

5. přednáška, 1. část:
Atomové orbitaly:
dokončení

Atkins, de Paula (AdP) : Fyzikální chemie

Minulá přednáška dle Atkins, Jones (AJ): Chemical principles

Přiřazení témat k pokročilejšímu výkladu v Atkins, dePaula (AdP)

AJ 1.6 Atomová spektra a hladiny energie

→ AdP 9.1 Spektrální linie vodíkového atomu

→ AdP 9.1.2.2 Energetické hladiny

AJ 1.7+8 Hlavní kvantové číslo + Atomové orbitaly

→ AdP 9.1.2 Atomové orbitaly a jejich energie

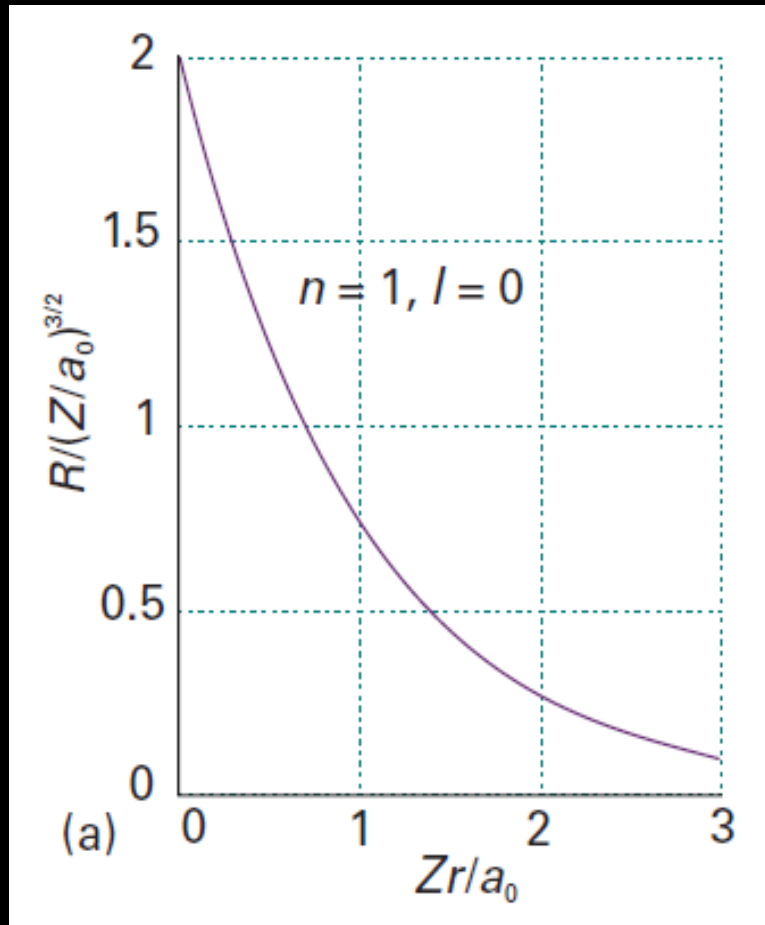
→ AdP 9.1.2.1 Specifikace orbitalů

→ AdP 9.1.2.4 Slupky a podslupky [stejně n a l , Atkins: chyba!]

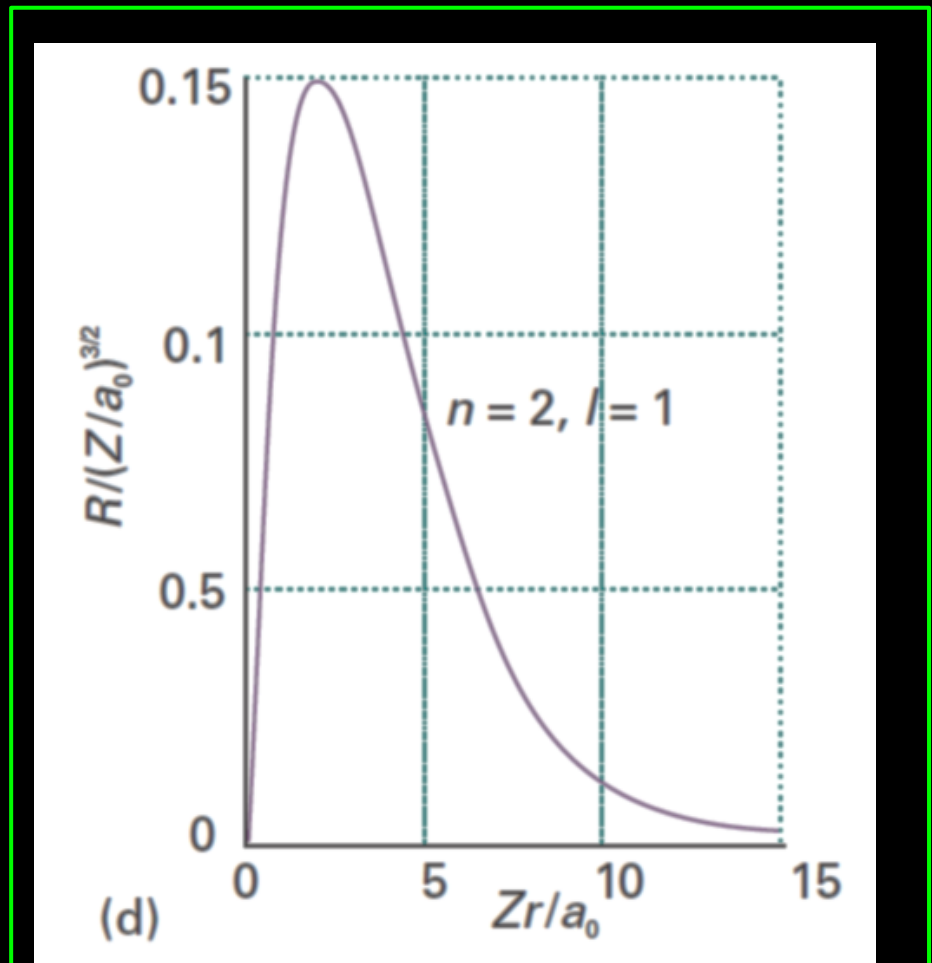
→ AdP 9.1.2.5 Orbitaly s [sharp... druh linií ve spektrech]

→ AdP 9.1.2.6 Radiální distribuční funkce

AdP 9.1.2.7 Orbitaly p [principal] – radiální část



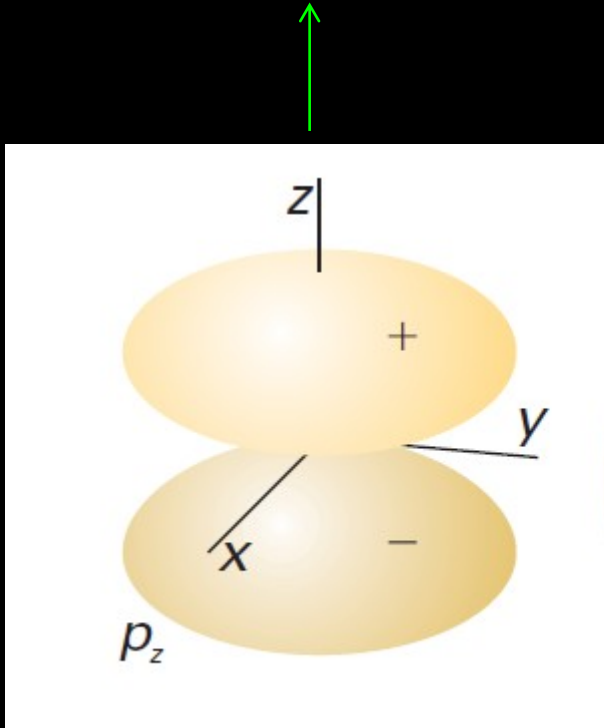
Obr. 9.4 a.
Radiální část vlnové funkce
pro orbital 1s vodíku.



Obr. 9.4 d.
Radiální část vlnové funkce
pro orbital 2p vodíku.

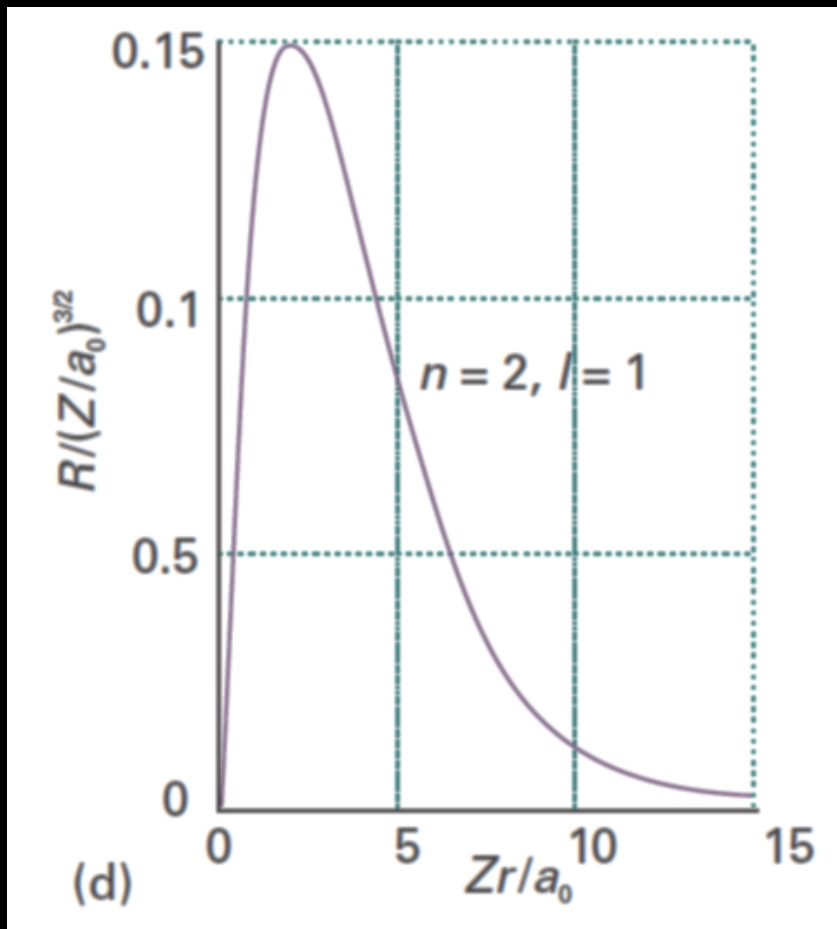
Orbitaly p – radiální a úhlová část dohromady

Orbital $2p_z$ $n=2, l=1, m_l=0$

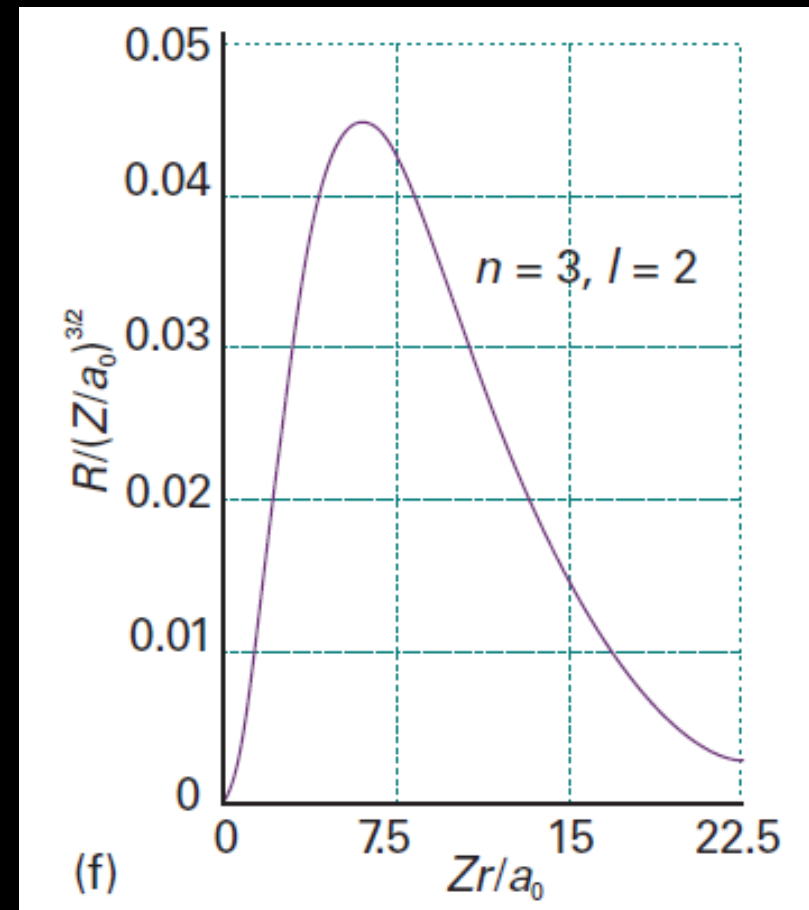


Obr. 9.15 Hraniční plochy orbitalů p

AdP 9.1.2.8 Orbitaly d [diffuse] – radiální část

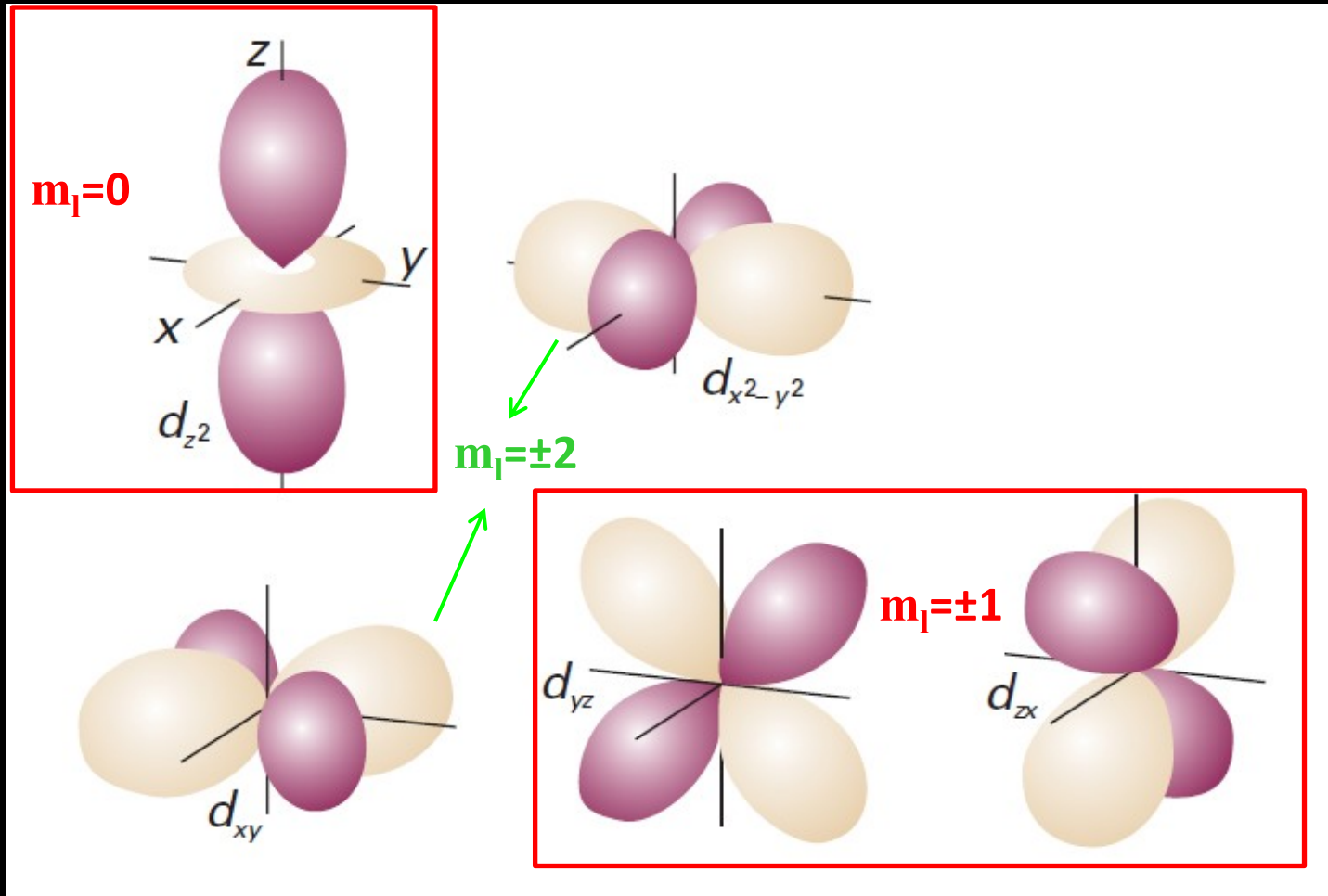


Obr. 9.4 d.
Radiální část vlnové funkce
pro orbital 2p vodíku.



Obr. 9.4 f.
Radiální část vlnové funkce pro
orbital 3d vodíku.

Orbitaly d - radiální a úhlová část dohromady

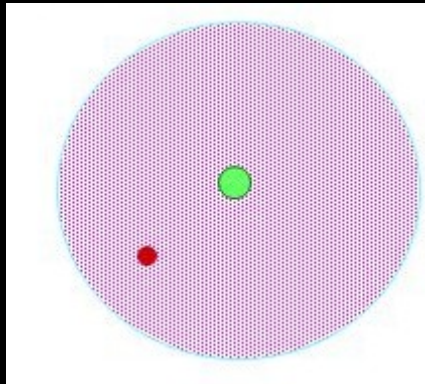


Obr. 9.16 Plochy konstantní hustoty pravděpodobnosti pro orbitaly d

9.2 Struktura víceelektronových atomů

9.2.1 Orbitální aproximace

Vybraný e^-
interaguje
s časově
zprůměrovanou
hustotou
ostatních e^-



Skutečnost:

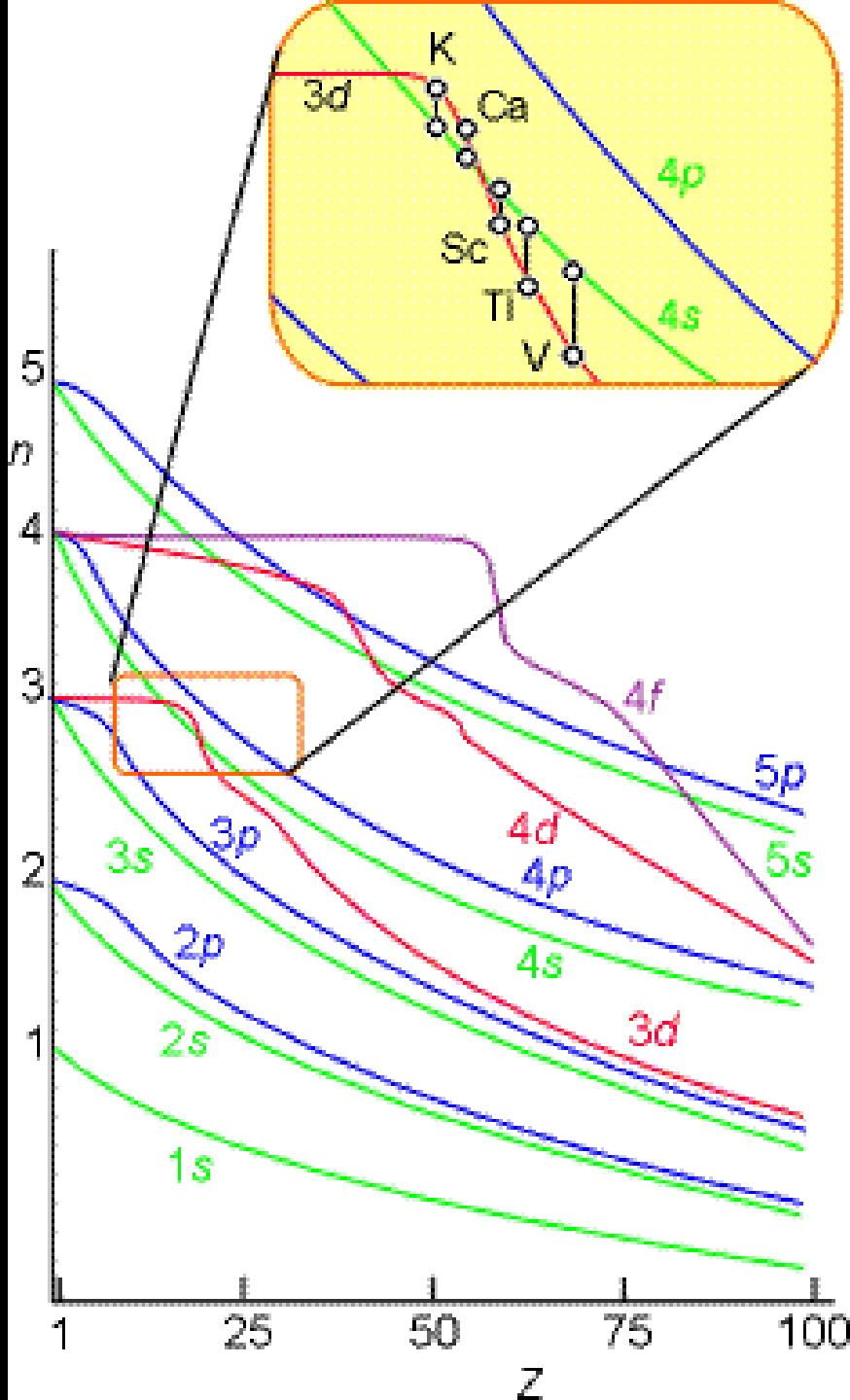


Znevýhodnění

Zvýhodnění

Rovnici 9.26 ani Odůvodnění 9.5. nepožadují

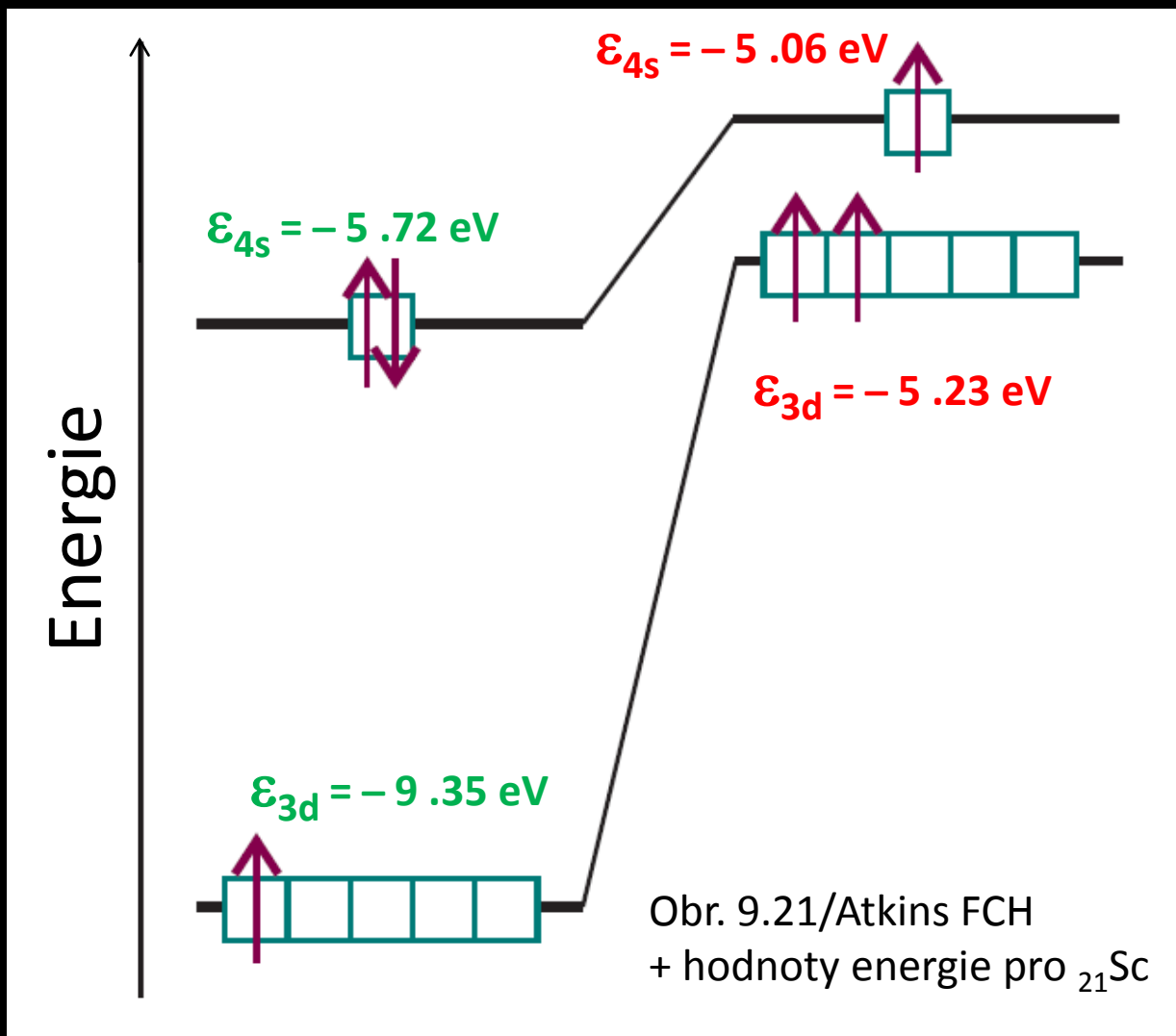
Elektronové konfigurace Sc ... Zn



Orbitální energie vs. Z pro
neutronnými atomy.

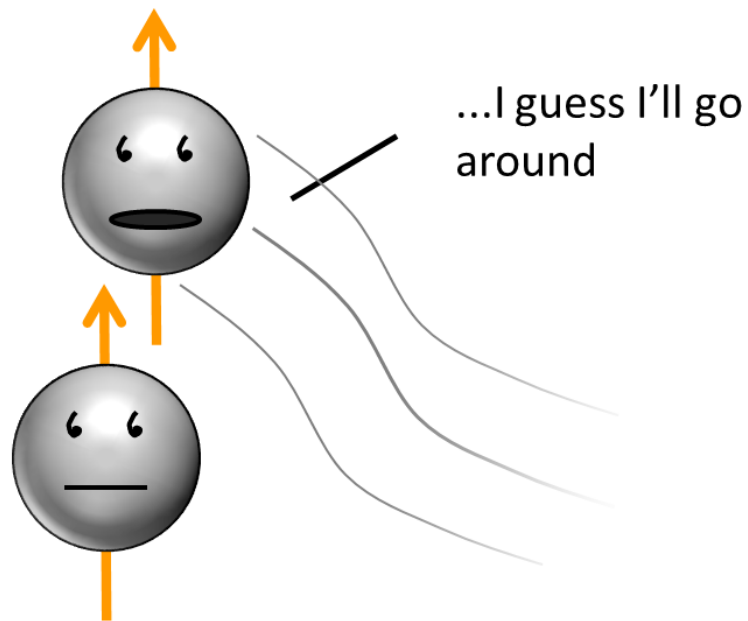
Obrázek mimo Atkinse
[ChemWiki], nevyžadován
ke zkoušce.

Energie AO pro $_{21}\text{Sc}$ v závislosti na jejich obsazení

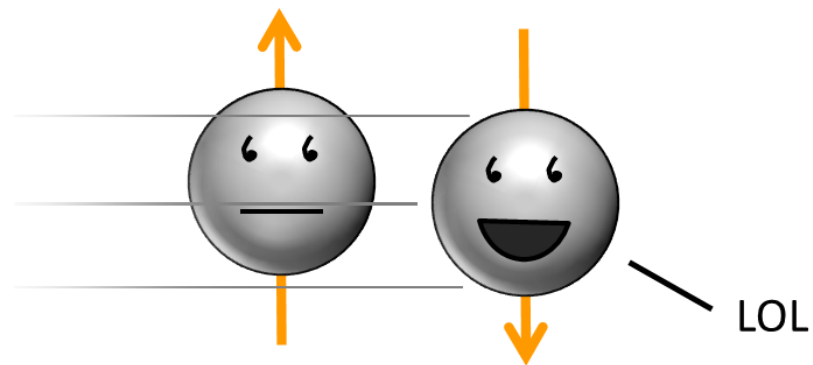


Výměnná interakce

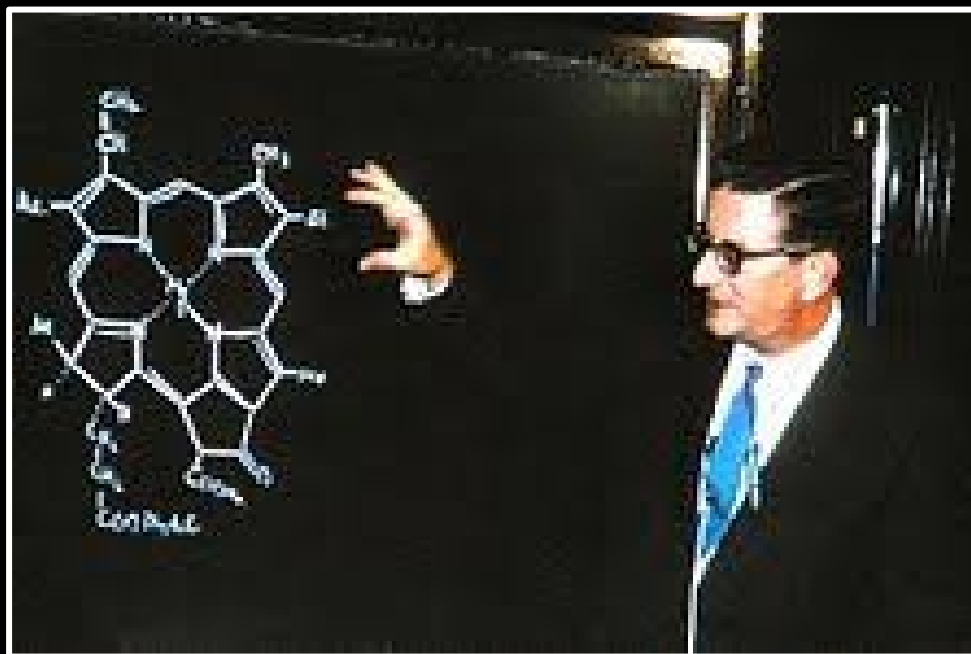
Same spin:



Opposite spin:

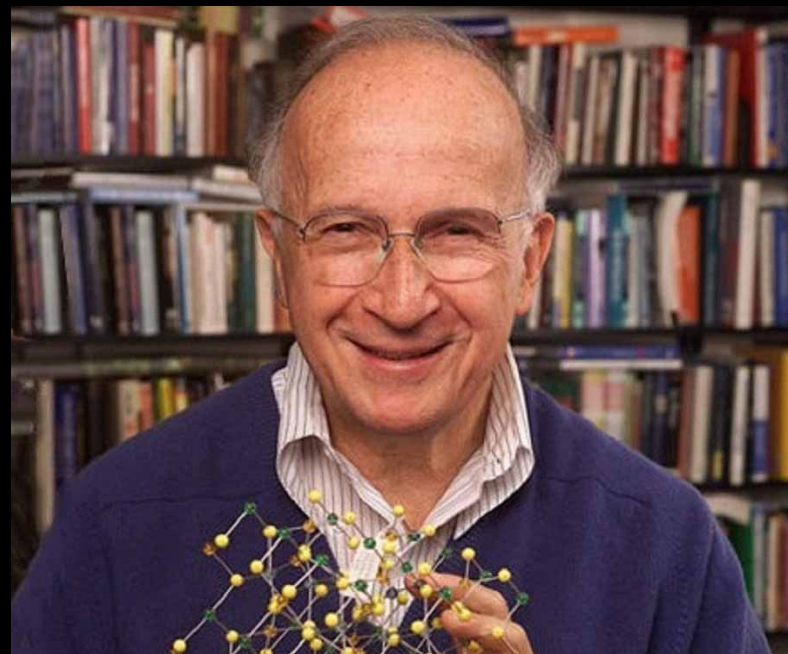


R. B. Woodward, 1917-1979



US organický CH.
Nobelova cena za CH 1965:
za mimořádný přínos umění organické syntézy.

R. Hoffmann, * 1937



US teoretický CH polského původu.
Nobelova cena za CH 1981:
za průkopnické teorie CH reaktivity.

Woodward-Hoffmannova pravidla pro pericyklické reakce:

O reaktivitě rozhoduje **SYMETRIE** molekulových orbitalů.

5. přednáška, 2. část

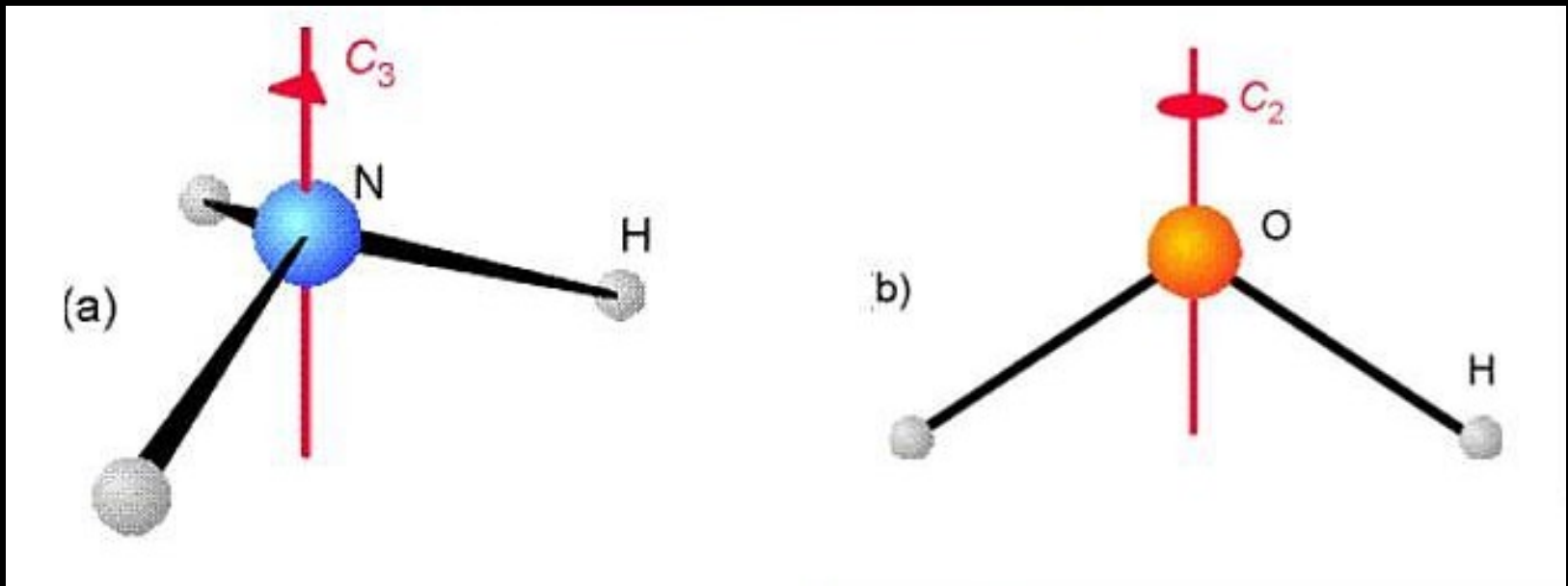
Symetrie molekul

Atkins: Kapitola 11

(až po ní bude následovat Kapitola 10

„Struktura molekul“ – kvůli využití symetrie)

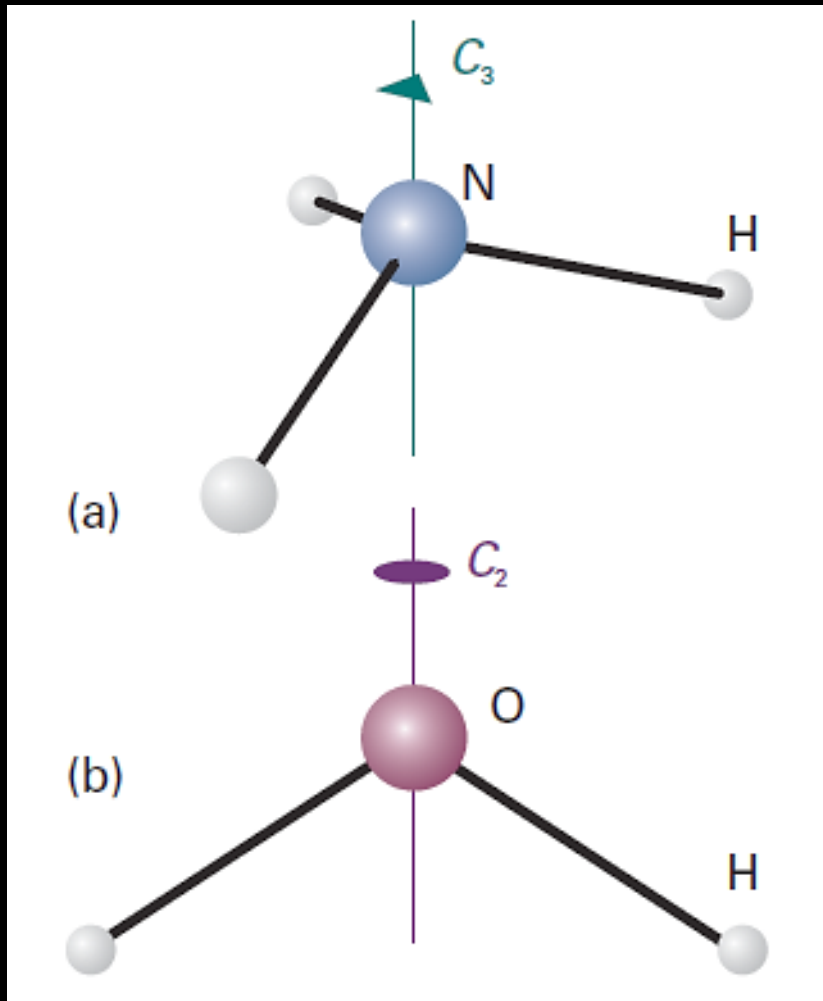
11.1+11.1.1 Prvky a operace symetrie



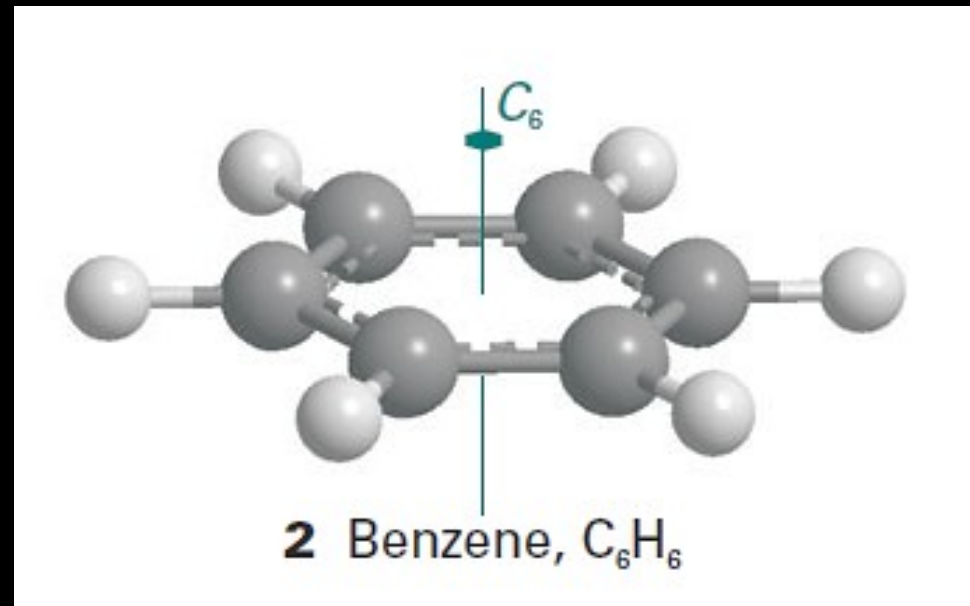
Která z molekul má vyšší rotační symetrii?

11.1.1.1 Notace

a. n-četná rotace, n-četná rotační osa, identita



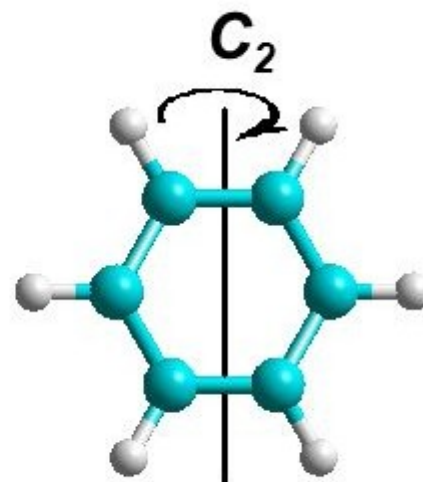
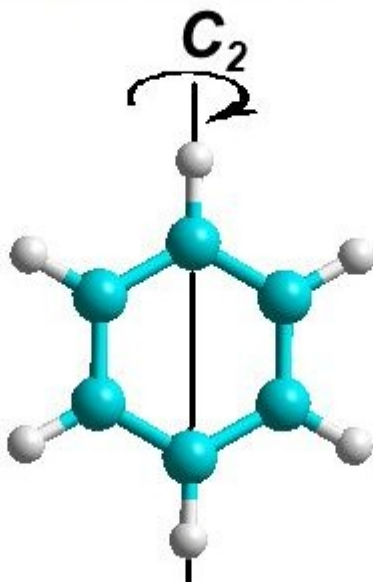
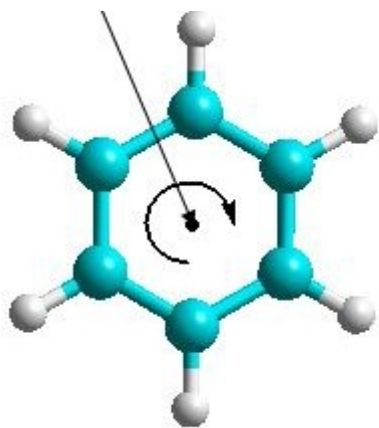
Atkins, Obr. 11.2



Atkins, Obr. na str. 388 dole

Osy symetrie molekuly benzenu

C_6
= hlavní osa symetrie



*Jaká další shodná zobrazení v prostoru
známe z M ?*

b. Zrcadlení (reflexe) vůči rovině symetrie

