2020 年 5 月 19 日

ブルーバックス『はじめての量子化学』の訂正とお詫び

2019 年 3 月刊行『はじめての量子化学』(平山令明著) に誤りがありましたので、ここに訂正してお詫びいたします。

p.45 *l*.12
(誤) その全エネルギーは E になる
(正) そのエネルギーは E になる

p.45 *l*.20
(誤) 分子の全エネルギーを計算する条件 (関数) が〜〜
(正) 分子のエネルギーを計算する条件 (関数) が〜〜

p.48 図 2-3 を以下の図に差し替え

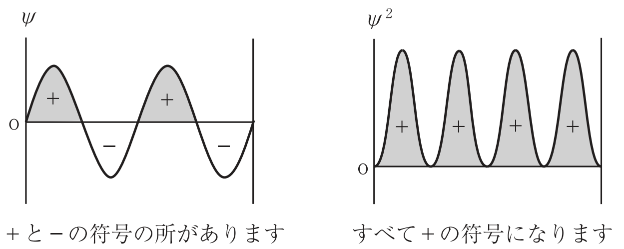

図2-3　ψとψ²の関係

p.51 *l*.1
(誤)
つまり 2 つの分子軌道の式は

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_2 \text{ および } \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_2$$

となります。$\frac{1}{\sqrt{2}}$ の係数が現れる理由は、$\int \psi^2 d\tau = 1$ から明らかでしょう。2 つの原子軌道からは 2 つの分子軌道が作られます。〜〜

（正）

実際の分子軌道の式は次のようになります。

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2+2S_{12}}}(\phi_1 + \phi_2) \text{ および } \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2-2S_{12}}}(\phi_1 - \phi_2)$$

S_{12} は２つの原子軌道 ϕ_1 と ϕ_2 がどの程度重なるか（図2-1）を示す量です。２つの式の導き方は巻末の付録で説明します。

　２つの原子軌道からは２つの分子軌道が作られます。〜〜

$p.73$ $l.4$

（誤）原子がマイナス・イオンにどの程度なりやすいかは〜

（正）原子がどの程度マイナスの電荷を帯びやすいかは〜

$p.146$ $l.15$

（誤）$F = Q_1Q_2/\varepsilon d$

（正）$F = Q_1Q_2/4\pi\varepsilon d^2$

$p.250$ $l.4$ から $l.18$ まで

（誤）

　$S_{11} = S_{22} = 1$ そして $H_{11} = H_{22}$ になるので、（a）式と（b）は簡単になり、次の１組の式になります。

$$c_1(H_{11} - E') + c_2(H_{12} - E'S_{12}) = 0$$
$$c_1(H_{12} - E'S_{12}) + c_2(H_{11} - E') = 0$$

　これらの対の式を解くと〜〜

　　〜〜となり、2-5 で現れた式と一致します。

（正）

　$S_{11} = S_{22} = 1$ そして $H_{11} = H_{22}$ になるので、（a）式と（b）は少し簡単になり、次の１組の式になります。

$$c_1(H_{11} - E') + c_2(H_{12} - E'S_{12}) = 0 \tag{c}$$
$$c_1(H_{12} - E'S_{12}) + c_2(H_{11} - E') = 0 \tag{d}$$

　この連立方程式を解くと（クラメルの公式を知っている人は簡単に解けると思います）、次の２つの解 E_+ と E_- が

E' について得られます。

$$E_+ = \frac{H_{11} + H12}{1 + S_{12}} \tag{e}$$

$$E_- = \frac{H_{11} - H12}{1 - S_{12}} \tag{f}$$

（e）式を（c）に代入すると、$c_1 = c_2$ が求められます。今、$c_1 = c_2 = c$ とすると、$\psi_1 = c(\phi_1 + \phi_2)$ になります。この分子軌道には 1 個の電子しかありませんから $\int \psi_1^2 d\tau = 1$ です。従って、

$$\begin{aligned}\int \psi_1^2 d\tau &= \int \{c(\phi_1 + \phi_2)\}^2 d\tau \\ &= c^2 \int \phi_1^2 d\tau + 2c^2 \int \phi_1 \phi_2 d\tau + c^2 \int \phi_2^2 d\tau = 1\end{aligned} \tag{g}$$

になります。

ϕ_1 と ϕ_2 の原子軌道には 1 個の電子しかないので、$\int \phi_1^2 d\tau = \int \phi_2^2 d\tau = 1$ です。一方、$\int \phi_1 \phi_2 d\tau$ は 2 つの原子軌道の重なり具合を表す量 S_{12}（図付-3）ですから、(g) 式は $2c^2 + 2c^2 S_{12} = 1$ になります。従って、

$$c = \frac{1}{\sqrt{2 + 2S_{12}}}$$

となり、

$$\phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2 + 2S_{12}}}(\phi_1 + \phi_2)$$

になります。まったく同様に、(f) を（d）に代入すると、$c_1 = -c_2$ が求められ、それに基づき、

$$\phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2 - 2S_{12}}}(\phi_1 - \phi_2)$$

になります。