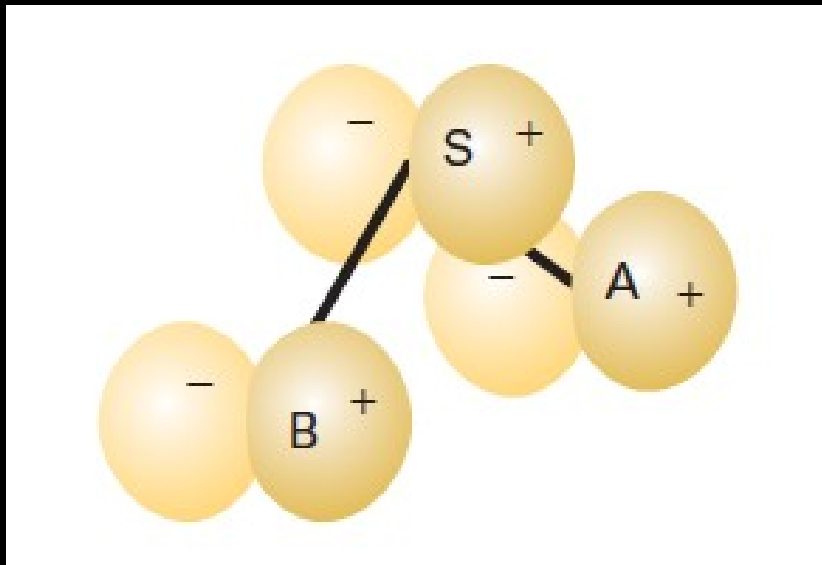


## 9. přednáška

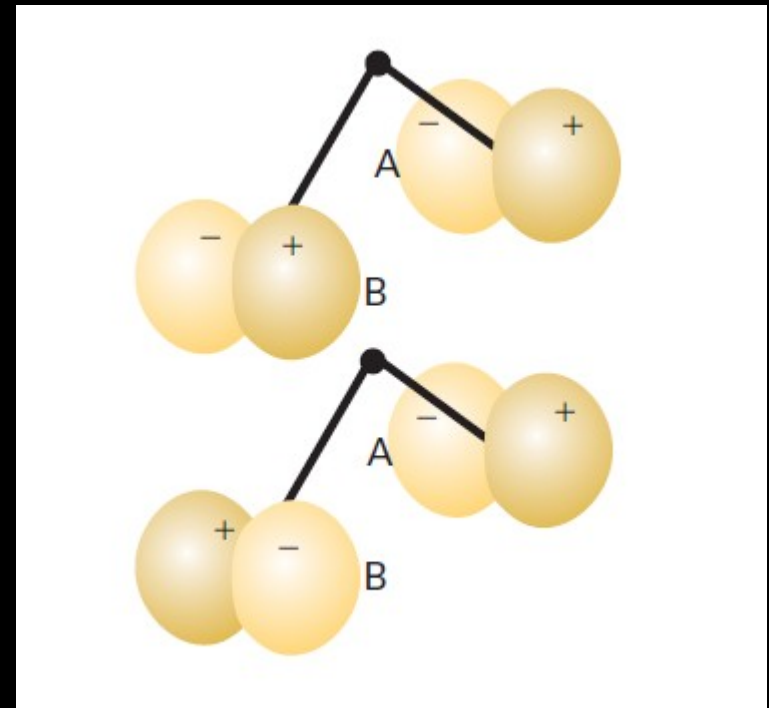
Reprezentace a charaktery,  
Born-Oppenheimerova  
aproximace

Atkins: Kapitola 11.2 a 10.1

# 11.2.1.1 Reprezentace a charaktery



Obr. 11.16



Obr. 11.17

Požadované vztahy: všechny až po tabulku 11.2 –  
umět matice zapsat na základě obrázku

# Poznámka k tabule charakterů

**Table 12.2\*** The  $C_{2v}$  character table

$C_{2v}, 2mm$	$E$	$C_2$	$\sigma_v$	$\sigma'_v$	$h=4$	
$A_1$	1	1	1	1	$z$	$z^2, y^2, x^2$
$A_2$	1	1	-1	-1		$xy$
$B_1$	1	-1	1	-1	$x$	$zx$
$B_2$	1	-1	-1	1	$y$	$yz$

\* More character tables are given at the end of the *Data section*.

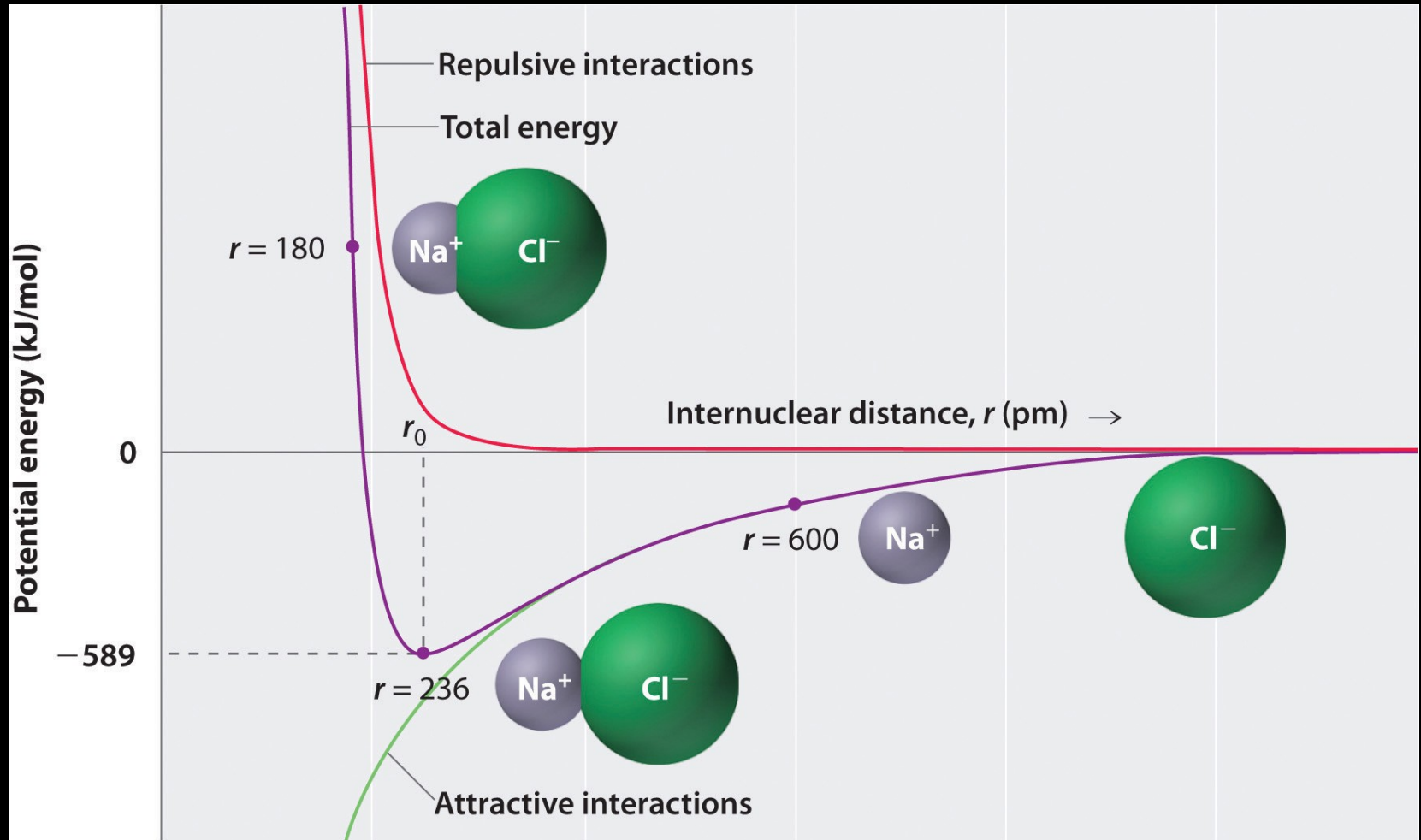
Báze reprezentace v posledním sloupi závisí na orientaci molekuly vzhledem k souřadnému systému. V orientaci z přednášky jsme měli orbital  $xz$  u reprezentace  $B_2$  kvůli tomu, jak jsme měli orientovanu osu  $x$ .

# Navazující samostudium (požadováno ke ZK): str. 400-403

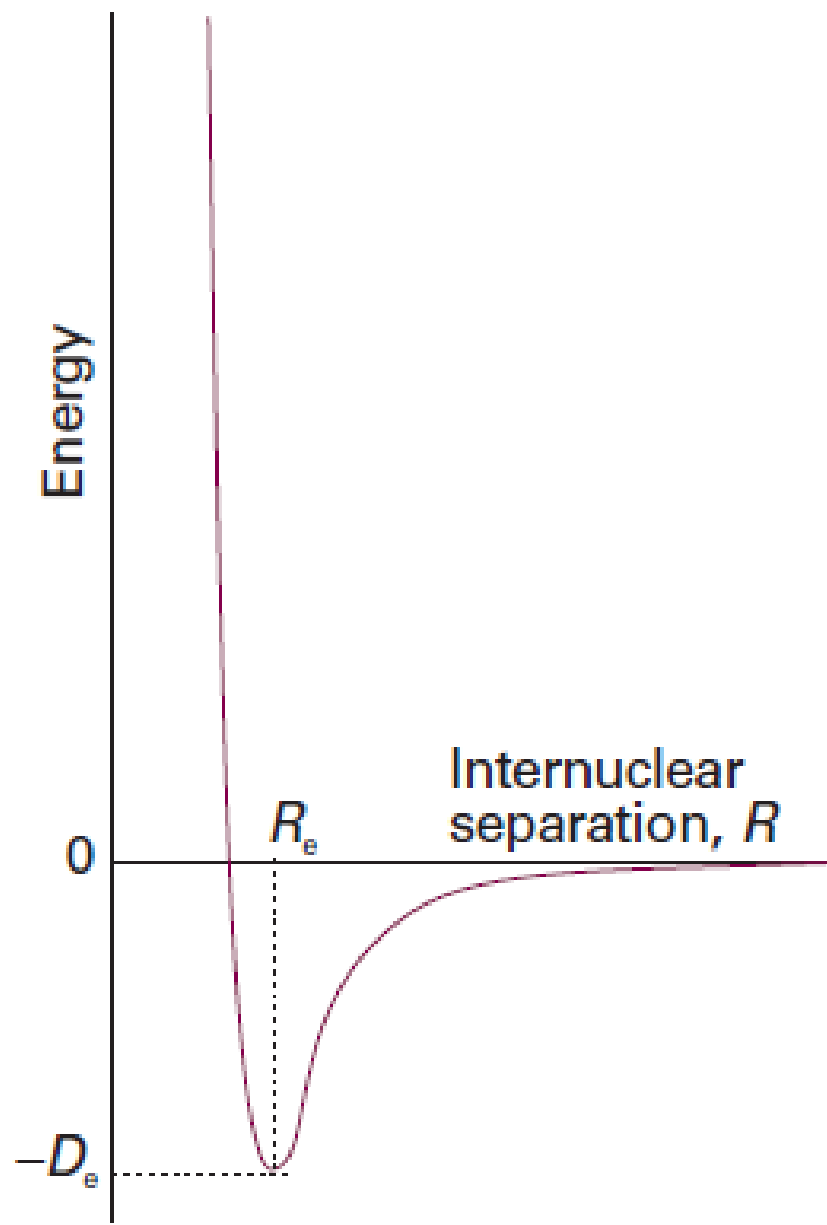
- 11.2.1.2
- 11.2.1.3
- 11.2.1.4
- 11.2.1.5

# 10. Struktura molekul

# 10.1 Born-Oppenheimerova aproximace



Konkretizace obrázku z přednášky pro jiný systém: porovnání repulzních a atrakčních interakcí s křivkou celkové energie pro pohyb elektronů oddělený od pohybu jader.



## 10.2 Teorie valenční vazby

- (opakování z obecné chemie + rozšíření formou samostudia):
- Pojem hybridní orbitaly  $sp^3$  a  $sp^2$ :
- Umět napsat rovnice 10.3
- Umět nakreslit obrázky 10.7 - 10.11