

## כימיה קוונטית – תרגיל מס' 2

1. עבור טיפול של בסיס מינימאלי למולקולת  $H_2$ , הראו כי האורביטאלות המולקולאריות המרחביות הינן אורתונורמאליות.

2. בסיס מינימאלי עבור מולקולת בנזן מכיל 72 ספין אורביטלות אטומיות.

- א. הסבירו מדוע.
- ב. מהי גודל מטריצה ה-CI בבסיס זה עבור מולקולת הבנזן?
- ג. כמה דטרמיננטות בעירור יחיד קיימות?
- ד. כמה דטרמיננטות בעירור כפול קיימות?

3. הראו כי מטריצת CI עבור בסיס מינימאלי של מולקולת המימן ניתנת ע"י:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \langle 1|\hat{h}|1\rangle + \langle 2|\hat{h}|2\rangle + \langle 12|12\rangle - \langle 12|21\rangle & \langle 12|34\rangle - \langle 12|43\rangle \\ \langle 34|12\rangle - \langle 34|21\rangle & \langle 3|\hat{h}|3\rangle + \langle 4|\hat{h}|4\rangle + \langle 34|34\rangle - \langle 34|43\rangle \end{pmatrix}$$

רמז: אחד מאלמנטי המטריצה פותח בכיתה ומספיק להוכיח לאלמנט נוסף יחיד.

4. השתמשו בהגדרת הדטרמיננטה:

$$|k\rangle = |\chi_a \chi_b \dots \chi_n \chi_m \dots \chi_k\rangle = (N!)^{-1/2} \sum_{i=1}^{N!} (-1)^{p_i} \hat{p}_i \{ \chi_a(1) \chi_b(2) \dots \chi_n(F) \chi_m(G) \dots \chi_k(N) \}$$

$$\langle k|\hat{O}_2|k\rangle = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle ij||ij\rangle \quad \text{בכדי להראות כי מתקיים:}$$

$$\hat{O}_2 = \sum_{n=1}^N \sum_{m<n} \frac{1}{r_{nm}} \quad \text{כאשר:}$$

$$\frac{N(N-1)}{2} \quad \text{זכרו כי מס' זוגות האלקטרונים במערכת N אלקטרונית הינו}$$