘリウム分子が形成されない理由を書け。