



## 化学演習 2 演習編

メタデータ	言語: Japanese 出版者: 公開日: 2012-10-25 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: 小原, 繁 メールアドレス: 所属:
URL	<a href="https://hokkyodai.repo.nii.ac.jp/records/8949">https://hokkyodai.repo.nii.ac.jp/records/8949</a>

分子軌道 (演習問題編)

北海道教育大学釧路校  
小原 繁

1

演習問題 1

弦の振動と一次元の箱の中の粒子の運動を記述する関数について類似点を記しなさい。

2

演習問題 2

一次元の箱の中の粒子の運動の波動関数から環の上の粒子の運動を表わす波動関数とその準位図を描きなさい。

3

演習問題 3

■ 2つの1s原子軌道から構成される分子軌道と準位図を描き、水素分子は安定に存在するがヘリウム分子は安定に存在しないことを、この図に基づき述べなさい。

4

演習問題 4

■ 2組の2p原子軌道から構成された分子軌道と準位図を描きなさい。  
■ 結合解離エネルギーが大きな方は $O_2$ と $O_2^+$ のいずれの方が。  
■ また  $N_2$ と $N_2^+$ ではどちらが大きいか。

5

演習問題 5

■ 環の上を運動する粒子の波動関数とベンゼン環 軌道の分子軌道とエネルギー準位を描き (波動関数は真上から見た図で良い)、共通点と相違点について述べなさい。

6

## 演習問題 6

- 弦振動の運動方程式(次式)を導出しなさい。

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\rho}{T} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$$

7

## 演習問題 7

- 進行波の方程式とド・ブローイ波長の式から波動方程式を導出しなさい。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U\Psi = E\Psi$$

8

## 演習問題 8

- 下記の固有値方程式を解いて、 $e, c_1, c_2$  を求めなさい。

$$\begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} \\ F_{12} & F_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = e \begin{pmatrix} 1 & S_{12} \\ S_{12} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

9

## 演習問題 9

- 演習問題 8 で得られたエネルギー準位を図に描くと図Aになり図Bにはならないことを説明しなさい。

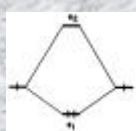


図 A

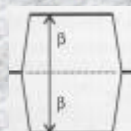


図 B

10