**Kvantová chemie, domácí cvičení 11**

**Jméno a příjmení**:

1. Odvoďte normalizační konstantu pro dvou-elektronový Slaterův determinant (dále jen SD) složený z ortonormálních molekulových orbitalů a (uveďte všechny mezikroky!). Na základě vašeho odvození zkuste vlastními slovy zdůvodnit obecný normalizační faktor .

Následující 2 úlohy se budou týkat HF výpočtu molekuly vodíku v minimální bázi. Báze atomových orbitalů bude složena ze dvou normalizovaných atomových 1s orbitalů a , kde je AO na atomovém jádře *i*. Prostorové části molekulové orbitalů mají tvar (vazebný orbital) a (antivazebný orbital), kde a  jsou normalizační faktory.

1. Odvoďte normalizační faktory pro molekulové orbitaly a za předpokladu, že (nespecifikovaná konstanta). Vytvořte matici ***S***, kde .
2. Vypište všechny možné SD v této minimální bázi pro metodu CISD.
3. Vypočítejte počet Slaterových determinantů, které je možno získat mono- a di- excitací základního stavu molekuly HF v bázi 6-31g\* (tj. rozvíjíme do báze 16 AO). Důkladně odůvodněte svůj postup.
4. \*\*\*Bonus\*\*\* Odvoďte, že součin Gaussiánů , je opět Gaussián. je poloha daného Gaussiánu. Jaká bude poloha nově vzniklého Gaussiánu? *Nápověda*: vzpomeňte si na základní školu a techniku doplnění na čtverec.)