

水素分子イオン 後編

★ 前編の内容

水素分子イオン H_2^+

$$\psi = \sqrt{\frac{1}{2+2s}} (\psi_a + \psi_b), E = \frac{\alpha + \beta}{1 + s}$$

$$\psi = \sqrt{\frac{1}{2-2s}} (\psi_a - \psi_b), E = \frac{\alpha - \beta}{1 - s}$$

$$\star s = \int \psi_a^* \psi_b dV = \int \psi_b^* \psi_a dV$$

s: 重なり積分

プロトン間距離 R に依存

軌道の重なり具合を表す ($0 \leq s < 1$)

$$\star \alpha = H_{aa} = \int \psi_a^* \hat{H} \psi_a dV$$

$$= \int \psi_a^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_a} \right) \psi_a dV$$

水素原子のエネルギー E_H

$$+ \int \psi_a^* \left(-\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_b} \right) \psi_a dV + \int \psi_a^* \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{R} \right) \psi_a dV$$

J とおく

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{R} \int \psi_a^* \psi_a dV$$

$$= E_H + J + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{R}$$

$$\star \beta = H_{ab}$$

$$= \int \psi_a^* \hat{H} \psi_b dV$$

$$= \int \psi_a^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_b} \right) \psi_b dV$$

$E_H \int \psi_a^* \psi_b dV = E_H s$

$$+ \int \psi_a^* \left(-\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_a} \right) \psi_b dV + \int \psi_a^* \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{R} \right) \psi_b dV$$

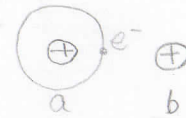
K とおく

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{R} \int \psi_a^* \psi_b dV$$

$$= E_H s + K + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{R} s$$

★ クーロン積分 J

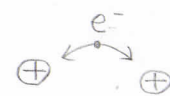
$$J = \int \psi_a^* \left(-\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_b} \right) \psi_a dV$$



a の水素原子の近くに b のプロトンがあることにより生じる静電エネルギー

★ 共鳴積分 K

$$K = \int \psi_a^* \left(-\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_a} \right) \psi_b dV$$

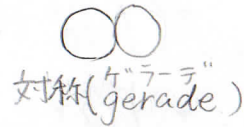


2つのプロトンが電子を交換することにより生じるエネルギーの安定化

J, K はともに 負の値 をとる

☆ 2 状態の関係

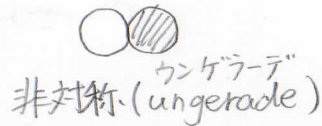
• $\psi_g = \sqrt{\frac{1}{2+2s}} (\psi_a + \psi_b)$



$E_g = \frac{\alpha + \beta}{1 + s}$

$= E_H + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{R} + \frac{J + K}{1 + s}$

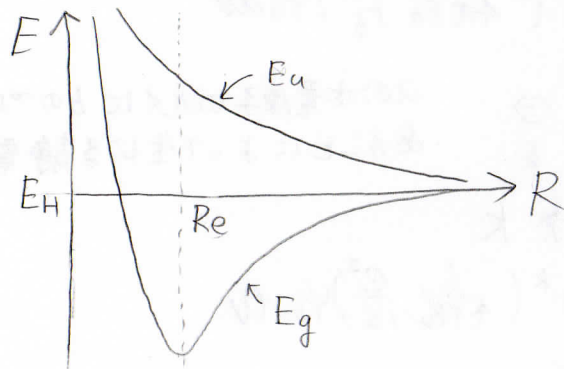
• $\psi_u = \sqrt{\frac{1}{2-2s}} (\psi_a - \psi_b)$



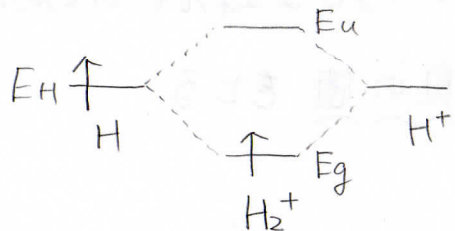
$E_u = \frac{\alpha - \beta}{1 - s}$

$= E_H + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{R} + \frac{J - K}{1 - s}$

エネルギーの第二, 三項は R に依存



$R = R_e$ のとき



2つの核が電子を共有すると、
安定な軌道ができる



共有結合の起源