**Kvantová chemie, domácí cvičení 10**

**Jméno a příjmení**:

1. Zobrazte energetické křivky molekuly jestliže víte, že v bázi orbitalů 1s jsou maticové elementy *H*ij a *S*ij závislé na vzdálenosti jako:

kde *k* je variační parametr vlnové funkce, který položíme roven 1. Výpočet proveďte pro *R* v rozmezí 1 a 6 a.u. pro alespoň 6 hodnot *R* a vyneste do grafu. Nezapomeňte, že všechny veličiny jsou uváděny v atomových jednotkách. \*\*\*\*Bonus\*\*\* Opakujte výpočet s variační optimalizací parametru *k* v každé geometrii.

1. Jednou z nejjednodušších molekul je molekula HeH+. Není to ion úplně nezajímavý, vyskytuje se v poměrně významném množství v mezihvězdném prostoru a v planetárních mračnech. Vibrační frekvence (resp. vlnočet) této molekuly je 3309 cm-1. Vypočítejte:

(a) Energii nulového bodu této molekuly.

(b) Vibrační vlnočet molekuly 3He2H+.

(c) Odhadněte na základě kvalitativní teorie MO řád vazby v této molekule.

(d) Základní stav této molekuly se vyskytuje ve stavu 1. Jaké jsou možná kvantová čísla ?

(e) \*\*\*Bonus\*\*\* Disociační energie této molekuly má hodnotu 2 eV, rovnovážná vzdálenost této molekuly je 0,77 Å. Jaké jsou parametry Morseho potenciálu pro tuto molekulu? Návod: Vypočítejte druhou derivaci Morseho potenciálu v minimu.

1. Načrtněte energetický diagram molekulových orbitalů pro molekulu CO. Ionizační energie pro příslušné AO jsou: O2s 32,3 eV; O2p 15,5 eV; C2s 19,4 eV; C2p 10,9 eV. Označte jednotlivé MO.