

量子化学1 演習(3)

学籍番号： _____ 氏名： _____

問題

水素分子イオン H_2^+ のエネルギーについて、下記の問いに答えよ。

問1) 2個の水素の原子間距離が $R = 2.0 \text{ Bohr}$ のとき、クーロン積分 α 、共鳴積分 β 、重なり積分 S の値は $\alpha = -0.484 \text{ a.u.}$, $\beta = -0.378 \text{ a.u.}$, $S = 0.503$ である。基底状態のエネルギー E_0 の値を書け。

問2) 問1と同様に、原子間距離 $R = 2.0 \text{ Bohr}$ のときの励起状態のエネルギー E_1 の値を書け。

問3) 2個の水素の原子間距離が $R = 4.0 \text{ Bohr}$ のとき、クーロン積分 α 、共鳴積分 β 、重なり積分 S の値は $\alpha = -0.500 \text{ a.u.}$, $\beta = -0.094 \text{ a.u.}$, $S = 0.124$ である。基底状態のエネルギー E_0 の値を書け。

問4) 問1と同様に、原子間距離 $R = 4.0 \text{ Bohr}$ のときの励起状態のエネルギー E_1 の値を書け。

問5) 2個の水素の原子間距離が $R = 8.0 \text{ Bohr}$ のとき、クーロン積分 α 、共鳴積分 β 、重なり積分 S の値は $\alpha = -0.500 \text{ a.u.}$, $\beta = -0.002 \text{ a.u.}$, $S = 0.004$ である。基底状態のエネルギー E_0 の値を書け。

問6) 問1と同様に、原子間距離 $R = 8.0 \text{ Bohr}$ のときの励起状態のエネルギー E_1 の値を書け。