Chemische binding I, Opdracht 8

24 september 2003

8 MO berekening voor LiH

Opgave 8.1 *Bereken de orbital energieën van de hoogste bezette molecular orbital (HOMO - highest occupied MO) en van de laagste onbezette molecular orbital (LUMO - lowest unoccupied MO) van LiH. Om de berekening "op papier" uit te kunnen voeren laten we de twee Li 1s elektronen buiten beschouwing. Voor Li houden we dus alleen rekening met het 2s valentie elektron.*

Aanwijzingen: gebruik de volgende notatie voor de matrix elementen van de effectieve één elektron hamiltoniaan en de overlap integraal:

$$\langle \phi_{2s,Li} | \hat{h}_{eff} | \phi_{2s,Li} \rangle = \alpha_1 \tag{1}$$
$$\langle \phi_{1s,H} | \hat{h}_{eff} | \phi_{1s,H} \rangle = \alpha_2 \tag{2}$$
$$\langle \phi_{2s,Li} | \hat{h}_{eff} | \phi_{1s,H} \rangle = \beta \tag{3}$$
$$\langle \phi_{2s,Li} | \phi_{1s,H} \rangle = S. \tag{4}$$

Neem aan dat de atomic orbitals genormeerd zijn. Vul pas op het laatst de volgende waarden in voor een bindingsafstand van 3 a_0.

$$\alpha_1 = -0.26 E_h \tag{5}$$
$$\alpha_2 = -0.17 E_h \tag{6}$$
$$\beta = -0.29 E_h \tag{7}$$
$$S = 0.40 \tag{8}$$

Opmerking: dit voorbeeld is niet geconstrueerd om mooie ronde getallen te geven, rond af op 4 cijfers.

Opgave 8.2 *Bereken de bijbehorende MOs. Vul opnieuw pas in de laatste stap de getallen in.*

Opgave 8.3 *Schrijf een (benaderde) vier-elektronengolffunctie op voor de grondtoestand van LiH in termen van de $\phi_{1s,Li}$ en de eerder gevonden MOs.*