分子座標の導入

- 化学では結合軸を z軸とするので，原子a，原子bの核間距離 Rを用いて，1電子波動関数 ϕを記述する．

重なり積分 S_{ab}の計算は次の2つの変数 $\mu=(r_a-r_b)/R$，$\nu=(r_a+r_b)/R$を用いる楕円体座標で整理すると，次のように変形される．

$$d\mathbf{r} = dxdydz = \left(\frac{R}{2}\right)^3 \left(\mu^2 - \nu^2\right) d\varphi d\mu d\nu$$

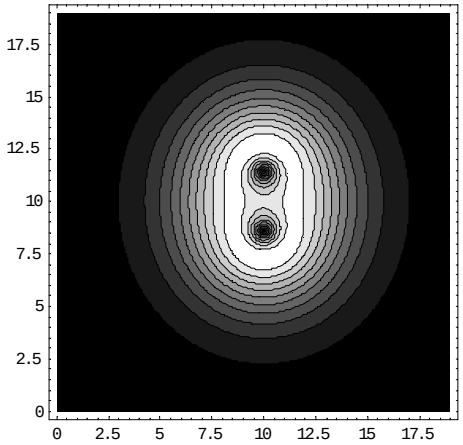
$$\chi_a = \pi^{-1/2} a_H{}^{-2/3} e^{-r_a/a_H}, \chi_b = \pi^{-1/2} a_H{}^{-2/3} e^{-r_b/a_H}$$

$$S_{ab} = \int \chi_a^* \chi_b dr = \pi^{-1} a_H \left(\frac{R}{2a_H}\right)^3 \int e^{-(R/a_H)\mu} \left(\mu^2 - \nu^2\right) d\varphi d\mu d\nu$$

$$S_{ab} = \left\{1 + R + \frac{1}{3}R^2\right\} e^{-R}$$

水素分子の電子密度分布

- 1電子密度分布x-zプロットでは(x,z)点でのr_aとr_bを求めてから，$\Phi^*\Phi$drを計算する．そしてそのデータを用いて，等高線プロットする．参考資料のプログラムでは，下記の関数を用いている．



$$\varphi^*\varphi d\mathbf{r} = \frac{1}{1+S_{ab}}\left(\frac{R}{2}\right)^3 e^{-R\nu}\left(e^{-R\mu}+e^{R\mu}+2\right)\left(\mu^2-\nu^2\right)d\mu d\nu$$