

## 量子化学1 演習(8)

学籍番号：\_\_\_\_\_ 氏名：\_\_\_\_\_

### 問題

水素化リチウム分子 Li H は、H の原子核上にある 1s 原子軌道を  $\phi_{H,1s}$  Li の原子核上にある 1s 原子軌道を  $\phi_{Li,1s}$ 、2s 原子軌道を  $\phi_{Li,2s}$  とすると、シュレディンガー方程式を近似的に解いた結果、その 1 $\sigma$  分子軌道は  $\Psi_{1\sigma} = \phi_{Li,1s}$ 、2 $\sigma$  分子軌道は  $\Psi_{2\sigma} = C_{H,1s} \phi_{H,1s} + C_{Li,2s} \phi_{Li,2s}$  と書けることが分かった。2 $\sigma$  分子軌道の展開係数の値は  $C_{H,1s} = 0.944$ 、 $C_{Li,2s} = 0.331$  であった。以下の問いに答えよ。

問1 この分子について、H 原子上の電子密度の値を答えよ。

問2 この分子について、Li 原子上の電子密度の値を答えよ。

問3 この分子について、H 原子上の部分電荷の値を答えよ。

問4 この分子について、Li 原子上の部分電荷の値を答えよ。