Chemische binding II, Opdracht 3

12 november 2003

3 Hybride orbitalen, Gaussian, dipoolmomenten en water

Opgave 3.1 *Maak twee sp hybride orbitals die in de positieve, respectievelijk de negatieve z-as wijzen. Zorg ervoor dat de orbitals genormeerd en onderling orthogonaal zijn.*

Opgave 3.2 *Maak drie sp^2 hybride orbitals waarvan er één langs de positieve x-as ligt en de andere twee in het xy-vlak met onderlinge hoeken van 120°. Maak opnieuw de orbitalen orthonormaal. Leg uit hoe orbitalen orthogonaal kunnen zijn terwijl ze een hoek van 120° maken.*

Opgave 3.3 *Beschouw een hypothetische (niet-stationaire) toestand van het waterstof atoom waarbij het elektron zich in een sp^2 hybride orbital bevindt dat in de richting $(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\sqrt{3}, 0)$ wijst. Bereken de verwachtingwaarden van de drie componenten van de dipool-operator voor deze toestand. Vermeld welke symmetrie operatoren je gebruikt hebt om vast te stellen dat bepaalde integralen nul zijn. Als het goed is komt in je eindantwoord één onbekende integraal voor. Is deze positief of negatief?*

Opgave 3.4 *Werk rustig de uitgedeelde Gaussian-98 instructie door en speel met het programma tot je vertrouwd bent met het interface. Opmerking: het programma verstopt sommige files in* `C:\TEMP`.

Opgave 3.5 *Bereken de bindingsafstand en het dipoolmoment van HF in een Hartree-Fock berekening met een STO-3G basis. Gebruik bij deze opgave het "pop=full"keyword om de MOs in de uitvoer te zien te krijgen.*

Opgave 3.6 *Bekijk de MO coefficiënten in de uitvoer van de vorige berekening. Welke MO is volgens deze berekening de belangrijkste bindende MO? Maak een twee-elektron model van HF (d.w.z., schrijf een twee-elektronen golffunctie op voor HF), waarbij je alleen rekening houdt met deze bindende MO. Bereken het dipool moment van HF volgens dit model, waarbij je alle* *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°.*