

問題 4

水素分子正イオン ( $H_2^+$ ) の電子状態に関する以下の設問に答えよ。

- (a) 2つの水素原子核を1および2とする。1および2から電子までの距離をそれぞれ  $r_1$ 、 $r_2$  とし、核間距離を  $R$  とする。Born-Oppenheimer 近似のもとで電子に対するシュレディンガー方程式は次式で表される。

$$\left( \frac{-\hbar^2}{8\pi^2 m_e} \nabla^2 + V \right) \Psi = E \Psi$$

ただし、 $m_e$  は電子の質量、 $\hbar$  はプランク定数である。

距離  $R$  における水素分子正イオンのエネルギーは上記のシュレディンガー方程式を解いて得られるエネルギー  $E$  に核間の静電エネルギーを加えることで求められる。 $V$  および核間の静電エネルギーを与える式を記せ。

- (b) 電子の波動関数  $\Psi$  を、原子核1および2に属する1s軌道関数  $\phi_1$  および  $\phi_2$  の線形結合で近似する。

$$\Psi_+ = N_+ (\phi_1 + \phi_2)$$

$$\Psi_- = N_- (\phi_1 - \phi_2)$$

$\Psi_+$  の規格化定数  $N_+$  を求めよ。ただし、 $\phi_1$  および  $\phi_2$  の重なり積分の値を  $S$  とせよ。

- (c)  $\Psi_+$  および  $\Psi_-$  軌道の電子の確率密度を表す式を示し、それを用いて結合性について論ぜよ。
- (d) 水素分子正イオンのエネルギー曲線を  $R$  を横軸として図示せよ。また、そのような図で表せる理由を簡単に述べよ。ただし、シュレディンガー方程式を解く必要はない。