

物理化学序論 演習問題

学籍番号	氏名
------	----

問1 H₂分子のσ結合について、結合性MOと反結合性MOの波動関数をLCAOを用いて表せ。ただし、 ψ_A と ψ_B をそれぞれ水素原子AとBの1sオービタルの波動関数、 S を両者の重なり積分とすること。

$$\text{結合性 MO} \quad \psi = \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}}(\psi_A + \psi_B)$$

$$\text{反結合性 MO} \quad \psi = \frac{1}{\sqrt{2(1-S)}}(\psi_A - \psi_B)$$

問3 N₂分子とN₂⁺分子についてMOのエネルギー準位図と電子配置を示せ。また、それぞれの結合次数を求め、どちらの結合が強いかを判断せよ。

N ₂ 分子	N ₂ ⁺ 分子
結合次数 $b = (10-4)/2 = 3$	結合次数 $b = (9-4)/2 = 2.5$
結合の強さ 結合次数の大小関係より、N ₂ の方が結合が強い	