

Písemná část zkoušky z předmětu C9920: Úvod do kvantové chemie

4. 2. 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. Vypočítejte 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 body)

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

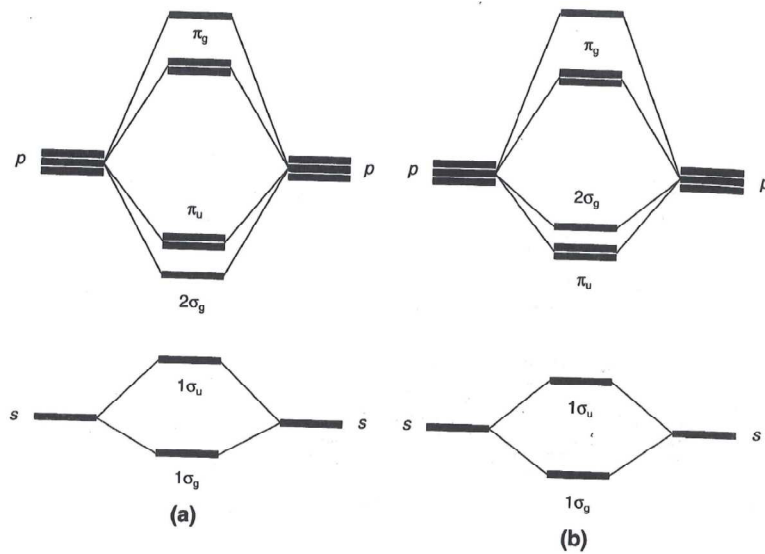
- Napište sekulární determinant v obecném tvaru (pomocí  $H_{ij}$ ,  $S_{ij}$ ,  $E_i$ )
- Napište sekulární determinant v aproximaci Hückelovy metody (pomocí  $\alpha, \beta$ , 0)
- Vyjádřete výsledné hladiny energie jako funkce  $\alpha, \beta$
- Načrtněte tvary molekulových orbitalů (včetně relativních 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  $\text{NH}_3$  z orbitalů centrálního atomu a symetricky přizpůsobených AO ligandů. (4 body)

11. Načrtněte korelační diagram MO molekuly  $\text{AH}_2$  v symetriích  $D_{\infty h}$  a  $C_{2v}$ . Na jeho základě předpovězte tvary molekul  $\text{BeH}_2$  a  $\text{H}_2\text{O}$ . (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