

# C9920: Úvod do kvantové chemie a elektronové struktury molekul

## Sylabus pro období podzim 2015

### 1. ÚVOD DO STRUKTURY ATOMŮ A MOLEKUL

#### 1.1 Základní pojmy kvantové mechaniky

- 1.1.1 Co je kvantová mechanika (QM) a na čem je založena?
- 1.1.2 Stav systému v klasické a kvantové mechanice
- 1.1.3 Pojem funkce jedné proměnné, Postulát o vlnové funkci
- 1.1.4 Jak získat informace obsažené v  $\Psi$ ?
- 1.1.5 Dodatek k Postulátu o vlnové funkci: Bornova pravděpodobnostní interpretace
- 1.1.6 Hodnoty fyzikálních veličin, operátory, vlastní funkce a vlastní hodnoty
- 1.1.7 Důležité QM operátory
- 1.1.8 Postulát o operátorech
- 1.1.9 Základní vlastnosti QM operátorů

#### 1.2 Atom vodíku

- 1.2.1 Schrödingerova rovnice pro elektron v poli jádra
- 1.2.2 Symetrie problému, sférické polární souřadnice, atomové jednotky
- 1.2.3 Dovolené hodnoty energie a atomová spektra
- 1.2.4 Názvosloví vlnových funkcí
- 1.2.5 Popis vlastních funkcí
  - (a) Analytický tvar
  - (b) Funkce 1s ( $n = 1, l = 0, m = 0$ ) a 2s ( $n = 2, l = 0, m = 0$ )
  - (c) Funkce 2p ( $n = 2, l = 0, m = +1, 0, -1$ )
  - (d) Radiální hustota pravděpodobnosti

#### 1.3 Atomy s více elektrony

- 1.3.1 Orbitální aproximace, součet energií orbitalů vs. celková energie
- 1.3.2 Matematický popis a názvosloví atomových orbitalů
- 1.3.3 Výměnná symetrie VF, elektronový spin
- 1.3.4 Elektronová konfigurace Li, antisymetrie VF
- 1.3.5 Elektronové konfigurace atomů
  - (a) Pauliho princip výlučnosti
  - (b) Aufbau proces, Klechowského pravidlo
- 1.3.6 Hundovo pravidlo
- 1.3.7 Vnitřní a valenční elektrony
- 1.3.8 Elektronové parametry mnohaelektronových atomů
  - (a) Stínění
  - (b) Efektivní náboj: Slaterova pravidla
  - (c) Orbitální poloměry a velikost atomu
- 1.3.9 Vývoj atomových vlastností v periodické tabulce
  - (a) Trendy v efektivních nábojích vnímaných valenčními elektrony
  - (b) Trendy v atomových poloměrech
  - (c) Trendy v orbitálních energiích
- 1.3.10 Vztahy k měřitelným vlastnostem
  - (a) Ionizační potenciál a elektronová afinita
  - (c) Škály elektronegativity

## 2. VÝSTAVBA MO A ELEKTRONOVÁ STRUKTURA

### 2.1 Interakce dvou atomových orbitalů na různých centrech

#### 2.1.1 Základní aproximace:

- (a) Bornova-Oppenheimerova
- (b) Orbitální
- (c) MO-LCAO

#### 2.1.2 Konstrukce MO

- (a) Interakce dvou identických AO
- (b) Interakce dvou různých AO
- (c) Orbitaly s nulovým překryvem

#### 2.1.3 Aplikace na některé jednoduché dvouatomové molekuly

- (a) Pravidla pro zaplňování hladin
- (b) Systémy se 2, 4, 1 a 3 elektrony

#### 2.1.4 Překryv a symetrie

- (a) Překryv 1s/1s,  $\pi$ -překryv 2p/2p, překryv 1s/2p
- (b) Překryvové integrály nulové díky symetrii
- (c) Elementy symetrie

#### 2.1.5 Aplikace konceptů symetrie na některé polyatomické molekuly

- (a)  $\sigma/\pi$  separace
- (b)  $\pi$  MO ethylenu a formaldehydu

### 2.2 Metoda fragmentových molekulových orbitalů

#### 2.2.1 MO některých modelových systémů, $H_n$

- (a) Čtvercově planární a obdélníková  $H_4$
- (b) Lineární  $H_3$
- (c) Lineární  $H_4$
- (d) Triangulární  $H_3$
- (e) Tetraedrál ní  $H_4$
- (f) Hexagonální  $H_6$

#### 2.2.2 Vliv elektronegativity na tvar a energii MO

### 2.3 Interakce mezi dvěma fragmentovými orbitaly

#### 2.3.1 Lineární molekuly $AH_2$

- (a) Symetrické vlastnosti fragmentových orbitalů
- (b) MO lineární  $AH_2$  a aplikace na  $BeH_2$

#### 2.3.2 Trigonálně planární molekuly $AH_3$

- (a) Symetrické vlastnosti fragmentových orbitalů
- (b) MO trigonálně planární  $AH_3$  a aplikace na  $BH_3$

#### 2.3.3 Tetraedrál ní molekuly $AH_4$

- (a) Symetrické vlastnosti fragmentových orbitalů
- (b) MO tetraedrál ní  $AH_4$  a aplikace na  $CH_4$

### 2.4 Interakce mezi třemi fragmentovými orbitaly

#### 2.4.1 Pravidla pro interakci tří orbitalů

- (a) Formulace problému

- (b) Pravidla pro konstrukci MO
- 2.4.2 Elektronová struktura molekul AH
  - (a) Formulace problému a tvary MO
  - (b) Elektronová struktura LiH, BH a FH
- 2.4.3 Lomené molekuly AH<sub>2</sub>
  - (a) Symetrie fragmentových orbitalů
  - (b) Interakční diagram a MO pro H<sub>2</sub>O
- 2.4.4 Pyramidální molekuly AH<sub>3</sub>
  - (a) Symetrie fragmentových orbitalů
  - (b) Interakční diagram a MO pro NH<sub>3</sub>
- 2.5 Interakce mezi čtyřmi fragmentovými orbitaly
  - 2.5.1 Homonukleární diatomické molekuly A<sub>2</sub>
  - 2.5.2 Heteronukleární diatomické molekuly AB
- 2.6 Velké molekuly
  - 2.6.1 MO acetyleny, ethylenu a ethanu
  - 2.6.2 Konjugované polyeny

### 3. ÚVOD DO STUDIA GEOMETRIE A REAKTIVITY

#### 3.1 Orbitální korelační diagramy: Modelové systémy H<sub>3</sub><sup>+</sup> a H<sub>3</sub><sup>-</sup>

- 3.1.1 Pravidla pro kreslení orbitálních korelačních diagramů
- 3.1.2 Orbitální korelační diagram pro ohýbání H<sub>3</sub>
- 3.1.3 Geometrie H<sub>3</sub><sup>+</sup>
- 3.1.4 Geometrie H<sub>3</sub><sup>-</sup> a pravidlo nejvyššího obsazeného MO

#### 3.2 Geometrie molekul AH<sub>2</sub> a AH<sub>3</sub>

- 3.2.1 Molekuly AH<sub>2</sub>
  - (a) Orbitální korelační diagram mezi lineární a lomenou strukturou
  - (b) Geometrie molekul AH<sub>2</sub>
- 3.2.2 Molekuly AH<sub>3</sub>
  - (a) Orbitální korelační diagram mezi trigonální a pyramidální strukturou
  - (b) Geometrie molekul AH<sub>3</sub>

#### 3.3 Úvod do studia chemické reaktivity

- 3.3.1 Popis chemické reakce
- 3.3.2 Aproximace hraničních orbitalů
- 3.3.3 Cykloadiční reakce

#### Literatura:

Y. Jean, F. Volatron, *An Introduction to Molecular Orbitals*, Oxford University Press, Oxford, 1993.  
John P. Lowe: *Quantum Chemistry - 2nd ed*, Academic Press, San Diego, California, 1993.  
Obě učebnice budou zveřejněny ve studijních materiálech ISu.

**Zkouška:** Písemná + ústní v rámci řádného ZK období.