

## 水素分子の波動関数

水素分子の波動関数は、二つの水素原子の波動関数  $\psi_1, \psi_2$  を用いて近似的に次のように表すことができる。

$$\psi_1, \psi_2$$

$$\Psi = a\psi_1 + b\psi_2 \quad (1)$$

$$\Psi = a\psi_1 + b\psi_2$$

水素分子の原子間距離を  $R$  とすると、 $xy$  平面上での  $x$  軸に沿った  $\psi_1, \psi_2$  のグラフを表す式は、

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{1}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{|x+R/2|}{a_0}} \quad (2)$$

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{1}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{|x+R/2|}{a_0}}$$

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{1}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{|x-R/2|}{a_0}} \quad (3)$$

式(2)をコピーして、符号を変えます。

となる。係数  $a, b$  に関しては対称性から、  $a, b$

$$a^2 = b^2 \quad (4)$$

$$a^2 = b^2$$

となる。これから、結合性分子軌道  $\Psi$  と反結合性分子軌道  $\Psi^*$  は、次のように求められる。

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}} (\psi_1 + \psi_2) \quad (5)$$

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}} (\psi_1 + \psi_2)$$

$$\Psi^* = \frac{1}{\sqrt{2(1-S)}} (\psi_1 - \psi_2) \quad (6)$$

$$\Psi^* = \frac{1}{\sqrt{2(1-S)}} (\psi_1 - \psi_2)$$

ここで、 $S$  は重なり積分  $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1 \psi_2 dv$  を表す。

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1 \psi_2 dv$$