

Tentamen Quantum Mechanica en Chemische Binding 2

25 augustus 2006, 14:00-17:00 uur, G. C. Groenenboom

Vraagstuk 1: De Born-Oppenheimer benadering

We beschouwen de eerste stap van de Born-Oppenheimer benadering voor de beschrijving van de grondtoestand van het H_2^+ molecuul-ion.

- 1a. Geef de elektronische Hamiltoniaan van H_2^+ in atomic units en definieer al je symbolen.
- 1b. Geef de elektronische Schrödinger vergelijking voor H_2^+ en leg uit hoe door het oplossen van deze vergelijking de evenwichts-afstand tussen de H-kernen gevonden kan worden.
- 1c. Stel dat de berekening wordt herhaald voor D_2^+ (D=deuterium). Wordt er dan een grotere, kleinere, of dezelfde evenwichts-afstand gevonden? Leg uit.

Vraagstuk 2: Variationele berekening van HeH^+

Gegeven is een AO basis $\{\phi_{1s,\text{He}}, \phi_{1s,\text{H}}\}$. De AO's zijn genormeerd en de overlap $\langle \phi_{1s,\text{He}} | \phi_{1s,\text{H}} \rangle = \frac{1}{2}$.

- 2a. Geef de valence bond VB golf functie Ψ_{cov} die de covalente binding in het HeH^+ ion beschrijft. Schrijf de functie als produkt van baan en spin gedeelte en normeer de functie.
- 2b. Welke twee ionogene VB functies Ψ_1 en Ψ_2 kun je met deze AO basis maken. Geef ook hier baan en spin gedeelte en normeer de functies.
- 2c. Welke van deze twee ionogene functies zal de grootste bijdrage leveren aan de grondtoestandsgolf functie van HeH^+ ? Geef een korte toelichting.
- 2d. Geef de seculiere vergelijkingen voor een variationele berekening met de covalente VB functie en de belangrijkste ionogene functie. Werk de benodigde matrix elementen uit, voor zover als mogelijk met de gegevens uit deze opgave.
- 2e. Leid een formule af voor de variationele benadering van de grondtoestands-energie. Geef de energie in termen van de matrix-elementen die je in het vorige onderdeel gedefinieerd hebt.