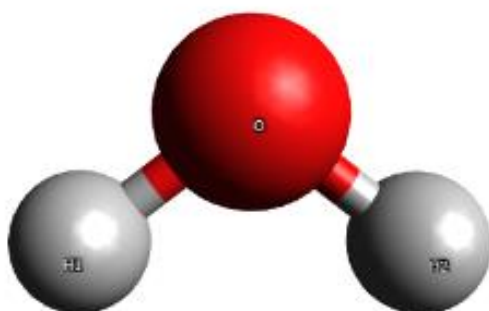


SYMETRIE MOLEKUL – Pokračování - Řešení

Úkol č. 7. 1

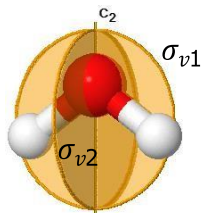
Najděte všechny prvky symetrie v molekule vody a rozhodněte, zda jsou vůči nim symetrické (S) nebo antisymetrické (AS) valenční AO kyslíku, orbitály vzniklé kombinací AO vodíků a určete, které valenční orbitály kyslíku lze kombinovat s orbitály vzniklými kombinací AO vodíků.

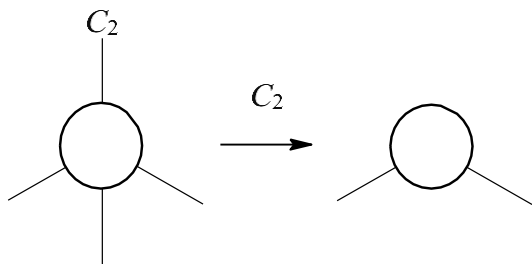


Řešení:

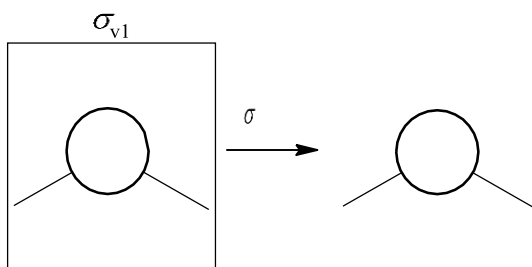
prvky symetrie v molekule vody:

Celá molekula - identita E , 1 dvoučetná rotační osa symetrie C_2 – rotace o 180° , 2 vertikální roviny symetrie $\sigma_{v1}(yz)$ a $\sigma_{v2}(xz)$

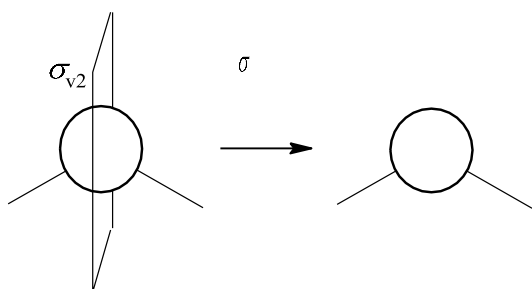




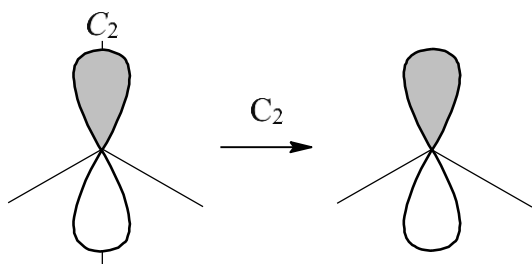
orbital 2s kyslíku symetrický vůči C_2



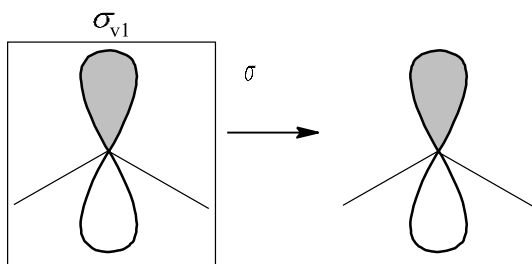
orbital 2s kyslíku symetrický vůči σ_{v1}



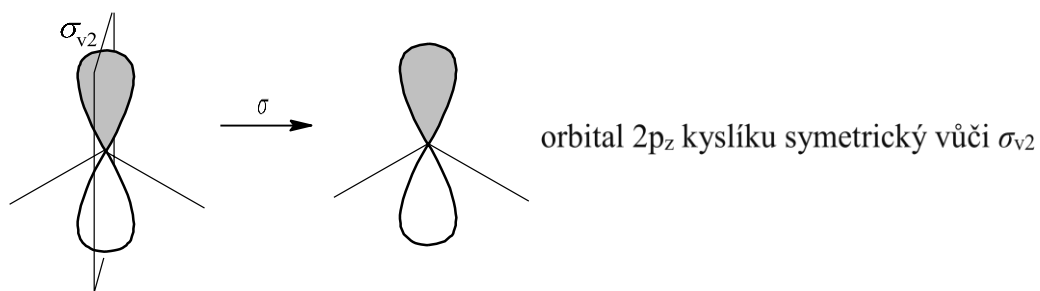
orbital 2s kyslíku symetrický vůči σ_{v2}

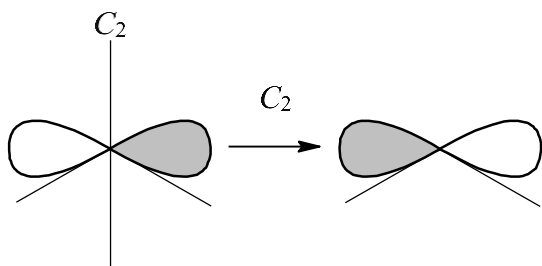


orbital $2p_z$ kyslíku symetrický vůči C_2

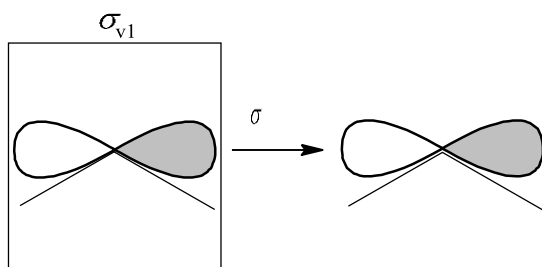


orbital $2p_z$ kyslíku symetrický vůči σ_{v1}

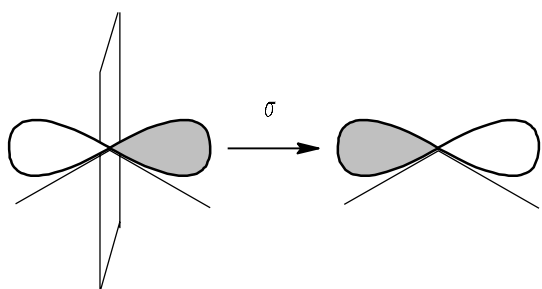




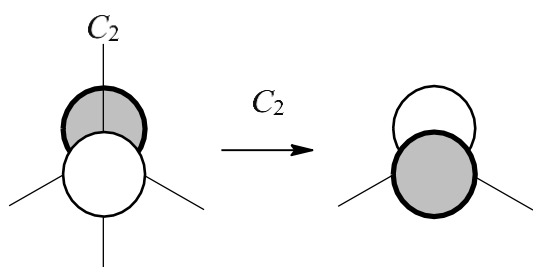
orbital $2p_y$ kyslíku antisymetrický vůči C_2



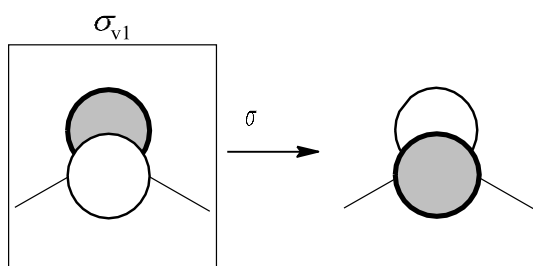
orbital $2p_y$ kyslíku symetrický vůči σ_{v1}



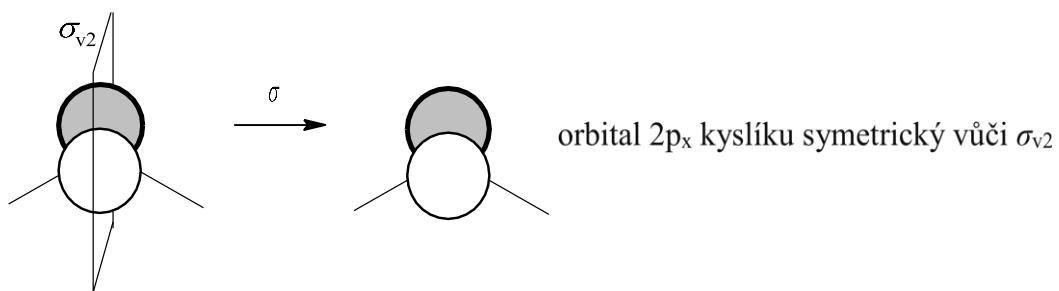
orbital $2p_y$ kyslíku antisymetrický vůči σ_{v2}



orbital $2p_x$ kyslíku antisymetrický vůči C_2



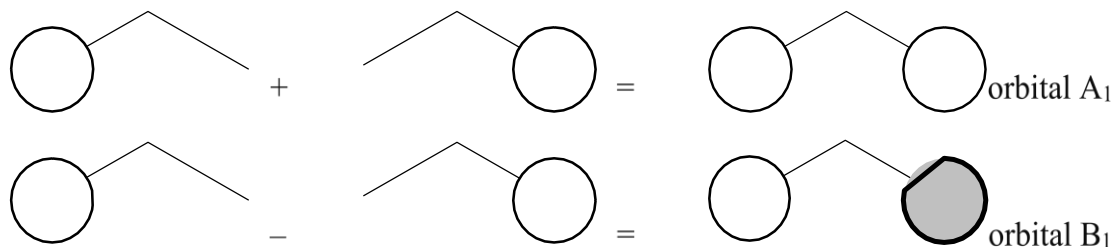
orbital $2p_x$ kyslíku antisymetrický vůči σ_{v1}



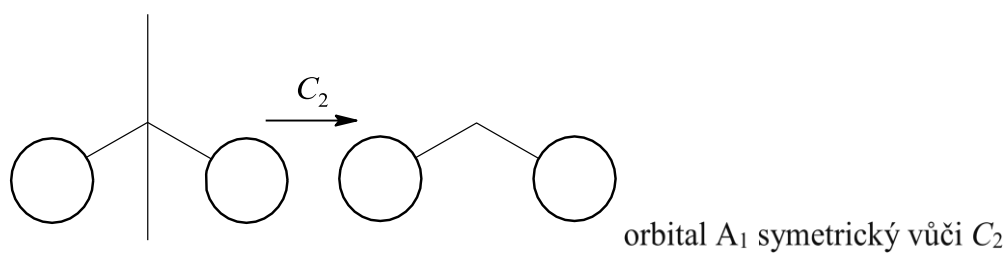
Orbitaly vzniklé kombinací AO vodíku.

Řešení:

Kombinací 2 AO orbitalů vodíku (1s) vznikají 2 různé MO:

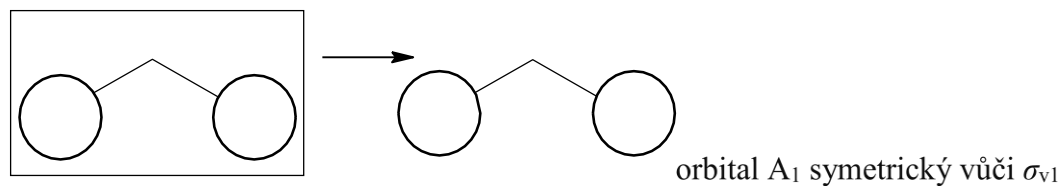


C_2



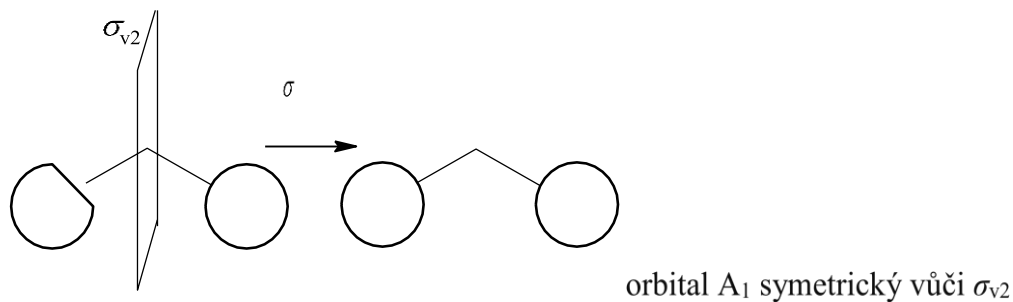
σ

σ



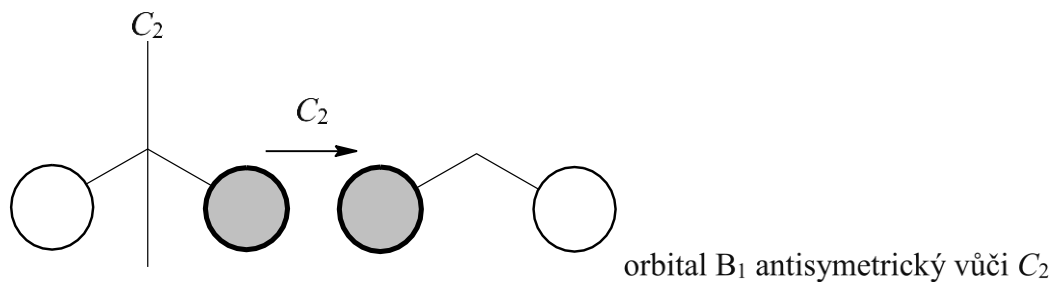
σ_{v2}

σ

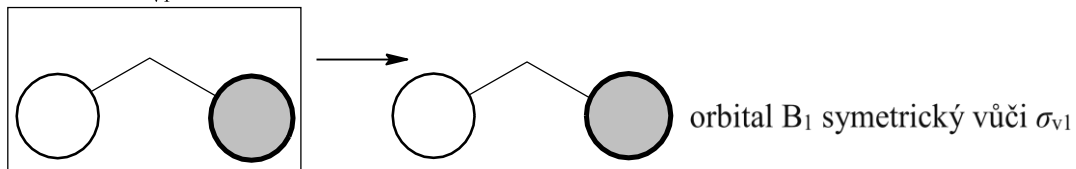


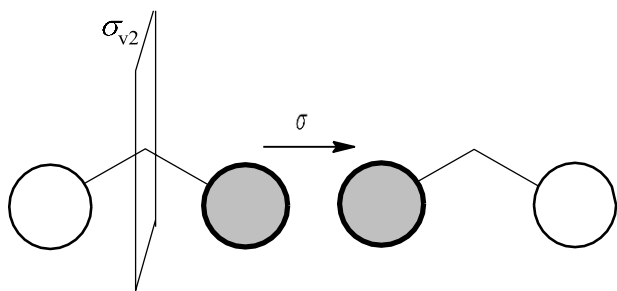
C_2

C_2



σ_{v1}





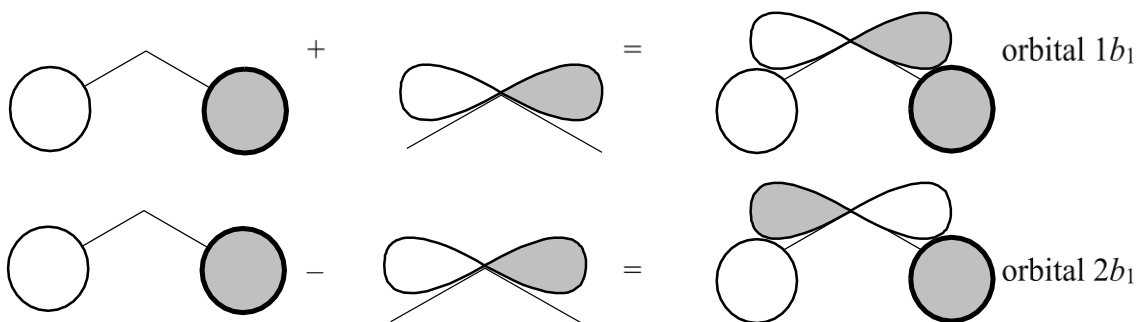
orbital B_1 symetrický vůči σ_{v2}

Určete, které valenční orbitály kyslíku lze kombinovat s orbitály vzniklými kombinací AO vodíku.

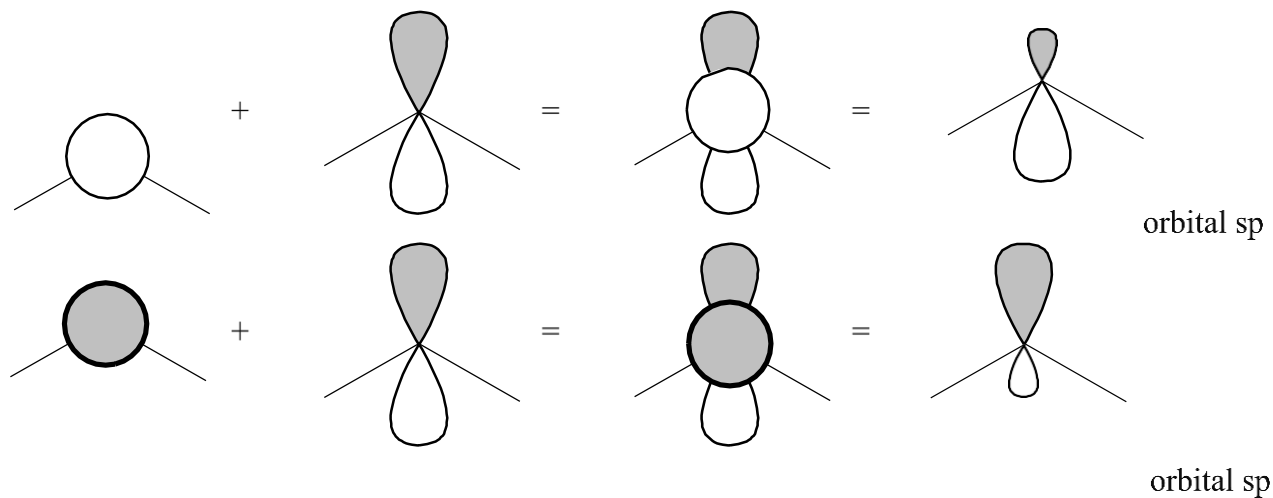
Řešení:

Kombinovat lze ty orbitály, které mají stejnou symetrii vůči prvkům symetrie molekuly vody:

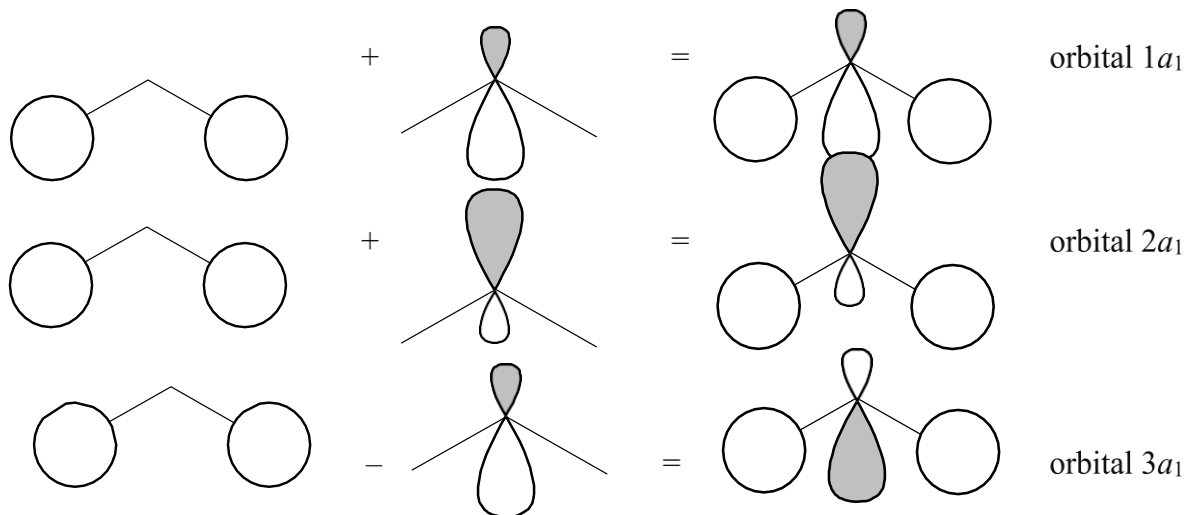
1.) Orbitály $2p_y$ a B_1 se kombinují za vzniku vazebného MO $1b_1$ a antivazebného MO $2b_1$:



2.) Orbitály $2s$ a $2p_z$ se kombinují za vzniku 2 hybridních orbitalů sp :



Ty se potom kombinují s orbitalem A_1 za vzniku vazebných MO $1a_1$, $2a_1$ a antivazebného MO $3a_1$:



3.) Orbital $2p_x$ nelze kombinovat ani s orbitalem A_1 , ani s orbitalem B_1 . Vzniká z něj ne vazebný MO $1b_2$.