

付録1 原子軌道のエネルギーと空間的な広がり.

表 1. 原子軌道のエネルギー(計算値). 1 a.u.=27.212 eV.

	1s	2s	2p	3s	3p
H	-0.5				
He	-0.9180				
Li	-2.4777	-0.1963			
Be	-4.7327	-0.3093			
B	-7.6953	-0.4947	-0.3099		
C	-11.326	-0.7056	-0.4334		
N	-15.629	-0.9453	-0.5676		
O	-20.669	-1.2443	-0.6319		
F	-26.383	-1.5725	-0.7300		
Ne	-32.772	-1.9304	-0.8504		
Na	-40.479	-2.7970	-1.5181	-0.1821	
Mg	-49.032	-3.7676	-2.2821	-0.2530	
Al	-58.501	-4.9107	-3.2183	-0.3934	-0.2100
Si	-68.812	-6.1565	-4.2560	-0.5399	-0.2970
P	-79.970	-7.5110	-5.4009	-0.6964	-0.3916
S	-92.004	-9.0043	-6.6825	-0.8796	-0.4374
Cl	-104.88	-10.608	-8.0725	-1.0731	-0.5065
Ar	-118.61	-12.322	-9.5715	-1.2774	-0.5910

表 2. 原子軌道の空間的な広がり(計算値). 1 a.u.=0.529 Å.

	1s	2s	2p	3s	3p
H	1.50				
He	0.927				
Li	0.573	3.874			
Be	0.415	2.649			
B	0.326	1.977	2.205		
C	0.268	1.589	1.714		
N	0.228	1.332	1.410		
O	0.119	1.142	1.232		
F	0.176	1.001	1.084		
Ne	0.158	0.892	0.965		
Na	0.143	0.779	0.798	4.209	
Mg	0.131	0.690	0.685	3.253	
Al	0.120	0.620	0.601	2.559	3.434
Si	0.111	0.563	0.535	2.207	2.752
P	0.104	0.516	0.483	1.933	2.323
S	0.097	0.476	0.441	1.721	2.061
Cl	0.091	0.442	0.406	1.556	1.842
Ar	0.086	0.412	0.375	1.422	1.663

藤永 茂「分子軌道法」岩波 (1980).