

תרגיל בית מספר 11

1. באופן כללי, ניתן לכתוב את אינטגרל החפיפה באופן $S_{jk} = \langle \psi_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) | \psi_k(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k) \rangle$.

- (א) הסבירו את הנוטציה. מה יהיה הווקטור \mathbf{R} המחבר בין הגרעינים?
 (ב) מהי הסיבה לכך שהאינטגרל לא נותן תמיד δ_{jk} , כפי שקיבלנו בעבר?
 (ג) פרשו את S_{jk} . מה ערכיו המינימליים והמקסימליים? מה מבטא S_{jk} קטן או גדול?
 (ד) רשמו את אינטגרל החפיפה באופן מפורש כפונקציה של \mathbf{R} עבור אורביטל $1s$ באטום מימן ואורביטל $2p_z$ באטום ליתיום: יש לכתוב את פונקציות הגל באופן מלא, אך אין צורך לבצע את האינטגרציה עצמה.

2. ביטוי פשוט המשמש לעיתים קרובות לתיאור משטל הפוטנציאל בין גרעינים בקירוב בורן-אופנהיימר הוא פוטנציאל לנרד-ג'ונס (Lennard-Jones):

$$V(R) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right].$$

- (א) מהו מרחק שיווי המשקל בין הגרעינים תחת פוטנציאל זה?
 (ב) מהי אנרגיית הדיסוציאציה בהזנחת אנרגיית מצב היסוד הוויברציוני?
 (ג) קרבו את $V(R)$ בעזרת טור טיילור מסדר שני סביב מרחק שיווי-המשקל ומצאו את תדירות הוויברציה באנרגיות נמוכות.
 (ד) מהי אנרגיית מצב היסוד הוויברציונית בקירוב הרמוני, ומהי אנרגיית הדיסוציאציה של המולקולה בהתחשב במצב היסוד הוויברציוני?

3. בקירוב LCAO עבור H_2^+ ניתן לפתור אנליטית את אינטגרל החפיפה בין שני מצבי יסוד ולהגיע לביטוי

$$S(R) = \left(1 + \frac{R}{a_0} + \frac{R^2}{3a_0^2} \right) e^{-\frac{R}{a_0}}.$$

- (א) מה מסמל R בביטוי הזה?
 (ב) עבור אילו ערכים של R מתקבל S מינימלי ומקסימלי? הסבירו.
 (ג) מהי מידת החפיפה כאשר המרחק בין הגרעינים הוא $3a_0$?