

## 量子化学1 演習(4)

学籍番号： \_\_\_\_\_ 氏名： \_\_\_\_\_

### 問題

水素分子  $H_2$  の分子軌道  $\Psi$  について、下記の問いに答えよ。

問1) この系の分子軌道を  $\Psi = C_1\phi_1 + C_2\phi_2$  と表すとき、 $\Psi$  に対する規格化条件  $\int \Psi^* \Psi d\tau = 1$  を用いたときに求めることができる係数  $C_1$  と  $C_2$  についての関係式を書け。ただし、この系の波動関数は水素原子の  $1s$  軌道  $\phi$  を基底関数とし、 $\phi$  を含む積分の値は  $\int \phi_n^* \phi_n d\tau = 1$ ,  $\int \phi_n^* \phi_m d\tau = S$  とする。

問2) この系の基底状態では、問1で示した2つの係数  $C_1$  と  $C_2$  の間に  $C_1 = C_2$  の関係が成り立つ。この関係と問1の結果から基底状態の分子軌道  $\Psi_0$  の表式を導き、重なり積分  $S$  などを用いて書け。

問3) 問2と同様、この系の励起状態では2つの係数  $C_1$  と  $C_2$  の間に  $C_1 = -C_2$  の関係が成り立つ。この関係と問1の結果から励起状態の分子軌道  $\Psi_1$  の表式を導き、重なり積分  $S$  などを用いて書け。