

## Aufgabenblatt 3: Theoretische Chemie I (Molecular Modeling)

1. Schreiben Sie die einfach angeregte Singulett Wellenfunktion von  $H_2$  für den Hartree und den HF Ansatz auf.
2. Berechnen Sie die Elektronendichte für den ersten angeregten HF-Singulettzustand:

$$\rho(r_1) = 2 \int |\Psi_3(r_1, r_2)|^2 dr_2$$

(die MO's sind orthogonal!)

3. Ist  $K_{22}$  gleich oder ungleich 0?
4. Die Bindungsenergiekurve, die wir für  $H_2^*$  diskutiert haben, ist qualitativ auch für  $H_2$  zu finden. Erklären Sie, warum für grosse Bindungsabstände die CI Koeffizienten in etwa gleich groß sind, während  $C_2$  für kleine Abstände sehr viel kleiner als  $C_1$  ist.
5. Ein Molekül besitze drei MO's  $\phi_1$ ,  $\phi_2$  und  $\phi_3$  und zwei Elektronen die im obersten und untersten Orbital sind. Schreiben Sie für den Singulett und Triplett Zustand die Energie auf. Wie sieht die HF Determinante aus? (Spinindikatoren weglassen!)
6. Berechnen Sie mit dem Ansatz

$$\Psi_1(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \det \begin{pmatrix} \phi_1(r_1)\alpha(1) & \phi_1(r_1)\beta(1) \\ \phi_1(r_2)\alpha(2) & \phi_1(r_2)\beta(2) \end{pmatrix}$$

den Erwartungswert für den Operator der kinetischen Energie  $\hat{T}$ . Berechnen Sie dazu:

$$\int \Psi_1^*(r_1, r_2) \left( - \sum_{i=1}^2 \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i \right) \Psi_1(r_1, r_2) dr_1 dr_2$$