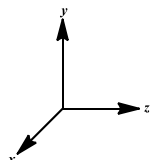


Úkol č. 2.1

Do souřadného systému znázorněte izoplochy příslušející atomovým orbitalům s , p , a d . Jaká je degenerace těchto orbitalů, nejsou-li ve vázaném stavu?



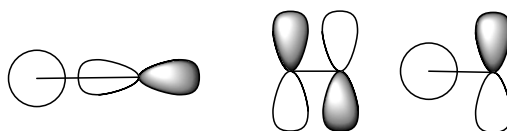
Úkol č. 2.2

Atomové orbitály (AO) se překrývají za vzniku orbitalů molekulových (MO). Tento přístup je označován jako MO-LCAO. Rozhodujícími faktory pro tzv. orbitální interakci je rozdíl energií výchozích AO a velikost překryvu S , který je dán mj. symetrií. Pro celkový příspěvek ke stabilizaci nebo destabilizaci molekuly hraje roli i počet zúčastněných elektronů. Znázorněte následující:

- interakci dvou identických orbitalů s na různých centrech. Jaké MO vzniknou? Určete jejich symetrii (S nebo AS) vůči středové souměrnosti se středem v centru vazby. Přiřaďte také správné nálepky symetrie ($\sigma_g, \sigma_u, \pi_g, \pi_u$)
- interakci orbitalu s na jednom centru a orbitalu p na druhém centru, tak aby laloky orbitalu p ležely na spojnici jader. Jaké MO vzniknou? Určete jejich symetrii (σ nebo π).
- interakci dvou identických orbitalů p na různých centrech, tak aby laloky obou orbitalů p ležely na spojnici jader. Jaké MO vzniknou? Určete jejich symetrii (S nebo AS) vůči středové souměrnosti se středem v centru vazby. Přiřaďte také správné nálepky symetrie ($\sigma_g, \sigma_u, \pi_g, \pi_u$)
- interakci jako v bodě c) s tím rozdílem, že laloky obou orbitalů p jsou lokalizovány kolmo ke spojnici jader. Jaké MO vzniknou? Určete jejich symetrii podobně jako v bodě c).

Úkol č. 2.3

Určete, v jakém případě se jedná o kladný ($S > 0$), záporný ($S < 0$), případně nulový překryv ($S = 0$).



Úkol č. 2.4

- Načrtněte interakční diagram MO pro molekulu H_2 . Jaké MO vzniknou a jaký bude jejich počet? Doplňte příslušný počet elektronů, napište elektronovou konfiguraci, vypočtěte řád vazby.
- S využitím předchozího úkolu a) vytvořte z molekuly kation H_2^+ a anion H_2^- . Zapište příslušné elektronové konfigurace a vypočtěte řady vazby. Jak se budou měnit vazebné délky a disociační energie?

Úkol č. 2.5 (domácí)

Obdobně interpretujte případ molekuly He_2^+ .

Seminární cvičení č. 2 C3150 Základy fyzikální chemie – seminář

Úkol č. 2.6

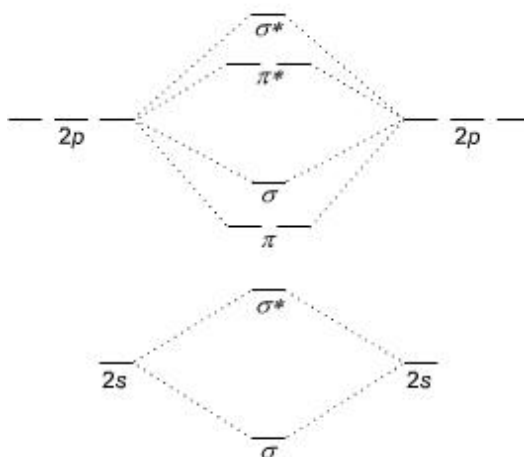
Načrtněte interakční diagram MO pro molekulu O_2 . Vyznačte hraniční orbitály (HOMO/LUMO). Vypočtěte spinovou multiplicitu. Jak se budou měnit elektronové konfigurace, řády vazeb, vazebné délky a disociační energie, vytvoříme-li postupně O_2^+ , O_2^- ? Molekula O_2 oplývá jednou krásnou vlastností (týkající se magnetismu). Kterou?

(Pozn. Interakční diagram je kvalitativně shodný s F_2 a Ne_2)

Úkol č. 2.7

Na obrázku je znázorněn interakční diagram MO pro molekulu C_2 . Doplňte symetrické nálepky a počet elektronů. Vyznačte hraniční orbitály (HOMO/LUMO). Lze očekávat větší prodloužení vazby v případě excitace z HOMO do LUMO, nebo z HOMO ještě o hladinu výš?

(Pozn. Interakční diagram je kvalitativně shodný s Li_2 a N_2)



Úkol č. 2.8

Na obrázku je znázorněn interakční diagram MO pro molekulu NO. Doplňte elektrony. Vysvětlete, proč je tato molekula v základním stavu radikál? Vypočtěte spinovou multiplicitu. Jak se změní vazebná délka a disociační energie, vytvoříme-li kation a anion?

