

問題 7: 原子軌道と分子軌道

- a) H_2^+ の分子軌道は、原子軌道の線形結合 (LCAO) で表せる事が知られている。分子軌道は以下の様に表され、

$$\phi_a \propto 1s_A - 1s_B$$

$$\phi_b \propto 1s_A + 1s_B$$

ここで、 $1s_A$ 、 $1s_B$ はそれぞれ核 A、核 B に中心を持つ基底状態における水素の原子軌道を表している。分子軌道のエネルギーは、 H_2^+ の核間距離の関数として、図 1 に示されている。(電子と H^+ (陽子) が無限に離れている時のエネルギーを 0 としている。)

- (1)、(2) のどちらが ϕ_a のエネルギー曲線か?

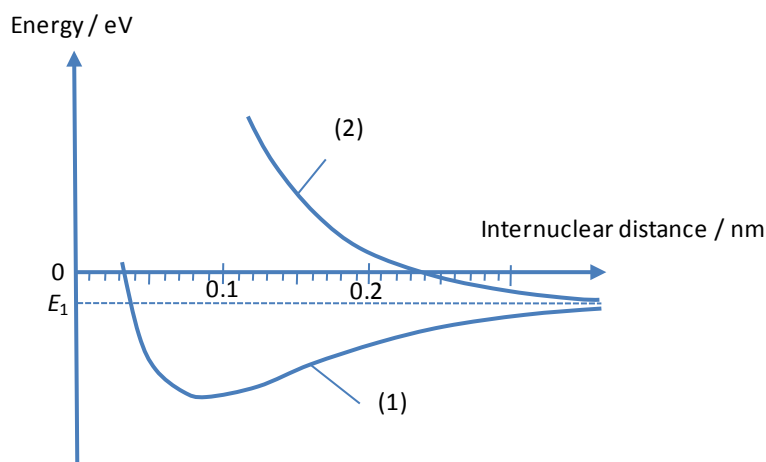


図 1

- b) H_2^+ が最安定な核間距離をグラフから読み取れ。
- c) 図 1 の 2 つのエネルギー曲線は、核間距離が大きくなると E_1 へ収束していく。エネルギー $|E_1|$ は、水素原子のどのような物理的パラメータと等しいかを記せ。