

### כימיה קוונטית – תרגיל מס' 3

1. המירו את הביטוי עבור האנרגיה של הספין אורביטלות

$$\varepsilon_i = \langle \chi_i | h | \chi_i \rangle + \sum_{b=1}^N \langle \chi_i \chi_b | | \chi_i \chi_b \rangle$$

לביטוי עבור מערכת קליפה סגורה במונחים של האורביטלות המרחביות המולקולאריות (משוואה 363):

$$\varepsilon_i = (\psi_i | \hat{h} | \psi_i) + \sum_{b=1}^{N/2} 2(ii | bb) - (ib | bi) = h_{ii} + \sum_{b=1}^{N/2} 2J_{ib} - K_{ib}$$

2. הוכיחו את משוואה (394) מרשומות הכיתה.

3. הוכיחו את משוואה (397) ברשומות הכיתה.

4. הוכיחו כי מתקיים  $N = tr(\hat{P}\hat{S})$  (משוואה 406 ברשומות הכיתה) כאשר N הוא מספר

האלקטרונים במערכת.  $\hat{P}$  מטריצת הצפיפות ו- $\hat{S}$  מטריצת החפיפה.

5. אופרטור הצפיפות מוגדר ע"י  $\hat{\rho}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\vec{r}_i - \vec{r})$ . השתמשו בכללים לחישוב אלמנטי

מטריצה סביב דטרמיננטות סלייטר ובכללי ההמרה מהצגה ספין אורביטלית להצגה של אורביטלות מרחביות בכדי להראות כי מתקיים (משוואה 374):

$$\rho(\vec{r}) = \langle \psi_0 | \hat{\rho}(\vec{r}) | \psi_0 \rangle = 2 \sum_{a=1}^{N/2} |\psi_a(\vec{r})|^2$$