**Procvičovací otázky k tématu Molekulové orbitaly**

1. Načrtněte schematicky graf závislosti celkové energie elektronů plus potenciální energie jader na mezijaderné vzdálenosti dvouatomové molekuly.
2. Co je principem Born-Oppenheimerovy aproximace a jaké dva základní kroky ji realizují?
3. Co je principem přiblížení nezávislých elektronů? Potřebujeme toto přiblížení pro řešení úlohy o atomu vodíku?
4. Které možnosti nastanou pro vzájemný vztah koeficientů c1 a c2 v metodě MO-LCAO pro H2+? Pro obě možnosti načrtněte (a) graf Ψ a (b) graf Ψ2 jako funkci souřadnice pro body ležící na přímce procházející oběma jádry.
5. Načrtněte interakční diagram molekuly H2+ a k příslušným hladinám energie schematicky (pomocí zjednodušených izoploch) MO $σ\_{g}$ a $σ\_{u}^{\*}$. Zapište, jaká relace (rovnost nebo nerovnost) platí mezi $∆E^{+} a$ $∆E^{-}$.
6. Nakreslete přibližný graf závislosti překryvového integrálu atomových orbitalů 1sA, 1sB v závislosti na mezijaderné vzdálenosti dvouatomové molekuly.
7. Načrtněte interakční diagram pro interakci dvou orbitalů typu *s,* odpovídajících různým hodnotám energie. Schematicky znázorněte vzniklé MO, tj. vyznačte pomocí šrafování/vybarvení a velikostí izoploch relativní znaménka a relativní velikosti příspěvků jednotlivých AO do příslušných MO.
8. Pro degenerovanou interakci dvou AO vyjádřete $∆E\_{celk}$ pomocí $∆E^{+} a$ $∆E^{-}$ v případě účasti 1, 2, 3 a 4 elektronů. Které dvě orbitalní interakce budou určitě stabilizující? Která orbitální interakce bude určitě destabilizující?
9. Pro překryvy typu s-s a s-p nakreslete grafy jejich závislostí na mezijaderné vzdálenosti dvouatomové molekuly, jedná-li se o orbital p s maximy elektronové hustoty ležící na přímce procházející oběma jádry.
10. Nakreslete graf úhlové závislosti překryvu mezi AO typu s,p a AO typu s,dz2.
11. Z následujících dvojic AO, z nichž první má vždy střed na prvním atomu dusíku a druhý střed na druhém atomu dusíku molekuly N2 ležící na souřadné ose *z*, vyberte všechny s navzájem **nenulovými** překryvy: (px(1), s(2)) (px(1), px(2)) (s(1), s(2)) (pz(1), s(2)) (pz(1), py(2))
12. U kterých biatomických homonukelárních molekul z prvků druhé periody leží hladina πu **nad** hladinou g, tj. -vazba je dle očekávání silnější než vazba ? U kterých tomu tak není a proč?