



図4.11 MO法によって計算した水素分子のポテンシャルエネルギー（黒丸）

これを近似する4次関数 $E(r) = 1656.2r^4 - 6005.2r^3 + 8320.9r^2 - 5122.7r + 1171.2$ （実線）。2次関数による近似（破線）。