

レポート課題について(期限 7 月 12 日 24 時まで)

手書き・PC 作成どちらでもよいが、kibaco の課題から提出すること。

(不具合のある時だけメール添付で出してください)

容量を抑えた単一の PDF ファイルを作成し、自分の名前をファイル名に含めること。

本講義では、2 電子 2 軌道の系 (例: H_2 分子における 2 つの 1s 軌道による分子軌道) における完全 CI 解と MP2 解と HF 解を各核間距離で、1, 2 電子積分の値から求め、グラフにした。

それぞれのエネルギーを求めるために必要な以下の概念を学んだ。

レポートには再度以下の観点について自分の言葉でまとめ直してほしい。細かな導出は省略してよい。

- ▶ スレーター行列式とはどのようなものでなぜスレーター行列式の導入が必要か?
- ▶ スピン関数の導入はなぜ必要か?
- ▶ ハートリーフォックのエネルギーはどのように計算されるか?
- ▶ 1, 2 電子積分の定義は何か?
- ▶ 完全 CI 法の考え方は何か?
- ▶ 行列要素 H_{ij} などは、なぜ計算が必要か?
- ▶ 完全 CI 解を求めるときに、 Φ_1, Φ_2 しか相互作用に考慮しないのはなぜか?
- ▶ 摂動法はどのような考え方で、波動関数やエネルギーを改良してゆく方法か?
- ▶ MP2 法では 0 次波動関数の取り方はどのように選ぶか?
- ▶ MP2 法では 0 次のエネルギーはどのように決定されるか?
- ▶ MP2 法では 2 次のエネルギーはどのような表現になるか?
- ▶ その他オリジナルなまとめも大歓迎

結果に対する考察課題 (余力のある人は考えてみよう)

1. 完全 CI 法で出てくる 2 つの解は、何と何に対応しているか?
2. 完全 CI 法の低いエネルギーの解は、必ず HF のエネルギーより低い。なぜか?
3. 完全 CI の低いエネルギーの解は、長距離において、配置の係数 C_i, C_j の絶対値が同じ値に収束する。その理由はなぜか? (やや難しい、ただ波田先生の講義で、開殻 1 重項表現としてやっているかも)
4. 各ポテンシャルの極小値を取る結合長を、多項式関数にフィッティングするなどして求めてみよ。また実験値の H_2 分子の結合距離を自分で調べて比較せよ。
5. 同様にして、極小値のエネルギーを得て、解離状態のエネルギー差を取り、結合エネルギーを計算せよ。こちらも実験値を調べて比較せよ。
6. 実験との一致が悪い場合、原因を考えよ。
7. HF 法、MP2 法、CI 法の結果を比べると、どの結合長領域でそれぞれは類似しており、どの領域で各結果が異なっているか? それはどの数字から確かめられるか?
8. なぜ MP2 法のエネルギーは、長距離でダダ下がりなのか? 数式から説明せよ。
9. その他オリジナル考察も大歓迎