

Chemische binding I, Opdracht 7

24 september 2003

7 Slater determinanten

Voor een systeem van 3 elektronen in 3 verschillende ruimte-orbitalen, ϕ_1 , ϕ_2 , en ϕ_3 , bekijken we de volgende twee golffuncties

$$\Psi_I = 2|\phi_1\phi_2\bar{\phi}_3| - |\phi_1\bar{\phi}_2\phi_3| - |\bar{\phi}_1\phi_2\phi_3| \quad (1)$$

$$\Psi_{II} = |\phi_1\bar{\phi}_2\phi_3| - |\bar{\phi}_1\phi_2\phi_3| \quad (2)$$

Opgave 7.1 Vereenvoudig deze golffuncties zover mogelijk voor het geval dat $\phi_1 \equiv \phi_2$ (zonder de determinanten uit te schrijven). Wat is de spin-multipliciteit ($2S + 1$) van de gevonden golffuncties?

Gegeven is de valence bond golffunctie voor de grondtoestand van H_2 :

$$\Psi^{VB} = N (|\phi_a\bar{\phi}_b| - |\bar{\phi}_a\phi_b|) \quad (3)$$

waarbij ϕ_a en ϕ_b de 1s orbitalen van de H atomen zijn.

Opgave 7.2 Schrijf ϕ_a en ϕ_b als lineaire combinaties van de bindende en anti-bindende MOs (σ en σ^*) voor het geval dat de overlap tussen ϕ_a en ϕ_b verwaarloosd mag worden.

De VB functies is om te schrijven als MO+CI golffunctie:

$$\Psi^{VB} = c_1|\sigma\bar{\sigma}| + c_2|\sigma^*\bar{\sigma}^*| + c_3 (|\sigma\bar{\sigma}^*| - |\bar{\sigma}\sigma^*|) \quad (4)$$

Opgave 7.3 Bereken c_1 , c_2 en c_3 door de uitdrukkingen voor ϕ_a en ϕ_b uit de vorige opgave in te vullen in vergelijking 3.