

integralen mag verwaarlozen waarin zowel een AO van H als een AO van F in voorkomt. Gebruik verder:

$$\langle 1s_F | \hat{z} | 2p_{z,F} \rangle = 0 \quad (1)$$

$$\langle 2s_F | \hat{z} | 2p_{z,F} \rangle = 2.5 \quad (2)$$

Omrekeningsfactoren: 1 Angstrom = 1.8897 a_0 , 1 Debye = 2.54158 a.u.

Opgave 3.7 Optimaliseer de geometrie van H_2O in een HF/STO-3G berekening.

Opgave 3.8 Maak symmetrie-aangepaste lineaire combinaties van AOs voor water in de lineaire geometrie. Geef aan of de SALCs σ of π en g(erade) of u(ngerade) zijn (dus: $\sigma_g, \sigma_u, \pi_g, \pi_u$).

Opgave 3.9 Voer een single-point (HF/STO-3G) berekening uit voor H_2O in de lineaire geometrie. Kies de O-H afstand gelijk aan de eerder gevonden waarde. Hoeveel eV kost het om water lineair te maken (1 Hartree = 27.21 eV)?

Opgave 3.10 Schets een Walsch-diagram voor water of maak een plot met Matlab, waarbij je de bindingshoek in een paar stappen varieert van 180° tot 90° .