

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 ψ_1, ψ_2 を用いて近似的に次のように表すことができる。

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

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 ψ_1, ψ_2 のグラフを表す式は、

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

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

となる。係数 a, b に関しては対称性から、

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

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

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

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

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