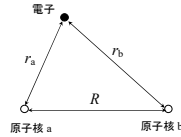


応用化学演習 I 小テスト No.2-8(H29.11.13)

学籍番号 _____ 氏名 _____

1. 次の図の H_2^+ 分子に対応するハミルトニアン (\hat{H}) を記せ (必要な記号は適宜用いよ).



2. このハミルトニアン (\hat{H}), 波動関数 (ψ) およびエネルギー固有値 (E) を用いて, シュレディンガー方程式を書き, さらに $E =$ の形に変形せよ.

3. 上の水素分子の波動関数を $\psi = c_a \phi_a + c_b \phi_b$ とする. ただし, ϕ_a, ϕ_b はそれぞれ水素原子 a, b の原子軌道 (実関数) である. 問2の ψ に上式を代入して E を整理せよ. ただし, 以下の記号を用いよ.

$$H_{AA} = \int \phi_a \hat{H} \phi_a d\tau = H_{BB} = \int \phi_b \hat{H} \phi_b d\tau$$

$$H_{AB} = \int \phi_a \hat{H} \phi_b d\tau = H_{BA} = \int \phi_b \hat{H} \phi_a d\tau$$

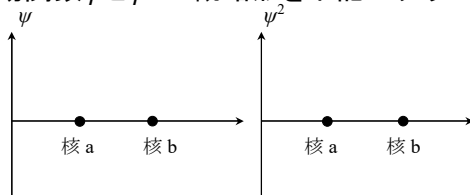
$$S_{AA} = \int \phi_a \phi_a d\tau = S_{BB} = \int \phi_b \phi_b d\tau = 1$$

$$S_{AB} = \int \phi_a \phi_b d\tau = S_{BA} = \int \phi_b \phi_a d\tau = S$$

4. 問3で得られた結果に対して係数 c_a と c_b に対して変分法を適用してエネルギー固有値を求めよ.

5. 問4で得られた2つのエネルギー固有値に対する波動関数を求めよ.

6. 問5で得られた2つの分子軌道の内, 反結合性軌道の波動関数 ψ と ψ^2 の概略形を下記のグラフに描け.



7. NO 分子は O_2 型の MO を作るものとして次の問に答えよ.

(1) NO の MO を描け.

(2) NO^+, NO, NO^- のそれぞれ結合次数を求めよ.

NO^+ : NO : NO^- :

(3) NO^+, NO, NO^- のうち常磁性を示すものはどれか.

8. 次のデータを基にして N-H 単結合と N-N 単結合の結合エネルギーの値を推定せよ.

- (1) $N_2(g) + 3H_2(g) = 2NH_3(g)$ $\Delta H_1 = -92 \text{ kJmol}^{-1}$
 (2) $N_2(g) + 2H_2(g) = NH_2-NH_2(g)$ $\Delta H_2 = 42 \text{ kJmol}^{-1}$
 (3) $H_2(g) = 2H(g)$ $\Delta H_3 = 436 \text{ kJmol}^{-1}$
 (4) $N_2(g) = 2N(g)$ $\Delta H_4 = 942 \text{ kJmol}^{-1}$

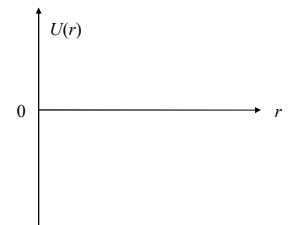
9. ある二つの原子間に次のポテンシャルエネルギーが作用するとき, 以下の問に答えよ.

$$U(r) = 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right)$$

ただし, r は核間距離, ϵ はエネルギーの単位をもつ定数, σ は長さの逆数の次元をもつ定数.

(1) このポテンシャル関数の安定な平衡状態の値 (U と r) を求めよ.

(2) 右図にこの関数の概略図を描け.



10. 次の式はイオン結晶の格子エネルギーの式である. イオンの価数, イオン間距離および結晶構造の観点から何が読み取れるか.

$$U = \frac{N_A M Z_+ Z_- e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \left(1 - \frac{1}{n} \right)$$