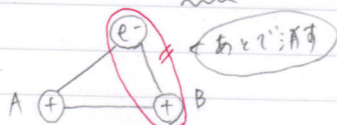


§4 分子

4.1 分子軌道法

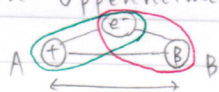
▷ 例) 水素分子イオン H_2^+



分子(多原子系)の(電子)波動関数
→ 分子のオービタル (Mulliken, 1932)

▷ 仮定その1

Born-Oppenheimer 近似 (1927)



核間距離は変わらない (電子の質量は核の質量の $\frac{1}{1800}$ 倍と仮定)

▷ 仮定その2

H_2^+ の分子軌道 (= 分子のオービタル)

Ψ (Molecular Orbital: MO)

① 核 A と電子からなる水素原子 A の

1s 軌道: χ_A (原子のオービタル)

重ね合わせ

(Atomic Orbital: AO)

② 核 B と電子からなる水素原子 B の

1s 軌道: χ_B

→ $\Psi = c_A \chi_A + c_B \chi_B$ (線形結合)

LCAO (Linear Combination of Atomic Orbital)

特にこれをつかって分子軌道を構築する方法 → LCAO-MO 法

