

2440 : 水素分子の Schrödinger 方程式

(分子の Schrödinger 方程式です!)

キーポイント：電子エネルギー；全エネルギー；核間反発エネルギーは電子エネルギーを求めたのちに加える

これまでと同じ手順で水素分子の Schrödinger 方程式をつくりましょう。水素分子の古典的モデルを図示します。各粒子を識別するため、電子には 1, 2 陽子には A, B の符号をつけました。

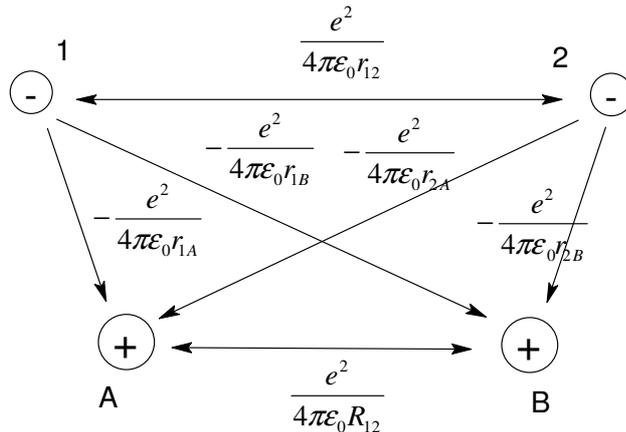


図 1. 水素分子の古典モデルとそれに含まれるエネルギー項

ハミルトン関数は,

$$H = \frac{1}{2m} (p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{e^2}{r_{1A}} - \frac{e^2}{r_{1B}} - \frac{e^2}{r_{2B}} - \frac{e^2}{r_{2A}} + \frac{e^2}{r_{12}} \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{AB}} \quad 1$$

となります。ここで、 $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{AB}}$ は原子核同士の反発エネルギーですので (電子の運動とは関係ないので), 取り除いて電子についてのエネルギーを計算してからあとで加えましょう。その項を除いてハミルトニアン (H^{el} : el は電子のみであることを示します) は,

$$H^{el} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{e^2}{r_{1A}} - \frac{e^2}{r_{1B}} - \frac{e^2}{r_{2B}} - \frac{e^2}{r_{2A}} + \frac{e^2}{r_{12}} \right) \quad 2$$

このハミルトニアンを用いて Schrödinger 方程式 $E^{el}\psi = H^{el}\psi$ を解いて得られる E^{el} は電子のエネルギーです。これを**電子エネルギー (electronic energy)** よびます。これに原子間反発エネルギーを加えたのが**全エネルギー (total energy)** で、 E で表します。

$$E = E^{el} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{AB}} \quad 3$$