化学第二　第7回

東京工業大学大学院
電子物理工学専攻

真島豊

7-0　本日のメニュー

「 H_2分子(電子２個)の波動関数は？」

7-1　電子が2つの分子の波動関数
7-2　水素分子H_2の波動関数
7-3　水素分子H_2のエネルギー準位
7-4　分子軌道(MO法)の波動関数の４つの状態
7-5　原子価結合法(VB法)の波動関数の2つの状態
7-6　MO法とVB法の違い

7-1　電子が2つの分子の波動関数

一般に2つの電子の波動関数が同時に
存在可能である場合には、分子全体の
波動関数は2つの波動関数の積となる

7-2　水素分子の波動関数

１番目の電子の波動関数　$\Psi_{(1)} = c_1\Psi_{A(1)} + c_2\Psi_{B(1)}$

２番目の電子の波動関数　$\Psi_{(2)} = c_1\Psi_{A(2)} + c_2\Psi_{B(2)}$

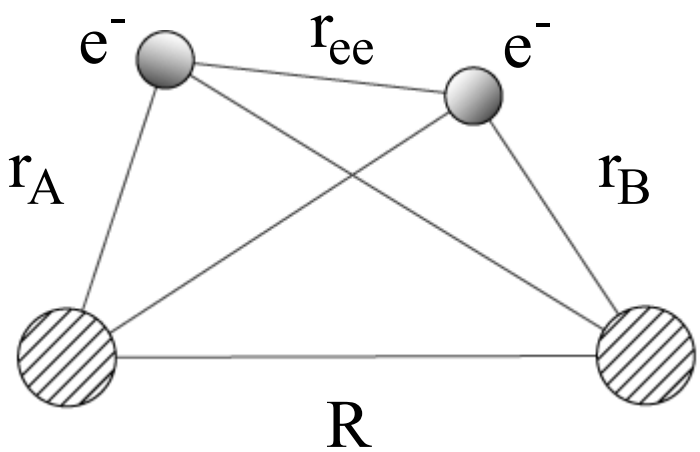
水素分子の波動関数は$\Psi_{(1)}$と$\Psi_{(2)}$の積で与えられる

$$\Psi_{H_2} = \Psi_{(1)}\Psi_{(2)} = \left\{c_1\Psi_{A(1)} + c_2\Psi_{B(1)}\right\}\left\{c_1\Psi_{A(2)} + c_2\Psi_{B(2)}\right\}$$

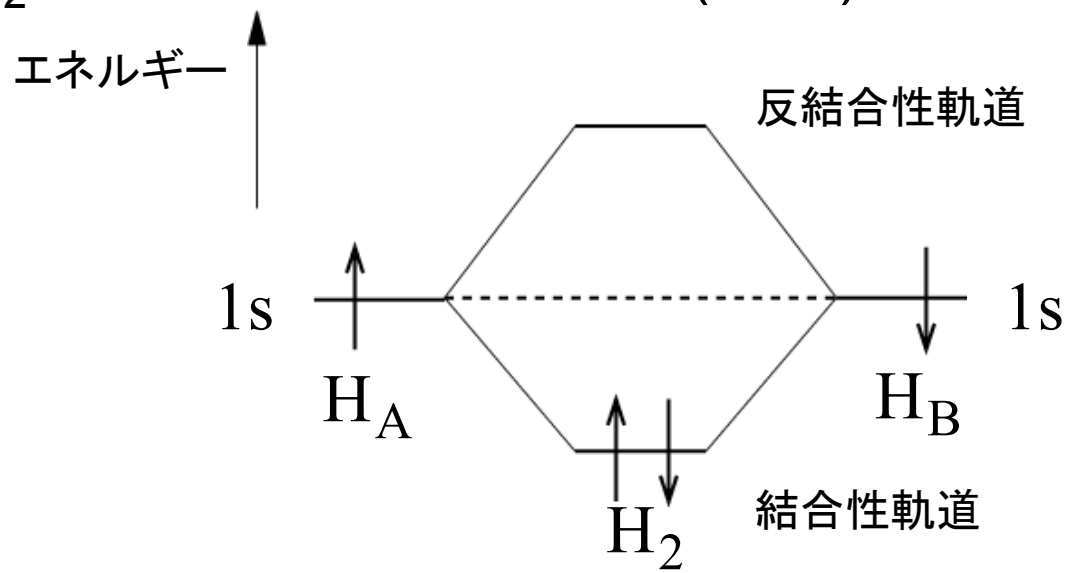
7-3　水素分子H_2のエネルギー準位

H_2^+イオン　電子１個

H_2分子　　電子２個

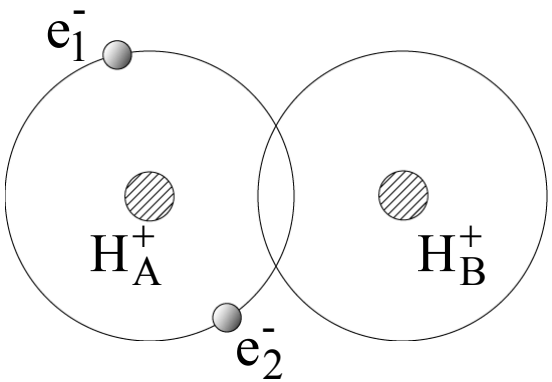


H_2分子のハミルトニアン $\mathbf{H}$ (演習)

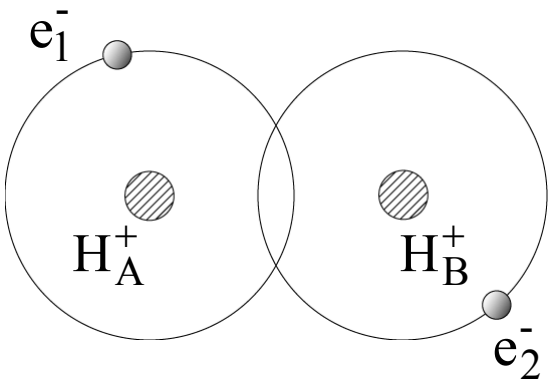


7-4　分子軌道法(MO法)の波動関数の4つの状態

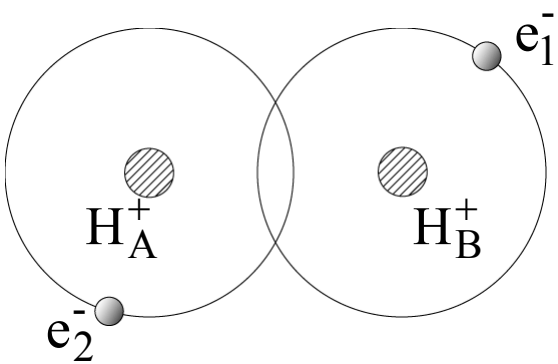
$$\Psi_{H_2} = \left\{\Psi_{A(1)} + \Psi_{B(1)}\right\}\left\{\Psi_{A(2)} + \Psi_{B(2)}\right\}$$
$$= \Psi_{A(1)}\Psi_{A(2)} + \Psi_{A(1)}\Psi_{B(2)} + \Psi_{B(1)}\Psi_{A(2)} + \Psi_{B(1)}\Psi_{B(2)}$$



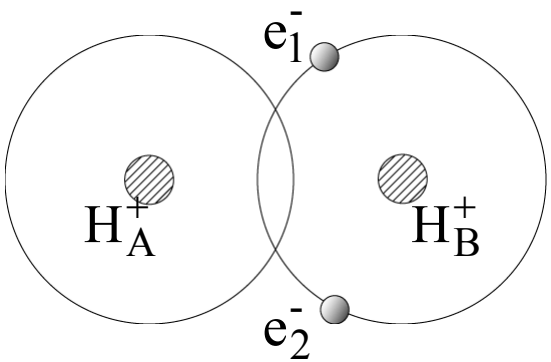
状態①　H_A^+上に電子1、2



②　H_A^+にe_1^-、H_A^+にe_2^-



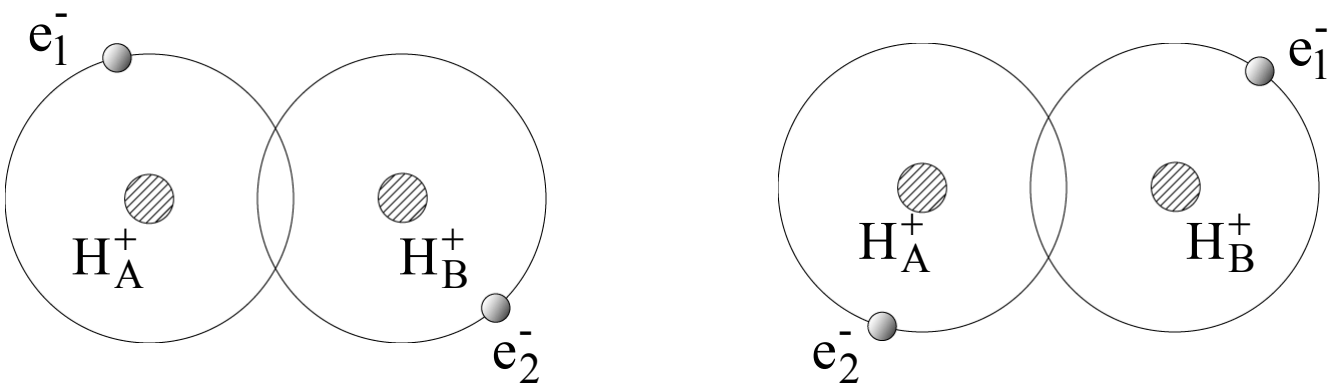
③　H_A^+にe_2^-、H_A^+にe_1^-



④　H_B^+上に電子1、2

7-5 原子価結合法(VB法)の波動関数の2つの状態

$$\Psi_{H_2} = \Psi_{A(1)}\Psi_{B(2)} + \Psi_{A(2)}\Psi_{B(1)}$$



VB (Valence Bond)法

原子はそれぞれ個性を保ちながら
電子をやりとりして化学結合を作る

⇨ 電子交換：各同士が近づくと自由に電子を交換するようになる
⇨ この電子のやりとりが原子間の結合(共有結合)を生む