

Písemná část zkoušky z předmětu C9920: Úvod do kvantové chemie

16. 1. 2014

1. Napište operátor kinetické energie pro libovolnou částici o hmotnosti m (2 body)

2. Možné hodnoty energie pro atom vodíku jsou: (2 body)

a. $E_n = -\frac{m_e Z^2 e'^4}{2n^2 \hbar^2}$, $n = 1, 2, 3, \dots$

b. $E_n = \frac{m_e Z^2 e'^4}{2n^2 \hbar^2}$, $n = 1, 2, 3, \dots$

c. $E_n = -\frac{m_e Z^2 e'^4}{2n^2 \hbar^2}$, $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

3. Pro atom síry ($Z=16$) (4 body)

a. Určete elektronovou konfiguraci základního stavu

b. Vypočtete poloměry obsazených AO dle rovnice $\rho = \frac{n^2 a_0}{Z^*}$,

kde a_0 je Bohrov poloměr $0.52917706 \times 10^{-10}$ m.

[Stínící parametry: 1.0 úplné stínění, 0.85 silné stínění, 0.35 slabé stínění.]

4. Křivka elektronové energie plus repulzní jaderné energie pro základní stav molekuly H_2 jako funkce mezijaderné vzdálenosti

(2 bod)

- a. Má na pro nulovou vzdálenost jader limitu $+\infty$, pro nekonečnou vzdálenost jader limitu nula, a nemá minimum pro žádnou konečnou mezijadernou vzdálenost.
- b. Má na pro nulovou vzdálenost jader limitu $+\infty$, pro nekonečnou vzdálenost jader limitu součtu elektronových energií separovaných atomů, a minimum pro vzdálenost jader R_e .
- c. Má na pro nulovou vzdálenost jader limitu nula, pro nekonečnou vzdálenost jader limitu nula, a minimum pro vzdálenost jader R_e .

5. Pro cyklopropenylový radikál C_3H_3

(4 body)

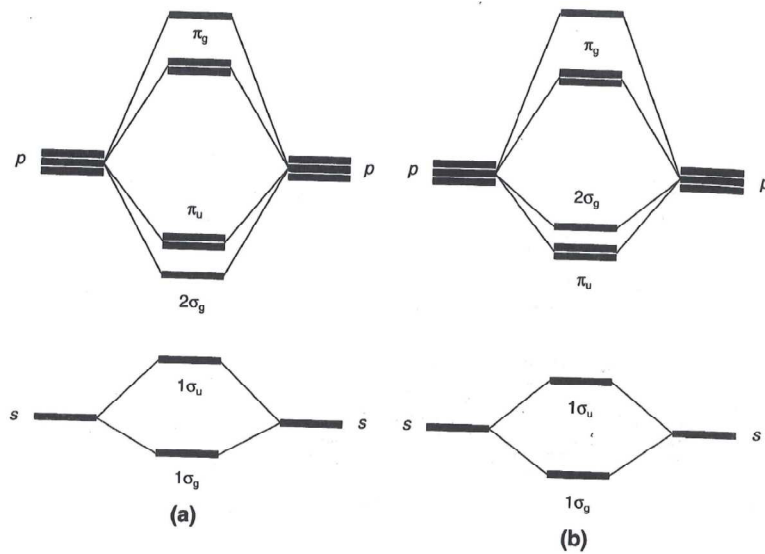
- a. Napište sekulární determinant v obecném tvaru (pomocí H_{ij} , S_{ij} , E_i)
- b. Napište sekulární determinant v aproximaci Hückelovy metody (pomocí α, β , 0)
- c. Vyjádřete výsledné hladiny energie jako funkce α, β
- d. Načrtněte tvary molekulových orbitalů (včetně relativních znamének VF např. pomocí šrafování) a doplňte jejich obsazení v základním stavu

6. Vypočítejte pravděpodobnost P , že elektron je v základním stavu atomu H ve vzdálenosti od jádra menší nebo rovné Bohrovu poloměru a_0 . (4 body)

Pomůcka: Lze jednoduše ukázat, že

$$P = \frac{4}{a_0^3} \int_0^{a_0} e^{-2r/a_0} r^2 dr = \frac{4}{a_0^3} \left[e^{-2r/a_0} \left(-\frac{a_0 r^2}{2} - \frac{2a_0^2 r}{4} - \frac{2a_0^3}{8} \right) \right]_0^{a_0}$$

7. Zařadte molekuly B_2 , N_2 a F_2 k podobrázku a) nebo b) podle toho, který typ elektronové struktury jim odpovídá.



(3 body)

8. Ve které z molekul N_2 , O_2 a F_2 lze očekávat nejsilnější vazbu? (2bod)

9. U které z molekul N_2 , O_2 a F_2 lze očekávat paramagnetismus? (2 bod)

10. Načrtněte interakční diagram pro konstrukci MO molekuly NH_3 z orbitalů centrálního atomu a symetricky přizpůsobených AO ligandů. (4 body)

11. Načrtněte korelační diagram MO molekuly AH_2 v symetriích $D_{\infty h}$ a C_{2v} . Na jeho základě předpovězte tvary molekul BeH_2 a H_2O . (5 bodů)

Hodnocení: Maximum 34 bodů

0-16 bodů: F, 17-20 bodů: E, 21-24 bodů: D, 25-28 bodů: C, 29-31 bodů: B, 32-34 bodů: A