

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 二回目

出題: 12/19/2011、提出期限: 01/06/2012 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]

第二周期のすべての原子の等核二原子分子について、一価の陽イオン及び陰イオンの結合次数を求めよ。

[問題 2]

水素の 1s 軌道とフッ素の 2p 軌道から作られる分子軌道を考える。ここで、フッ素の 2p 軌道は分子軸方向を向いているとする。それらの原子軌道における一電子ハミルトニアンエネルギーの期待値をそれぞれ $E_{H_{1s}}$ 及び $E_{F_{2p}}$ とし、 $E_{H_{1s}} > E_{F_{2p}}$ であるとする。

(a) それらの分子軌道の間の一電子ハミルトニアン行列要素を V としたときの永年方程式を導き、結合性及び反結合性分子軌道のエネルギーをそれぞれ求めよ。ただし、簡単のため原子軌道間の重なり積分は 0 とする。

(b) $\Delta E^2 \gg 4V^2$ ($\Delta E = E_{H_{1s}} - E_{F_{2p}} > 0$) のとき、 $\sqrt{\Delta E^2 + 4V^2} \approx \Delta E + \frac{1}{2} \frac{4V^2}{\Delta E}$ と近似する。こ

のとき、結合性軌道及び反結合性軌道の LCAO 係数の比、 $c_{H_{1s}}^b / c_{F_{2p}}^b$ 及び $c_{H_{1s}}^a / c_{F_{2p}}^a$ を求め、それぞれの分子軌道で、どちらの原子軌道の寄与が大きいかを議論せよ。

[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。