

關於氟化氫分子的一個計算*

黃 祖 洽**

(清 華 大 學 物 理 系)

在這篇短文裏, 我們根據量子力學, 計算氟化氫分子的各個構造常數。計算時採用氟離子被氫離子極化的看法, 利用變分法計算: 氟離子中各個電子的哈吹氏函數, 用了以前布朗氏¹所計算的結果。氟離子所有電子的總的波函數, 是一個行列式的形狀, 用 ψ_0 代表之。我們假定氟化氫分子中所有電子的總的波函數 ψ , 是如下的簡單形狀:

$$\psi \propto (1 + as) \psi_0$$

式中參變數 a 將由變分法決定, 而 s 代表各電子在分子軸方向的座標的總和。加入這個 $1 + as$ 因子, 是想粗淺地來表示氟離子所受氫離子的極化影響。茲列表比較所得的計算結果與查到的實驗結果², 如下: (結合能指分解分子為兩離子而計)

	分子距離	結合能	振動波數	電偶矩
計算值	1.11 \AA	10.84 ev	2797 cm^{-1}	2.13 $debyes$
實驗值	0.92 \AA	15.66 ev	3962 cm^{-1}	1.91 $debyes$

* 本文根據於作者 1950 在清華大學所交入碩士論文。

** 目前在北京中國科學院近代物理研究所工作。

1. Brown, *Phys. Rev.* **44**, (1933), 223.

2. Landolt-Bornstein, *Phys. Chem. Tabellen*, 1935, Smyth and Hannay, *J. Am. Chem. Soc.* **68**, (1946), 171.