

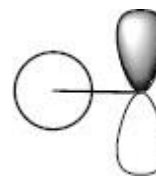
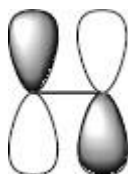
## MOLEKULOVÉ ORBITALY

### Úkol č. 8. 1

Do souřadného systému znázorníte izoplochy příslušející AO s, p a d. Jaká je degenerace těchto orbitalů, nejsou-li ve vázaném stavu?

### Úkol č. 8. 2

Určete, v jakém případě se jedná o kladný ( $S > 0$ ), záporný ( $S < 0$ ), případně nulový překryv ( $S = 0$ )?



### Úkol č. 8. 3

Určete, jaké MO vzniknou (tj.  $\sigma$  nebo  $\pi$ ), 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 a) 2 identické orbitaly s na různých centrech, b) orbital s na jednom centru a orbital p na druhém centru tak, že laloky orbitalu p leží na spojnici jader, c) 2 identické orbitaly p na různých centrech tak, že laloky obou orbitalů p leží na spojnici jader, d) 2 identické orbitaly p na různých centrech tak, že laloky obou orbitalů p jsou lokalizovány kolmo ke spojnici jader.

### Úkol č. 8. 4

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. Následně Interakční diagram upravte pro kation  $H_2^+$  a anion  $H_2^-$ . Doplněte příslušný počet elektronů, napište příslušné elektronové konfigurace a vypočtěte řady vazby. Jak se budou měnit vazebné délky a disociační energie? Interakční diagram upravte pro molekulu  $He_2$  a  $He_2^+$ . Doplněte příslušný počet elektronů, napište příslušné elektronové konfigurace a vypočtěte řady vazby. Jak se v případě kationtu změní vazebná délka a disociační energie?

Úkol č. 8. 5

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, vypočítejte 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?

Úkol č. 8. 6

Načrtněte interakční diagram MO pro molekulu  $O_2$ . Určete, jaké MO vzniknou a přiřaďte jim správné nálepky symetrie. Doplněte příslušný počet elektronů, napište elektronovou konfiguraci, vypočítejte řád vazby. Vyznačte hraniční orbitály (HOMO/LUMO). Vypočítejte 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?

Úkol č. 8. 7

Jak se mění řád vazby, vazebná délka a velikost disociační energie směrem od molekuly  $N_2$  k molekule  $Ne_2$ ?

Úkol č. 8. 8

Na obrázku je znázorněn interakční diagram MO pro molekulu NO. Orbitály  $1\sigma$  a  $1\pi$  jsou vazebné, orbitály  $2\pi$  a  $4\sigma$  antivazebné, orbitály  $2\sigma$  a  $3\sigma$  jsou spíše nevazebné. Doplněte elektrony. Vysvětlete, proč je tato molekula v základním stavu radikál. Vypočítejte spinovou multiplicitu. Jak se změní vazebná délka a disociační energie, vytvoříme-li kation a anion?

