

# H<sub>2</sub><sup>+</sup>分子

[22] 1電子系で最も簡単な分子であるH<sub>2</sub><sup>+</sup>分子の電子の波動関数について考える。

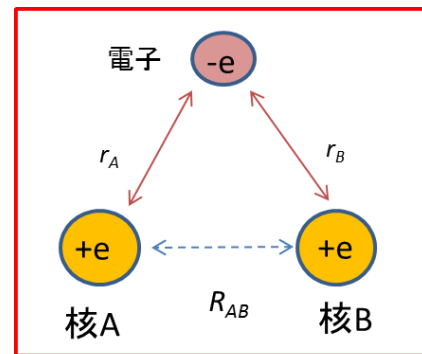
まず絵を描いてハミルトニアンを立てると  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_A} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_B} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{AB}}$

となる。しかしながらこれは3粒子の系なので厳密解は存在しない。

そこで厳密解により近い近似解を求めることを考える。

この分子軌道が、核Aと核B上にある水素の1s軌道できていると考えて、

$$\Psi \approx c_A \phi_{A,1s} + c_B \phi_{B,1s} \quad \text{と近似する。 (原子軌道による線形結合)}$$



変分原理によると、以下で定義されるエネルギーがより低くなるよう係数  $c_A, c_B$  を決めると、

より厳密解に近い波動関数が得られる。 
$$E \equiv \frac{\int \Psi^* \hat{H} \Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau}$$

(1) エネルギー  $E$  を  $c_A, c_B, \alpha, \beta, S$  を用いて表せ。ただし  $c, \phi$  は実数であるとしてよい。

また  $\phi$  に関する積分値  $\alpha, \beta, S$  は事前に計算可能な量であり以下のように定義している。

$$\int \phi_{A,1s}^* \hat{H} \phi_{A,1s} d\tau = \int \phi_{B,1s}^* \hat{H} \phi_{B,1s} d\tau = \alpha \quad \int \phi_{A,1s}^* \hat{H} \phi_{B,1s} d\tau = \int \phi_{B,1s}^* \hat{H} \phi_{A,1s} d\tau = \beta$$

$$\int \phi_{A,1s}^* \phi_{A,1s} d\tau = \int \phi_{B,1s}^* \phi_{B,1s} d\tau = 1 \quad \int \phi_{A,1s}^* \phi_{B,1s} d\tau = \int \phi_{B,1s}^* \phi_{A,1s} d\tau = S$$

(2)  $\frac{\partial E}{\partial c_A} = 0, \frac{\partial E}{\partial c_B} = 0$  の条件から、 $c_A, c_B$  の関係式を2組、決定せよ。また対応するエネルギーも求めよ。

(3) (2)で得られた2つの波動関数の概形を描き、それぞれの名称を答えよ。



**感想・意見・質問 (必須)**