

(Tip-3) 基底関数系の短縮係数・短縮指数の具体的数値

(a) 第2周期原子までの計算用データ

(1) STO-3Gの短縮係数・短縮指数 (2p軌道まで)

簡略化スレータ型原子軌道の最小二乗法による解として、以下に掲載する。

| 軌道  | i | 短縮指数 $\alpha$ | 短縮係数       |          |
|-----|---|---------------|------------|----------|
|     |   |               | s 軌道       | p 軌道     |
| 1s  | 1 | 2.22766       | 0.154329   |          |
|     | 2 | 0.405771      | 0.535328   |          |
|     | 3 | 0.109818      | 0.444635   |          |
| 2sp | 1 | 0.994203      | -0.0999672 | 0.155916 |
|     | 2 | 0.231031      | 0.0399513  | 0.607684 |
|     | 3 | 0.0751386     | 0.700115   | 0.391957 |

原子毎の  $\alpha_i$  の決定には、以下の原子毎のスケール因子  $\zeta = \kappa \zeta_0$  ( $\kappa : (2)$  で述べる分子エネルギー最小化の係数、 $\zeta_0 = Z/n$  ( $Z$  : 原子番号  $n$  : 主量子数)) を用いて

$$\alpha_i \rightarrow \zeta^2 \alpha_i \rightarrow (\kappa \zeta_0)^2 \alpha_i \rightarrow (\kappa Z/n)^2 \alpha_i$$

と置き換えて使用する。

(2) STO-3Gでのスケール因子  $\zeta$

原子のどんな状態のときの最小エネルギーを考えるかによって、スケール因子  $\zeta$  は異なるが、以下には、これらの原子で構成される分子のエネルギーを最小化する(この影響を  $\kappa$  で表す。下記は逆算。)とされるスケール因子  $\zeta$  を記載する。

| 原子 | 1s 軌道 $\zeta$ ( $\kappa$ ) | 2s,2p 軌道 $\zeta$ ( $\kappa$ ) |
|----|----------------------------|-------------------------------|
| H  | 1.24 (1.24)                |                               |
| He | 2.0925 (1.046)             |                               |
| Li | 2.69 (0.897)               | 0.75 (0.500)                  |
| Be | 3.68 (0.920)               | 1.10 (0.550)                  |
| B  | 4.68 (0.936)               | 1.45 (0.580)                  |
| C  | 5.67 (0.945)               | 1.72 (0.573)                  |
| N  | 6.67 (0.953)               | 1.92 (0.549)                  |
| O  | 7.66 (0.958)               | 2.25 (0.563)                  |
| F  | 8.65 (0.961)               | 2.55 (0.567)                  |

(b) **ESML (Environment Molecular Sciences Laboratory)のデータ (第3周期以上)**

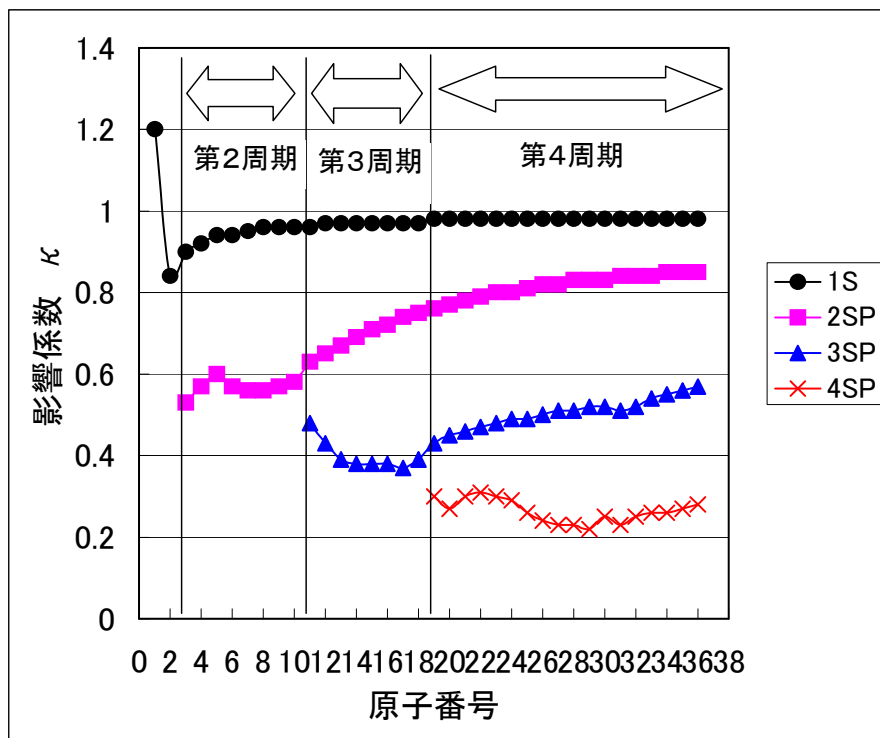
第3周期以上の原子を対象とする他、STO-NGのみならず種々の基底関数系を利用するなら

<http://bse.pnl.gov/bse/portal>

を参照されたい。

(このデータは原子毎に、 $\langle d_i \rangle / \langle \zeta^2 \alpha_i \rangle$ のセットで与えられる)

<参考> ESMLから入手した **STO-3G** のデータから、上記の**影響係数 $\kappa$** を整理すると



原子毎の $\kappa$ を適用せず、周期毎に一定値を使用するのも一つの便法である。

| $\kappa$ | 1S   | 2SP  | 3SP  | 4SP  |
|----------|------|------|------|------|
| 第2周期     | 0.94 | 0.57 |      |      |
| 第3周期     | 0.97 | 0.70 | 0.40 |      |
| 第4周期     | 0.98 | 0.83 | 0.52 | 0.27 |