

量子化学1 演習(2)

学籍番号： _____ 氏名： _____

問題

水素分子イオン H_2^+ のシュレディンガー方程式 $H\Psi = E\Psi$ を変分法で解く方法について、下記の問いに答えよ。

問1) 分子軌道 Ψ に対するエネルギー E を表す式を書け。

問2) この系の永年方程式を書け。ただし、この系の波動関数は水素原子の1s軌道 ϕ を基底関数として

$\Psi = C_1\phi_1 + C_2\phi_2$ と表し、 ϕ を含む積分の値は $\int \phi_n^* \phi_m d\tau = S_{nm}$, $\int \phi_n^* H \phi_m d\tau = H_{nm}$ と表すものとする。

問3) 問2で定義した積分の値を $S_{nn} = 1$, $S_{nm} = S$, $H_{nn} = \alpha$, $H_{nm} = \beta$ とした永年方程式を書け。

問4) 問3の永年方程式から物理的に意味のある解を求めるときに用いる永年行列式を書け。

問5) 問4の永年行列式を解いて得られる2つのエネルギー E_0 および E_1 のうち、基底状態に対する値 E_0 を α, β, S を使って書け。

問6) 問4の永年行列式を解いて得られる2つのエネルギー E_0 および E_1 のうち、励起状態に対する値 E_1 を α, β, S を使って書け。