

問 1.

化学結合の生成は、次の二準位系ハミルトニアン行列で大雑把にモデル化できる。

$$\mathbf{H}(\lambda) = \begin{pmatrix} E_1 & \lambda\Delta \\ \lambda\Delta & E_2 \end{pmatrix} \quad (1)$$

ここで  $E_1$  および  $E_2$  は、結合生成に関与する原子軌道のエネルギー準位であり、 $\lambda$  は原子軌道間に働く相互作用（摂動）の強さである。このとき、以下の問い答えよ。

- (a). ハミルトニアン行列  $\mathbf{H}(\lambda)$  のエネルギー固有値  $\epsilon_1$  及び  $\epsilon_2$  を相互作用  $\lambda$  の関数として計算せよ。
- (b). 問い (a) で得られたエネルギーは、 $\lambda \ll |E_1 - E_2|$  と仮定出来る場合にはどうなるか。 $\lambda$  に関して 2 次の項まで考えよ。
- (c). 問い (b) で得られたエネルギーは、それぞれ結合性、反結合性軌道のエネルギーである。このとき、これらのエネルギーギャップが最も大きくなるのはどのような場合か。

**ヒント:**  $\sqrt{a+bx}$  を  $x$  に関してマクローリン展開し、 $x$  の 1 次の項まで考える。これに  $\lambda^2$  などを適宜代入する。