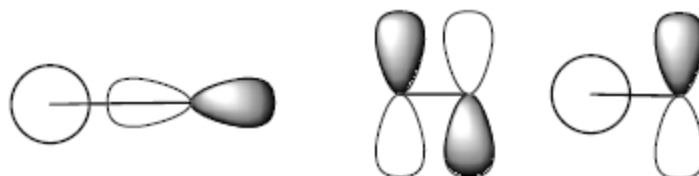


10. Molekulové orbitály dvouatomových molekul – zadání

K nastudování: <https://is.muni.cz/do/1499/el/estud/prif/js09/molekuly/web/index.html>

1. Do souřadného systému znázorněte izoplochy příslušející AO s, p a d. Jaká je degenerace těchto orbitalů, nejsou-li ve vázaném stavu?
2. Najděte všechny prvky symetrie v molekule vody a rozhodněte, zda jsou vůči nim symetrické (S) nebo antisymetrické (AS)
 - (i) valenční AO kyslíku.
 - (ii) orbitály vzniklé kombinací AO vodíku.
 - (iii) Určete, které valenční orbitály kyslíku lze kombinovat s orbitály vzniklými kombinací AO vodíku.
3. Určete, v jakém případě se jedná o kladný ($S > 0$), záporný ($S < 0$), případně nulový překryv ($S = 0$)?



4. Určete, jaké MO vzniknou (tj. σ nebo π), určete jejich symetrii (S nebo AS) vůči středové souměrnosti se středem v centru vazby a přiřaďte jim správné nálepky symetrie (tj. „g“ nebo „u“), interagují-li spolu
 - (iv) 2 identické orbitály s na různých centrech.
 - (v) orbital s na jednom centru a orbital p na druhém centru, tak že laloky orbitalu p leží na spojnici jader.
 - (iii) 2 identické orbitály p na různých centrech, tak že laloky obou orbitalů p leží na spojnici jader.
 - (iv) 2 identické orbitály p na různých centrech, tak že laloky obou orbitalů p jsou lokalizovány kolmo ke spojnici jader.
5.
 - (i) Načrtněte interakční diagram MO pro molekulu H_2 . Určete, jaké MO vzniknou, a přiřaďte jim správné nálepky symetrie. Doplněte příslušný počet elektronů, napište elektronovou konfiguraci, vypočtěte řád vazby. Určete, jaké má molekula prvky symetrie.
 - (ii) Interakční diagram upravte pro kation H_2^+ a anion H_2^- . Doplněte příslušný počet elektronů, napište příslušné elektronové konfigurace a vypočtěte řády vazby. Jak se budou měnit vazebné délky a disociační energie?
 - (iii) Interakční diagram upravte pro molekul He_2 a He_2^+ . Doplněte příslušný počet elektronů, napište příslušné elektronové konfigurace a vypočtěte řády vazby. Jak se v případě kationtu změní vazebná délka a disociační energie?
6. Načrtněte interakční diagram MO pro molekulu C_2 . Určete, jaké MO vzniknou, a přiřaďte jim správné nálepky symetrie. Doplněte příslušný počet elektronů, napište elektronovou konfiguraci, vypočtěte řád vazby. Vyznačte hraniční orbitály (HOMO/LUMO). Lze očekávat větší prodloužení vazby v případě excitace z HOMO do LUMO, nebo z HOMO ještě o hladinu výš?

- Načrtněte interakční diagram MO pro molekulu O_2 . Určete, jaké MO vzniknou, a přiřaďte jim správné nálepky symetrie. Doplňte příslušný počet elektronů, napište elektronovou konfiguraci, vypočtěte řád vazby. Vyznačte hraniční orbitály (HOMO/LUMO). Vypočtěte spinovou multiplicitu. Jak se budou měnit elektronové konfigurace, řády vazeb a disociační energie, vytvoříme-li postupně O_2^+ , O_2^- ? Molekula O_2 oplývá jednou vlastností týkající se magnetismu. Kterou?
- Jak se mění řád vazby, vazebná délka a velikost disociační energie směrem od molekuly N_2 k molekule Ne_2 ?
- Na obrázku je znázorněn interakční diagram MO pro molekulu NO. Orbitály 1σ a 1π jsou vazebné, orbitály 2π a 4σ antivazebné, orbitály 2σ a 3σ jsou spíše nevazebné. Doplňte elektrony. Vysvětlete, proč je tato molekula v základním stavu radikál. Vypočtěte spinovou multiplicitu. Jak se změní vazebná délka a disociační energie, vytvoříme-li kation a anion?

