5/9　量子力学

GW 空け眠気覚まし　基礎事項確認

★１回目の復習

１）波動関数とは絶対値の（①　　）が確率を表すような複素関数である。

２）（②　　）演算子は、固有値が実数となるため、物理量を表現できる演算子である。行列表示の時は自己随伴行列と呼ばれる。

★２回目の復習

３）（③　　）演算子は、運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの計算のための演算が入ったもので、別名「エネルギー演算子」と呼ばれている。

４）分子の軌道計算の際、「原子核は電子よりずっと重いので、その動きは相対的にゆっくりで、電子が原子核の場の中で動いている間は静止しているとして扱ってもよい」とする近似を、この近似を作った「原爆の父」の名を取って、（④　　）近似と呼ぶ。

５）分子軌道の計算方法には、有名なものが二つある。一つは、各原子に局在した原子軌道関数またはその混成軌道関数に電子を詰めて全体の波動関数を創り上げる、（⑤　　）である。もう一つは、分子内の電子は分子全体に広がっているとする（⑥　　）である。

６）「任意の波動関数を使ってエネルギーを計算すると、その計算値は真のエネルギーよりも決して小さくはならない」とする数学の技術を（⑦　　）と呼ぶ。

７）分子軌道を考える上で、軌道 ϕ(A), ϕ(B)を考えた時、H をハミルトニアン演算子とすると、$\int\psi(A)\psi(B)d\tau$ を（⑧　　）積分、$\int\psi(B)H\psi(B)d\tau$ や $\int\psi(A)H\psi(A)d\tau$ を（⑨　　）積分、$\int\psi(A)H\psi(B)d\tau$ を（⑩　　）積分と呼ぶ。

８）分子軌道を計算すると、二つのエネルギー準位が導かれる。安定な方が（⑪　　）軌道、エネルギーが高い方が（⑫　　）軌道である。

★３回目の復習

９）シュレーディンガー方程式を 3 次元で解くと、ψ は難しい形になる。このうち、規格

コメント [s1]: ２乗

コメント [s2]: エルミート

コメント [s3]: ハミルトニアン

コメント [s4]: ボルン-オッペンハイマー

コメント [s5]: 原子価結合法

コメント [s6]: 分子軌道法

コメント [s7]: 変分原理

コメント [s8]: 重なり

コメント [s9]: クーロン

コメント [s10]: 共鳴

コメント [s11]: 結合性

コメント [s12]: 反結合性

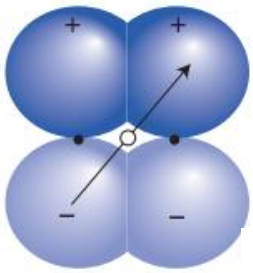
化された波動関数を（⑬　　）と呼び、$Y_{l,m}(\theta, \varphi)$と書く。

１０）電子の量子状態を表す量子数として、n を（⑭　　）、l を（⑮　　）、m を（⑯　　）、s を（⑰　　）という。

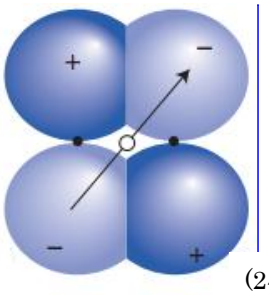
１１）l の値によって電子軌道の形は決まり、l=0, 1, 2 をそれぞれ、（⑱　　）軌道、（⑲　　）軌道、（⑳　　）軌道と呼ぶ。

１２）2 個の原子の間の結合軸に結合電子が分布している共有結合を（21.　　）結合、垂直に結合電子が分布している共有結合を（22.　　）結合と呼ぶ。

１３）形成された軌道の対称性も含めて分子軌道を表現すると、



(23.　　)



(24.　　)

１４）共有結合の強さは（25.　　）で決まり、b=(1/2)(n-n*)で求める。ここで n は結合性軌道にある電子の数、n*は反結合性軌道にある電子の数である。

コメント [s13]: 球面調和関数
コメント [s14]: 主量子数
コメント [s15]: 方位量子数
コメント [s16]: 磁気量子数
コメント [s17]: スピン量子数
コメント [s18]: s
コメント [s19]: p
コメント [s20]: d
コメント [s21]: σ
コメント [s22]: π
コメント [s23]: πu
コメント [s24]: πg
コメント [s25]: 結合次数