

כימיה קוונטית תשס"ט – תרגיל מספר 8

(להגשה ב-07.01.10)

1. מולקולת המימן - אורביטלים מולקולאריים

א. כתבו את חמשת האורביטלים 3d של אטום המימן בצורתם כפונקציות ממשיות.

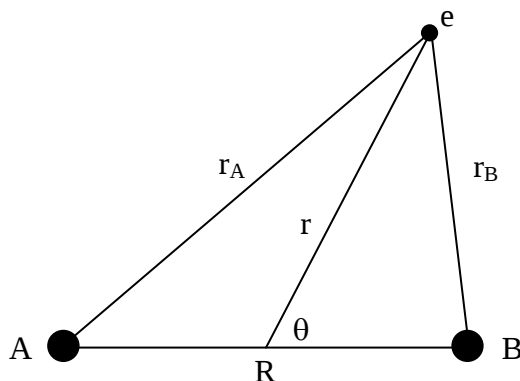
ב. כתבו את האורביטלים המוליקולריים המתקבלים מאורביטלי 3d במוליקולת המימן. סווגו אורביטלים אלה לפי הסימטריה.

2. האורביטל המולקולרי המעורר הראשון של מולקולת H_2^+ ניתן בקירוב ע"י

$$\phi = \frac{1s_a - 1s_b}{\sqrt{2(1-S)}}$$

כאשר $1s_a = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} e^{-\alpha r_a / a_0}$, $S = \langle 1s_a | 1s_b \rangle = e^{-\alpha R / a_0} \left(1 + \frac{\alpha R}{a_0} + \frac{\alpha^2 R^2}{3a_0^2}\right)$, R הוא

המרחק בין שני הגרעינים, ו- a_0 הוא רדיוס בוהר. מצאו את צורת האורביטל כאשר $R \rightarrow 0$. לאיזה אורביטל אטומי הוא דומה בגבול? (כאשר $R \rightarrow 0$, r_a, r_b שואפים ל- r). לנוחותכם, הניחו $a_0 = 1$.



3. Valence Bond approximation

א. הראו שאנרגיית מצב היסוד של מוליקולת המימן בקירוב VB נתונה

$$E = 2E_H + \frac{J+K}{1+S^2}$$

כאשר:

$$J = \langle 1s_A 1s_B | \Delta H | 1s_A 1s_B \rangle \quad K = \langle 1s_A 1s_B | \Delta H | 1s_B 1s_A \rangle \quad S = \langle 1s_A | 1s_B \rangle \quad \Delta H = -\frac{e^2}{r_{1B}} - \frac{e^2}{r_{2A}} + \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{r_{AB}}$$

ו- E_H היא אנרגיית אטום מימן.

ב. למה שואף ביטוי זה כאשר $R \rightarrow \infty$?