

Procvičovací otázky k tématu Molekulové orbitály

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 c_1 a c_2 v metodě MO-LCAO pro H_2^+ ? Pro obě možnosti načrtněte (a) graf Ψ a (b) graf Ψ^2 jako funkci souřadnice pro body ležící na přímce procházející oběma jádry.
5. Načrtněte interakční diagram molekuly H_2^+ a k příslušným hladinám energie schematicky (pomocí zjednodušených izoploch) MO σ_g a σ_u^* . Zapište, jaká relace (rovnost nebo nerovnost) platí mezi ΔE^+ a ΔE^- .
6. Nakreslete přibližný graf závislosti překryvového integrálu atomových orbitalů $1s_A$, $1s_B$ 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 ΔE_{celk} pomocí ΔE^+ a ΔE^- v případě účasti 1, 2, 3 a 4 elektronů. Které dvě orbitální 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, d_{z^2} .
11. Z následujících dvojic AO, z nichž první má vždy střed na prvním atomu dusíku a druhý střed na druhém atomu dusíku molekuly N_2 ležící na souřadné ose z, vyberte všechny s navzájem **nenulovými** překryvy: $(p_x^{(1)}, s^{(2)})$ $(p_x^{(1)}, p_x^{(2)})$ $(s^{(1)}, s^{(2)})$ $(p_z^{(1)}, s^{(2)})$ $(p_z^{(1)}, p_y^{(2)})$
12. U kterých biatomických homonukleárních molekul z prvků druhé periody leží hladina π_u **nad** hladinou $2\sigma_g$, tj. σ -vazba je dle očekávání silnější než vazba π ? U kterých tomu tak není a proč?