**Kvantová chemie, domácí cvičení 12**

**Jméno a příjmení**:

1. Ukažte, že disociace molekuly vodíku na dva vodíkové radikály je dobře popsána lineární kombinací dvou Slaterových determinantů. První Slaterův determinant získáte dvojnásobným obsazením vazebného MO: (nezapomeňte, že v *SD* vystupují spinorbitaly!). Druhý Slaterův determinant získáte dvojnásobným obsazením antivazebného MO .

Výsledná vlnová funkce, která dobře vystihne disociaci, má tvar:

*Nápověda* 1: Je třeba ukázat, že se pro takovouto vln. funkci vyruší iontové příspěvky.

*Nápověda* 2: Pro nekonečně vzdálené atomy bude . Víte proč?

(*Nápověda* 2.1: Tvar a jste si již odvodili v předchozím domácím úkolu.).

1. Odvoďte, že pro elektronovou hustotu platí:

a)

b)

*Nápověda*: Vše plyne přímo z definice . Pořádně si ji rozmyslete!