

量子化学1 演習(7)

学籍番号：_____ 氏名：_____

問題

水素化リチウム分子 LiH は、H の原子核上にある 1s 原子軌道を $\phi_{H,1s}$ および Li の原子核上にある 2s 原子軌道を $\phi_{Li,2s}$ が相互作用することで、2つの分子軌道 2σ および 3σ を形成する。ただし、H 原子 1s 軌道のエネルギーは $\alpha_1 = -0.5$ a.u., Li 原子 2s 軌道のエネルギーは $\alpha_2 = -0.2$ a.u., 軌道相互作用エネルギーは $\beta = -0.12$ a.u. とする。この異核二原子分子 LiH の電子状態について、以下の問いに答えよ。

問1) この分子について、分子軌道 2σ のエネルギーの値を求めよ。

問2) 問1と同様に、分子軌道 3σ のエネルギーの値を求めよ。

問3) シュレディンガー方程式を近似的に解くと、分子軌道 2σ は $\Psi = C_{H,1s} \phi_{H,1s} + C_{Li,2s} \phi_{Li,2s}$ と書ける。

問1で得られた結果を用いて、分子軌道 2σ の展開係数 $C_{H,1s}$ および $C_{Li,2s}$ の値を求めよ。

問4) 問3と同様に、分子軌道 3σ も $\Psi = C_{H,1s} \phi_{H,1s} + C_{Li,2s} \phi_{Li,2s}$ と書ける。問2で得られた結果を用いて、

分子軌道 3σ の展開係数 $C_{H,1s}$ および $C_{Li,2s}$ の値を求めよ。