**Písemná část zkoušky z předmětu C9920: Úvod do kvantové chemie**

**16. 1. 2014**

1. Napište operátor kinetické energie pro libovolnou částici o hmnotnosti *m* (*2 body*)
2. Možné hodnoty energie pro atom vodíkujsou: (*2 body*)
3. Pro atom síry (Z=16) *(4 body)*
   1. Určete elektronovou konfiguraci základního stavu
   2. Vypočtěte poloměry obsazených AO dle rovnice ,

kde je Bohrův poloměr 0.52917706 × 10-10 m.

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

1. Křivka elektronové energie plus repulzní jaderné energie pro základní stav molekuly H2 jako funkce mezijaderné vzdálenosti

(*2 bod*)

* 1. Má na pro nulovou vzdálenost jader limitu +∞, pro nekonečnou vzdálenost jader limitu nula, a nemá minimum pro žádnou konečnou mezijadernou vzdálenost.
  2. Má na pro nulovou vzdálenost jader limitu +∞, pro nekonečnou vzdálenost jader limitu součtu elektronových energií separovaných atomů, a minimum pro vzdálenost jader *Re*.
  3. Má na pro nulovou vzdálenost jader limitu nula, pro nekonečnou vzdálenost jader limitu nula, a minimum pro vzdálenost jader *Re*.

1. Pro cyklopropenylový radikál C3H3  (*4 body*)
   1. Napište sekulární determinant v obecném tvaru (pomocí Hij, Sij, Ei)
   2. Napište sekulární determinant v aproximaci Hűckelovy metody (pomocí α,β, 0)
   3. Vyjádřete výsledné hladiny energie jako funkce α,β
   4. Načrtněte tvary molekulových orbitalů (včetně relativních znamének VF např. pomocí šrafování) a doplňte jejich obsazení v základním stavu
2. Vypočtěte pravděpodobnost P, že elektron je v základním stavu atomu H ve vzálenosti od jádra menší nebo rovné Bohrovu poloměru a0. (4 body)

Pomůcka: Lze jednoduše ukázat, že

1. Zařaďte molekuly B2, N2 a F2 k podobrázku a) nebo b) podle toho, který typ elektronové struktury jim odpovídá.



(3 body)

1. Ve které z molekul N2, O2 a F2 lze očekávat nejsilnější vazbu? (2bod)
2. U kteréz molekul N2, O2 a F2 lze očekávat paramagnetismus? (2 bod)

1. Načrtněte interakční diagram pro konstrukci MO molekuly NH3  z orbitalů centrálního atomu a symetricky přizpůsobených AO ligandů. (*4 body*)
2. Načrtněte korelační diagram MO molekuly AH2 v symetriích D∞h a C2v. Na jeho základě předpovězte tvary molekul BeH2 a H2O. (*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