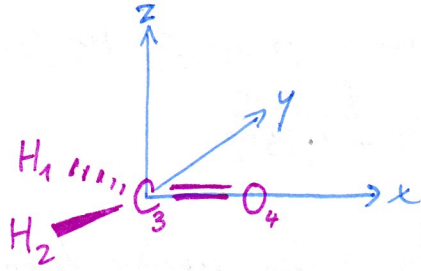


Príklady 10-4.A

10-1.



10-2. V poradí AO 1-10 jsou to $1s(H_1)$, $1s(H_2)$, $2s(C)$, $2p_z(C)$, $2p_x(C)$, $2p_y(C)$, $2s(O)$, $2p_z(O)$, $2p_x(O)$, $2p_y(O)$.

Jak to určit? Např: AO_3, AO_4 - podle n, l, m_l to musí být $2s$ a $2p_z$
 AO_6 má nulový překryv s AO_7 ($2s(O)$), takže to bude $2p_y$, AO_5 bude $2p_x$.

10-3.

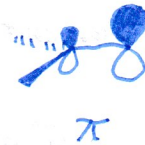
MO 9
 $E = -0,756 \text{ a.u.}$



MO 8
 $E = -0,611 \text{ a.u.}$



MO 7
 $E = -0,597 \text{ a.u.}$



10-4. π jsou pouze MO 7 a MO 4 (antisymetrické vůči rovině molekuly)

10-5. $2p_z(C)$ a $2p_z(O)$ sdílí elektrony pouze v MO 7.

$$P_{\pi} = 2 \cdot \frac{C}{47} \cdot \frac{C}{87} \cdot \frac{S}{48} \cdot 2 = 4 \cdot 0,2456 \cdot 0,9181 \cdot 0,2146 \approx 1,936$$

Jinak to taky jde určit z tabulky 6.

10-7.

Atom	1	2	3	4
1	0,6876	-0,0702	0,7945	-0,0615
2		0,6876	0,7945	-0,0615
3			1,4866	0,8148
4				6,9277

Suma všech čísel v tabulce
 $= 12,0001 \approx \underline{\underline{12}}$

10-8. Číslo 1,7825 představuje hrubou populaci AO_8 pocházející z MO 7.
 Součet čisté populace a $\frac{1}{2}$ (překryvová populace)

$$1,7825 = 2 \cdot 0,9181^2 + 2 \cdot 2 \cdot \frac{1}{2} \cdot 0,9181 \cdot 0,2456 \cdot 0,2146$$

Suma hrubých populací všech AO kyslíku = hrubá populace kyslíku.

10-9.] Atomové orbitaly.

Např. náboj A03: suma příspěvků ze všech obsazených MO (10-5).

$$1,0268 = \frac{\text{MO5} \quad \text{MO6} \quad \text{MO7} \quad \text{MO8} \quad \text{MO9} \quad \text{MO10}}{0 + 0,0028 + 0 + 0 + 0,7358 + 0,2882}$$

10-10.]

Číslo v tabulce 12 dostanu tak, že odečtu hrubou populaci daného atomu od počtu jeho valenčních elektronů (nebo spíš od náboje jádra, který zůstává na valenčních elektronech po tom, co ho odstráním vnitřní elektrony), má význam parciálního náboje.

Z parciálních nábojů a známé geometrie molekuly se dá vypočítat dipólový moment molekuly, který je ovšem silně nadsazený (vychází mi 7,34 D; experimentální hodnota 2,33 D). Každopádně se ale dá usoudit, že molekula je polární, záporný konec dipólového momentu odpovídá kyslíku.

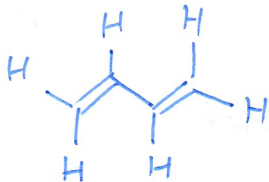
Dipólový moment jsem počítala jako:

$$\vec{\mu} = \sum_i q_i \vec{r}_i$$

q_i ... parciální náboj atomu i

\vec{r}_i ... polohový vektor atomu i

10-11.]



$$6 \cdot 1s(\text{H})$$

$$4 \cdot 2s(\text{C})$$

$$4 \cdot 3 \cdot 2p(\text{C})$$

$$22 \text{ AO} \rightarrow 22 \text{ MO}$$