

5 Hundの規則

Hundの規則は同じエネルギーの軌道に電子を詰め、 $2l+1$ が埋まらなければ、 $l < l'$  である。 向逆軌道数

- 同一エネルギーの電子は同じ軌道に埋められ、 $2l+1$ が埋まらなければ、 $l < l'$  である。
- 電子はエネルギーの低い軌道に埋められ、 $2l+1$ が埋まらなければ、 $l < l'$  である。
- 1個の電子を配置する。→ 別の軌道数が多い軌道に配置される。

6 本素原子の4s(陽子)の分子軌道

分子軌道は、原子軌道の結合と、分子軌道の単位は、この分子軌道の複素軌道の原子軌道と結合電子間の相互作用から分子軌道と理解される。

<水素分子>

本素原子は2個の陽子1個の電子からなる原子軌道。Hは1sの原子軌道に2つの電子(基底状態)がある。

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2 Z_A}{|r - R_A|} - \frac{e^2 Z_B}{|r - R_B|} + \frac{e^2 Z_A Z_B}{|R_A - R_B|}$$
 (A, B) (A, B) (A, B) (A, B)

$$\psi = c_1 \psi_{1sA} + c_2 \psi_{1sB}$$

$$c_1 = \frac{c_0}{C_A}$$

$$\int d\tau \psi^\dagger H \psi = E \int d\tau \psi^\dagger \psi \Rightarrow E = \frac{\int d\tau \psi^\dagger H \psi}{\int d\tau \psi^\dagger \psi}$$

$$E = \frac{U_A + 2ct + U_0 c^2}{1 + 2S_0 + c^2}$$

$$= \frac{U_A + 2ct + U_0 c^2}{1 + c^2 (S_0 - 0)}$$

$$U_A = \int d\tau \psi_A^\dagger H \psi_A$$

$$t = \int d\tau \psi_A^\dagger H \psi_B$$

$$S = \int d\tau \psi_A^\dagger \psi_B$$

$$\frac{dE}{dc} = -2 \frac{tc^2 + (U_A - U_0)c + t}{(1+c^2)^2} = 0$$

$$c = -\frac{U_A - U_0}{2t} \pm \sqrt{\left(\frac{U_A - U_0}{2t}\right)^2 + 1} \approx -\Delta \pm \sqrt{\delta^2 + 1}$$

$$c = \pm 1, E = U_A \pm t = U_0 \pm t$$