

Chemische binding I, Opdracht 4

24 september 2003

4 Gaussische basis functies

Het $1s$ orbitaal voor het H atoom is gegeven door

$$\phi_{1s,H}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r} \quad (1)$$

waarbij $\mathbf{r} \equiv (x, y, z)$ en $r = |\mathbf{r}|$. Bij berekeningen aan moleculen blijkt dat integralen waar dit soort exponentiële functies in voorkomen heel moeilijk zijn. Integralen waar zogenaamde Gaussische orbitalen in voorkomen:

$$g_{s,\alpha}(\mathbf{r}) = N_i e^{-\alpha r^2} \quad (2)$$

$$N_i = \left(\frac{2\alpha}{\pi} \right)^{\frac{3}{4}} \quad (3)$$

zijn beter te doen. Daarom proberen we nu het H-atoom met variatie rekening te benaderen in een basis van Gaussische functies.

Om deze opgave te maken heb je een aantal MATLAB routines nodig. Koppel eerst de benodigde disk aan met:

```
Windows explorer
  Tools
    Map Network Drive
      I:
        \\stut\gaussian
```

Geef nu in MATLAB het commando:

```
>> addpath('i:\cursus\matlab')
```

In deze directory staat o.a. het Matlab script `voorbeeld1.m` waarmee een variationele berekening voor het H-atoom in een basis van twee Gaussische orbitalen kan worden uitgevoerd. In dit script kun je ook zien hoe je de golffunctie kunt plotten.

Opgave 4.1 *Bestudeer voorbeeld1 regel voor regel en voer het uit. Je hoeft niet alle hulp-functies in detail te bekijken. Schrijf nu een MATLAB script om de optimale exponent te bepalen om de energie van het H-atoom uit te rekenen in een basis bestaande uit één Gaussian. Welke energie vind je? Voldoet dit antwoord aan het variatie-principe?*

Opgave 4.2 *(Maak deze opgave als je tijd over hebt). Maak een goede basis voor het H-atoom bestaande uit een aantal Gaussische basis functies. Je kunt dit het beste doen door met twee basis functies te beginnen en verschillende exponenten te proberen. Door naar een plot van de golffunctie te kijken kun je een idee krijgen in welk gebied een Gaussian met een bepaalde exponent het meeste bijdraagt.*