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

$$\Psi_I = 2|\phi_1\phi_2\overline{\phi_3}| - |\phi_1\overline{\phi_2}\phi_3| - |\overline{\phi_1}\phi_2\phi_3| \tag{1}$$

$$\Psi_{II} = |\phi_1\overline{\phi_2}\phi_3| - |\overline{\phi_1}\phi_2\phi_3| \tag{2}$$

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:

$$\Psi^{\mathrm{VB}} = N\left(|\phi_a\overline{\phi_b}| - |\overline{\phi_a}\phi_b|\right) \tag{3}$$

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:

$$\Psi^{\mathrm{VB}} = c_1|\sigma\overline{\sigma}| + c_2|\sigma^*\overline{\sigma^*}| + c_3\left(|\sigma\overline{\sigma^*}| - |\overline{\sigma}\sigma^*|\right) \tag{4}$$

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.*