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 He_2^+ ongeveer even sterk gebonden is als het molecuul-ion 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?