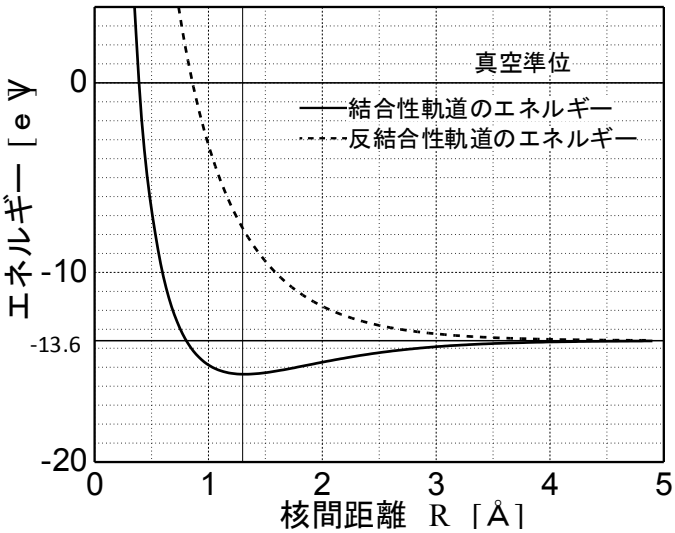
化学第二 講義プリント　７－A	担当　**真島**

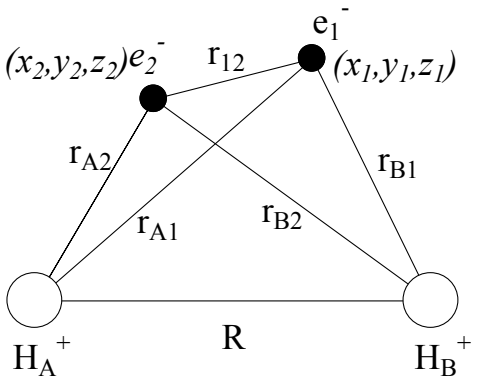
演習問題６の略解

略解6－1 結合性軌道のエネルギーと反結合性軌道のエネルギーの原子核間距離 R 依存性



第7回演習問題

7－1 水素分子モデルを参考にして、水素分子のハミルトニアンを書き、それぞれの項を説明せよ。



H_2分子モデル

7－2 水素分子イオン H_2^+ と水素分子 H_2 における平衡核間距離と安定化するエネルギーを比較すると、下の表のようになる。

(a)何故、平衡核間距離が水素分子の方が小さいのか、

(b)また、安定化するエネルギーは水素分子の方が大きいのか、それぞれ理由を述べよ。

	平衡核間距離(Å)	安定化エネルギー(eV)
水素分子イオン H_2^+	1.06	$H + H^+ -2.6 \rightarrow H_2^+$
水素分子 H_2	0.85	$2H -4.7 \rightarrow H_2$

7—3 分子軌道法（MO法）と原子価結合法（VB法）をそれぞれ用いて、水素分子の軌道エネルギーを計算すると、VB法の方がMO法と比較して、より実際の水素分子のエネルギーに近い結果が得られた。

それでは、実際の水素分子における電子は、どのような位置関係をしている確率が高いと考えられるか、それぞれの方法で仮定している波動関数を考察することにより、説明せよ。