Computer practikum QCB III, Opdracht 3

2008

3 Valence bond model voor H_2

In opgave 5 van het Werkcollege QCB II hebben we de elektronische Hamiltoniaan (H) van het H_2 molecuul opgeschreven en de verwachtingswaarde hiervan over de (niet genormeerde) valence bond golffunctie

$$\Psi_+(1,2) = \phi_{1s,A}(1)\phi_{1s,B}(2) + \phi_{1s,B}(1)\phi_{1s,A}(2)$$

uitgewerkt. Het resultaat voor de bindingsenergie was

$$\Delta E = \frac{P(R) + Q(R)}{1 + S(R)^2}.$$

De overlap integraal $S(R)$, de Coulomb integraal $P(R)$ en de exchange integraal $Q(R)$ zijn als volgt gedefinieerd

$$\begin{aligned} S(R) &= \langle \phi_{1s,A} | \phi_{1s,B} \rangle \\ P(R) &= \frac{1}{R} + 2j(R) + J(R) \\ Q(R) &= \frac{S(R)^2}{R} + 2S(R)k(R) + K(R) \end{aligned}$$

en de in $P(R)$ en $Q(R)$ voorkomende integralen zijn

$$\begin{aligned} j(R) &= \langle \phi_{1s,A}(1) | \frac{-1}{r_{1B}} | \phi_{1s,A}(1) \rangle \\ k(R) &= \langle \phi_{1s,A}(1) | \frac{-1}{r_{1B}} | \phi_{1s,B}(1) \rangle \\ J(R) &= \langle \phi_{1s,A}(1)\phi_{1s,B}(2) | \frac{1}{r_{1,2}} | \phi_{1s,A}(1)\phi_{1s,B}(2) \rangle \\ K(R) &= \langle \phi_{1s,A}(1)\phi_{1s,B}(2) | \frac{1}{r_{1,2}} | \phi_{1s,B}(1)\phi_{1s,A}(2) \rangle. \end{aligned}$$

Met het script `voorbeeld2.m` (zie uitleg bij Opdracht 2) kun je alle benodigde integralen als functie van R uitrekenen.

Opgave 3.1 *Bereken en plot de potentiaalcurve voor dit valence bond model van H_2.*

Opgave 3.2 *Als we vergeten zouden hebben om de golffunctie (anti)symmetrisch te maken*

$$\Psi'(1,2) = \phi_{1s,A}(1)\phi_{1s,B}(2),$$

dan was de bindingsenergie

$$\Delta E = P(R)$$

Hoe zou de interactiepotentiaal er dan uit gezien hebben? Plot het resultaat in dezelfde figuur om beter te kunnen vergelijken. Welke integralen zijn vooral bepalend voor de binding in H_2?

Opgave 3.3 *(Als je tijd over hebt). Bepaal de potentiaalcurve voor de eerste aangeslagen (triplet) toestand*

$$\Psi_(1,2) = \phi_{1s,A}(1)\phi_{1s,B}(2) - \phi_{1s,B}(1)\phi_{1s,A}(2)$$

met bindingsenergie

$$\Delta E = \frac{P(R) - Q(R)}{1 - S(R)^2}.$$