

(1) (1) ~ (3) 略

(4) H: $z=1$ $D(r)$ の max を考えよ

$Li^{2+}: z=3$ $H: r=a_0$ (\because (2))

$He^+: z=2$ 水素類似原子の $\frac{D(r)}{dr} = \frac{8r z^3}{a_0^3} \exp\left(-\frac{2zr}{a_0}\right) - \frac{2z}{a_0} \cdot \frac{4r^2 z^3}{a_0^3} \exp\left(-\frac{2zr}{a_0}\right)$

$$= \frac{8r z^3}{a_0^3} \left(1 - \frac{rz}{a_0}\right) \exp\left(-\frac{2zr}{a_0}\right)$$

よて $r = \frac{a_0}{z}$ で極大, $Li^{2+}: z=3$ 則ち $\frac{a_0}{3} \times = \frac{1}{3}$

$He^+: z=2$ 則ち $\frac{a_0}{2} \times = \frac{1}{2}$

よて大きい順に

$H(a_0) > He^+(a_0/2) > Li^{2+}(a_0/3) //$

(2) 略

(3) (1) 2005年(5) (1)(2)(4)を参照. たし 10^* など表記は B_2 分子に準じて下さい.

(2) 略

(3) $H_2^+: \frac{1}{2}(1-0) = \frac{1}{2} //$ $C_2^+: \frac{1}{2}(7-4) = \frac{3}{2} //$ $O_2^+: \frac{1}{2}(10-5) = \frac{5}{2} //$

- 部分がイオン化により電子を1つ減した部分.

(4) 水素化リチウムの MO において, H 原子の $1s$ 軌道と Li 原子の $2s$ 軌道が共同して 2σ を形成している. ここで AO の安定性は $1s_H > 2s_Li$ であり, 一般に異核2原子分子の極性は MO を形成する AO が安定である側の原子に偏る.

よて LiH では H が δ^- , Li が δ^+ となる.

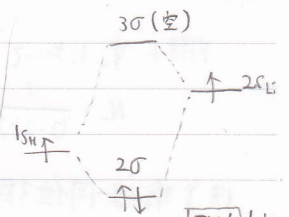


Fig. 1 LiH

• 水素化フッ素の MO において, H 原子の $1s$ 軌道と F 原子の $2p_z$ 軌道が共同して 3σ を形成し, F 原子の $2p_x, 2p_y$ が単独でそれぞれ $1\pi_x, 1\pi_y$ を形成している. ここで AO の安定性は $1s_H < 2p_F$ であり, かつ $1\pi_x$ と $1\pi_y$ を形成する電子は元々 F 由来であるため, 共有電子対は F 原子に偏る.

よて HF では H が δ^+ , F が δ^- となる.

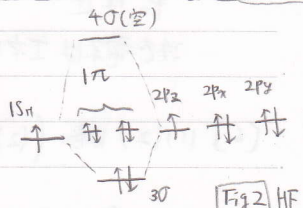
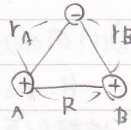


Fig. 2 HF

[5] (1)
$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_A} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_B} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}$$



- 第1項: 電子の運動エネルギー
- 第2項: 電子と核Aのカoulombポテンシャルエネルギー
- 第3項: = 核B
- 第4項: 核A, B間の = (斥力)

(2) 共役関数を ψ_{\pm}^* を使って

$$\begin{aligned} \int \psi_{+} \hat{H} \psi_{+}^* d\tau &= N_{+}^2 \int (\phi_A + \phi_B) \hat{H} (\phi_A + \phi_B) d\tau \\ &= N_{+}^2 \int (\phi_A \hat{H} \phi_A + 2\phi_A \hat{H} \phi_B + \phi_B \hat{H} \phi_B) d\tau \\ &= N_{+}^2 (2\alpha + 2\beta) = E_{+} \quad \text{--- ①} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int \psi_{+} \psi_{+}^* d\tau &= N_{+}^2 \int (\phi_A \phi_A + 2\phi_A \phi_B + \phi_B \phi_B) d\tau \\ &= N_{+}^2 (2 + 2\delta) = 1 \quad \text{--- ②} \end{aligned}$$

①②より

$$N_{+} = \frac{1}{(2+2\delta)^{1/2}}, \quad E_{+} = \frac{\alpha + \beta}{1 + \delta}$$

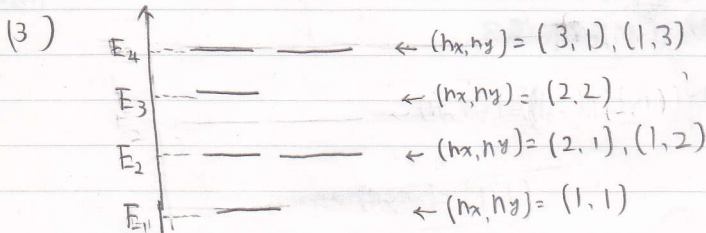
$$\begin{cases} \psi_{+} = \frac{1}{(2+2\delta)^{1/2}} (\phi_A + \phi_B), & \text{エネルギー} = \frac{\alpha + \beta}{1 + \delta} \\ \psi_{-} = \frac{1}{(2-2\delta)^{1/2}} (\phi_A - \phi_B), & \text{エネルギー} = \frac{\alpha - \beta}{1 - \delta} \end{cases}$$

同様に ψ_{-} について

$$N_{-} = \frac{1}{(2-2\delta)^{1/2}}, \quad E_{-} = \frac{\alpha - \beta}{1 - \delta}$$

- (3) ψ_{+} は同位相の ϕ の重ね合わせであるため、核間に電子が存在して結合を寄与する。
- ψ_{-} は逆 = できない。
- よって電子はエネルギー単位の低い ψ_{+} に収容されるため、H₂ は安定な結合を形成する。

[6] (1)(2) 略 (2) の答え:
$$\frac{\hbar^2}{8mL^2} (n_x^2 + n_y^2) \quad (n_x = 1, 2, \dots, n_y = 1, 2, \dots)$$



$$\left(\begin{array}{l} \text{ただし} \\ E_1 = \frac{2\hbar^2}{8mL^2} \\ E_2 = \frac{5\hbar^2}{8mL^2} \\ E_3 = \frac{8\hbar^2}{8mL^2} \\ E_4 = \frac{10\hbar^2}{8mL^2} \end{array} \right)$$