

**TEORIE MOLEKULOVÝCH ORBITALŮ (MOLEKULY AH<sub>2</sub>, AH<sub>3</sub>, AH<sub>4</sub>),**

**ÚVOD DO SYMETRIE**

**Úkol č. 9.1 (Opakování – molekula H<sub>2</sub>)**

Načrtněte interakční diagram MO pro molekulu H<sub>2</sub> (bodová grupa  $D_{\infty h}$ ). Jaké MO vzniknou a jaký bude jejich počet? Doplňte příslušný počet elektronů, vypočtěte řád vazby, doplňte symetrické nálepky vzniklých MO a naznačte prvky symetrie ( $E$ ,  $C_n$ ,  $\sigma$ , ...)

**Úkol č. 9.2 (Molekula H<sub>3</sub><sup>+</sup>)**

Uvažujme molekulu H<sub>3</sub><sup>+</sup>. Načrtněte dvě možné struktury (se symetrií  $D_{\infty h}$  a  $D_{3h}$ ) této molekuly, přičemž pro každou z nich nakreslete interakční diagram MO. Doplňte počet elektronů a oba diagramy porovnejte. Náповěda: Diagram MO sestavte z fragmentových, kdy jeden fragment je tvořen H<sub>2</sub> a druhý H.

**Úkol č. 9.3 (Molekuly typu AH<sub>2</sub> s rozdílnou symetrií)**

O vodě se říká, že má dva nevazebné elektronové páry, ale jak tomu je doopravdy? Nakreslete diagram MO vody H<sub>2</sub>O ( $C_{2v}$ ) a hydridu berylnatého BeH<sub>2</sub> ( $D_{\infty h}$ ) z fragmentových orbitalů, které jsou tvořeny fragmenty H<sub>2</sub> a fragmentovými AO daného prvku. Doplňte počet elektronů, symetrické nálepky a obě molekuly porovnejte (energie MO, složení a případně reaktivita). Uveďte další příklady molekul odpovídající těmto bodovým grupám.

**Úkol č. 9.4 (Molekuly typu AH<sub>3</sub> s rozdílnou symetrií)**

Amoniak NH<sub>3</sub> je typickým příkladem molekuly se symetrií  $C_{3v}$ . Naproti tomu hydrid boritý je krásným příkladem molekuly se symetrií  $D_{3h}$ . Nakreslete diagramy MO pro obě molekuly, doplňte počty elektronů, symetrické nálepky a obě molekuly porovnejte (energie MO, složení a případně reaktivita). Náповěda: Využití fragmentových orbitalů H<sub>3</sub> a fragmentových AO daného  $p$ -prvku. Uveďte další příklady molekul odpovídající těmto bodovým grupám.

**Úkol č. 9.5 (AH<sub>4</sub> v symetrii  $T_d$ )**

Na střední škole jste se učili, že v molekule methanu CH<sub>4</sub> (bodová grupa  $T_d$ ) při hybridizaci dochází k energiovému sjednocení orbitalů a vznikají tzv. sp<sup>3</sup> hybridní orbitály. Nakreslete diagram MO pro tuto molekulu, doplňte počet elektronů a symetrické nálepky a rozhodněte, do jaké míry toto tvrzení koreluje s interpretací na základě diagramu MO.

Tabulky charakterů

$C_{2v}$ ( $2mm$ )	$E$	$C_2$	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$		
$A_1$	1	1	1	1	$z$	$x^2, y^2, z^2$
$A_2$	1	1	-1	-1	$R_z$	$xy$
$B_1$	1	-1	1	-1	$x, R_y$	$xz$
$B_2$	1	-1	-1	1	$y, R_x$	$yz$

$C_{3v}$ ( $3m$ )	$E$	$2C_3$	$3\sigma_v$			
$A_1$	1	1	1	$z$	$x^2 + y^2, z^2$	
$A_2$	1	1	-1	$R_z$		
$E$	2	-1	0	$(x, y)(R_x, R_y)$	$(x^2 - y^2, 2xy)(xz, yz)$	

$D_{3h}$ ( $\bar{6}$ ) $m2$	$E$	$2C_3$	$3C_2$	$\sigma_h$	$2S_3$	$3\sigma_v$		
$A'_1$	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2, z^2$	
$A'_2$	1	1	-1	1	1	-1	$R_z$	
$E'$	2	-1	0	2	-1	0	$(x, y)$	$(x^2 - y^2, 2xy)$
$A''_1$	1	1	1	-1	-1	-1		
$A''_2$	1	1	-1	-1	-1	1	$z$	
$E''$	2	-1	0	-2	1	0	$(R_x, R_y)$	$(xy, yz)$

$T_d$ ( $\bar{4}3m$ )	$E$	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$		
$A_1$	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2 + z^2$	
$A_2$	1	1	1	-1	-1		
$E$	2	-1	2	0	0	$(2z^2 - x^2 - y^2, \sqrt{3}(x^2 - y^2))$	
$T_1$	3	0	-1	1	-1	$(R_x, R_y, R_z)$	
$T_2$	3	0	-1	-1	1	$(x, y, z)$	$(xy, xz, yz)$