# Computer practikum QCB III, Opdracht 3

29 april 2004

## 3 Valence bond model voor $H_2$

In opgave 5 van het Werkcollege QCB II hebben we de elektronische Hamiltoniaan ($\mathsf{H}$) van het $H_2$ molecuul opgeschreven en de verwachtingswaarde hiervan over de (niet genormeerde) valence bond golffunctie

$$\Psi_+(1,2) = \phi_{1s,A}(1)\phi_{1s,B}(2) + \phi_{1s,B}(1)\phi_{1s,A}(2)$$

uitgewerkt. Het resultaat voor de bindingsenergie was

$$\Delta E = \frac{P(R) + Q(R)}{1 + S(R)^2}.$$

De overlap integraal $S(R)$, de Coulomb integraal $P(R)$ en de exchange integraal $Q(R)$ zijn als volgt gedefinieerd

$$\begin{aligned}
S(R) &= \langle \phi_{1s,A} | \phi_{1s,B} \rangle \\
P(R) &= \frac{1}{R} + 2j(R) + J(R) \\
Q(R) &= \frac{S(R)^2}{R} + 2S(R)k(R) + K(R)
\end{aligned}$$

en de in $P(R)$ en $Q(R)$ voorkomende integralen zijn

$$\begin{aligned}
j(R) &= \langle \phi_{1s,A}(1) | \frac{-1}{r_{1B}} | \phi_{1s,A}(1) \rangle \\
k(R) &= \langle \phi_{1s,A}(1) | \frac{-1}{r_{1B}} | \phi_{1s,B}(1) \rangle \\
J(R) &= \langle \phi_{1s,A}(1)\phi_{1s,B}(2) | \frac{1}{r_{1,2}} | \phi_{1s,A}(1)\phi_{1s,B}(2) \rangle \\
K(R) &= \langle \phi_{1s,A}(1)\phi_{1s,B}(2) | \frac{1}{r_{1,2}} | \phi_{1s,B}(1)\phi_{1s,A}(2) \rangle.
\end{aligned}$$

Met het script `voorbeeld2.m` (zie uitleg bij Opdracht 2) kun je alle benodigde integralen als functie van $R$ uitrekenen.

**Opgave 3.1** *Bereken en plot de potentiaalcurve voor dit valence bond model van* $H_2$.

**Opgave 3.2** *Als we vergeten zouden hebben om de golffunctie (anti)symmetrisch te maken*

$$\Psi'(1,2) = \phi_{1s,A}(1)\phi_{1s,B}(2),$$

*dan was de bindingsenergie*

$$\Delta E = P(R)$$

*Hoe zou de interactiepotentiaal er dan uit gezien hebben? Plot het resultaat in dezelfde figuur om beter te kunnen vergelijken. Welke integralen zijn vooral bepalend voor de binding in* $H_2$*?*

**Opgave 3.3** *(Als je tijd over hebt). Bepaal de potentiaalcurve voor de eerste aangeslagen (triplet) toestand*

$$\Psi_(1,2) = \phi_{1s,A}(1)\phi_{1s,B}(2) - \phi_{1s,B}(1)\phi_{1s,A}(2)$$

*met bindingsenergie*

$$\Delta E = \frac{P(R) - Q(R)}{1 - S(R)^2}.$$