

量子化学 II (大学院講義: 量子化学概論)

担当教員: 林 重彦

レポート 一回目

出題: 11/10/2011、提出期限: 11/25/2011 17:00

提出先: 6 号館 154 号室前のレポートボックス

注意点: 解答はすべて過程を明確に記述して下さい。答えだけでは不正解にします。

[問題 1]

水素分子イオンのエネルギーと分子軌道を考える。授業で見たように、水素原子の原子軌道の LCAO 分子軌道を用いて、変分法を適用することにより、二つのエネルギー解とそれに対応する波動関数を導け。エネルギー解は、積分 $J(R)$ 、 $K(R)$ 及び $S(R)$ (定義はレジュメ参照) で表すところまで導出せよ。

[問題 2]

次の電子に関する積分

$$J(R) = \left\langle \phi_A \left| -\frac{1}{r_B} \right| \phi_A \right\rangle = e^{-2R} \left(1 + \frac{1}{R} \right) - \frac{1}{R}$$

を確認せよ。 ϕ_A は原子 A 上の水素の原子軌道、 r_B は原子 B からの電子の距離、及び R は原子 A-B 間の距離である。

[問題 3]

水素原子軌道の LCAO 分子軌道を用いた、水素分子イオンの結合性軌道のポテンシャルエネルギー曲線の極小値を与える R の関係式を導け。実際に、 $R_{eq} = 2.493a_0$ を代入して極小値となっているか確認せよ(あるいは、余力があれば、 R の関係式を数値的に解いて、平衡核間距離を求めてもよい)。

[問題 4]

一重項基底電子状態の水素分子の VB 波動関数と MO 波動関数を用いたエネルギー表式を

それぞれ求めよ。原子軌道は水素原子の 1s 軌道のみを用いることとする。エネルギー表式は、積分 $J(R)$ 、 $K(R)$ 、 $S(R)$ 、及び

$$I(R) = \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \phi_A(\mathbf{r}_1) \phi_A(\mathbf{r}_1) \frac{1}{r_{12}} \phi_A(\mathbf{r}_2) \phi_A(\mathbf{r}_2)$$

$$J'(R) = \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \phi_A(\mathbf{r}_1) \phi_A(\mathbf{r}_1) \frac{1}{r_{12}} \phi_B(\mathbf{r}_2) \phi_B(\mathbf{r}_2)$$

$$K'(R) = \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \phi_A(\mathbf{r}_1) \phi_B(\mathbf{r}_1) \frac{1}{r_{12}} \phi_A(\mathbf{r}_2) \phi_B(\mathbf{r}_2)$$

$$L(R) = \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \phi_A(\mathbf{r}_1) \phi_A(\mathbf{r}_1) \frac{1}{r_{12}} \phi_A(\mathbf{r}_2) \phi_B(\mathbf{r}_2)$$

を用いて表わせ。VB 波動関数と MO 波動関数での表式の違いで気が付いたことがあれば議論せよ。

[おまけ] 授業内容及びレポートの質問、感想、要望などがあればどうぞ。