

H27 参考問題

分子電子構造論

以下の問いに答えよ

- (1) 1つの軌道に電子が3個以上入らない、これをパウリの排他原理という、その理由を説明せよ。
- (2) 平行スピンをもつ電子同士に働く相互作用について説明せよ。
- (3) 反平行スピンをもつ電子同士に働く相互作用について説明せよ。
- (4) 電子エネルギーを最小化させる電子の密度分布が反対称化された波動関数に対応する場合、これを電子密度がN表示可能であるという。N表示可能の条件について説明せよ。
- (5) クープマンズの定理について説明せよ。
- (6) ヘルマンファイマンの定理について説明せよ。