

# Werkcollege Quantum Mechanica en Chemische Binding III

week 1, 2008

## Opgave 10

De kernen A en B van een twee-atomig molecuul A-B liggen op de  $z$ -as. We nemen een atomaire  $s$ -orbital op kern A:  $s_A$ , en een atomaire  $p_x$  orbital op kern B:  $p_{x_B}$ .

**Opgave 10.1** Laat zien dat de atomaire orbital  $p_{x_B} \equiv p_x(\vec{r} - \vec{R}_B)$  oneven is onder spiegeling ten opzichte van het  $yz$ -vlak. Deze spiegeling correspondeert met de coördinaat-transformatie  $(x, y, z) \rightarrow (-x, y, z)$ . Een  $p_x$  orbitaal in de oorsprong wordt gegeven door:

$$p_x(x, y, z) = xre^{-r/2} \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}, \quad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}.$$

**Opgave 10.2** Bewijs voor de overlapintegraal dat

$$\langle s_A | p_{x_B} \rangle = \int s(\vec{r} - \vec{R}_A) p_x(\vec{r} - \vec{R}_B) d\vec{r} = 0.$$

Aanwijzing: verdeel de ruimte in twee delen met  $x \geq 0$  en  $x < 0$  en laat zien door middel van een geschikte coördinaat-transformatie dat de integralen over deze twee delen tegen elkaar wegvallen

## Opgave 11

Toon aan met behulp van MO-schema's dat:

**Opgave 11.1** Het molecuul-ion  $\text{He}_2^+$  ongeveer even sterk gebonden is als het molecuul-ion  $\text{H}_2^+$ . Wat is de bond order?

**Opgave 11.2** Tussen een  $1s2s$  aangeslagen He atoom en een He atoom in de  $1s^2$  grondtoestand een chemische binding gevormd kan worden. Wat is de bond order? Waarom is dit molecuul metastabiel?

**Opgave 11.3** Het molecuul-ion  $N_2^+$  minder sterk gebonden is dan het neutrale molecuul  $N_2$ , terwijl het molecuul-ion  $O_2^+$  juist sterker gebonden is dan het neutrale  $O_2$  molecuul. Wat zijn de bond orders?