

(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 α | 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 α_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 ζ

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 ζ 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 κ で表す。下記は逆算。)とされるスケール因子 ζ を記載する。

| 原子 | 1s 軌道 ζ (κ) | 2s,2p 軌道 ζ (κ) |
|----|----------------------------|-------------------------------|
| 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)**

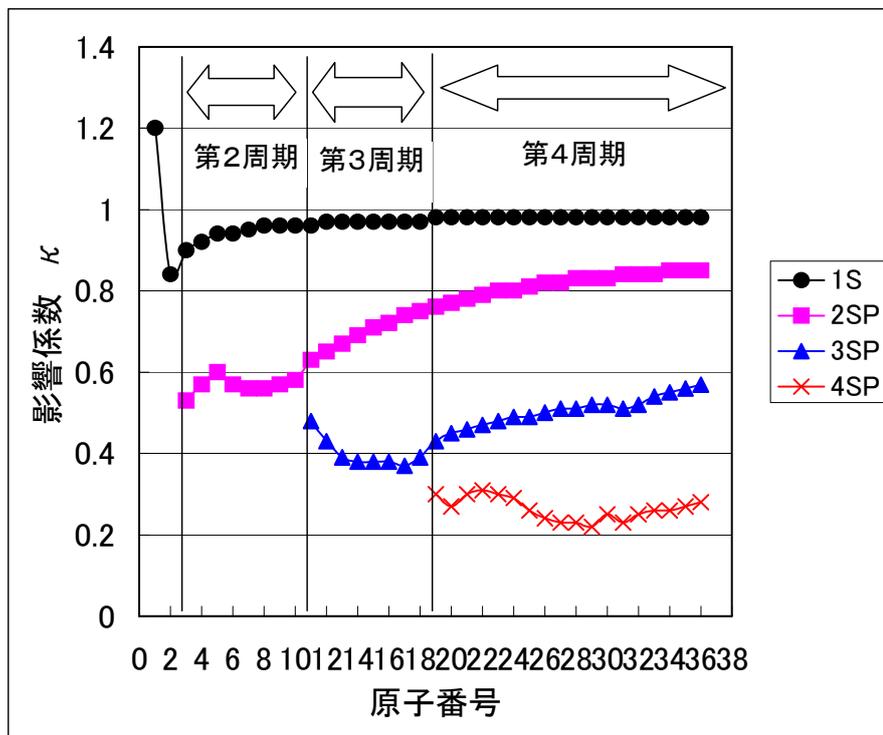
第3周期以上の原子を対象とする他、STO-NGのみならず種々の基底関数系を利用するなら

<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 κ** を整理すると



原子毎の κ 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。

| κ | 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 |