

量子化学1 演習(1)

学生番号： _____ 氏名： _____

問題

任意の分子軌道 ψ を2つの原子軌道 ϕ_1 と ϕ_2 を用いて $\psi = C_1\phi_1 + C_2\phi_2$ と表した場合を考える。係数 C_1 と C_2 を変化させたときのエネルギーの値は、次の式(1)のように表すことができる。ただし、この式(1)中にある積分の値は、それぞれ、 $H_{11} = H_{22} = -0.484$, $H_{12} = -0.378$, $S = 0.503$ とする。

$$\epsilon = \frac{C_1^2 H_{11} + C_2^2 H_{22} + 2C_1 C_2 H_{12}}{C_1^2 + C_2^2 + 2C_1 C_2 S} \quad \dots\dots (1)$$

問1) 係数の値を $(C_1, C_2) = (-1.0, 1.0)$, $(-0.5, 1.0)$, $(0.5, 1.0)$, $(1.0, 1.0)$ として式(1)を解いたときのエネルギーの値 ϵ をそれぞれ求めよ。

① $(C_1, C_2) = (-1.0, 1.0)$

② $(C_1, C_2) = (-0.5, 1.0)$

③ $(C_1, C_2) = (0.5, 1.0)$

④ $(C_1, C_2) = (1.0, 1.0)$

問2) 問1の結果から、4つの係数の組 $(C_1, C_2) = (-1.0, 1.0)$, $(-0.5, 1.0)$, $(0.5, 1.0)$, $(1.0, 1.0)$ のうち、真の波動関数に最も近いものはどの係数だと推測できるか。最も適切なものを一つ選べ。