**Kvantová chemie, domácí cvičení 13**

**Jméno a příjmení**:

1. Vypočítejte pomocí Hückelovy metody (HMO, *Hückel Molecular Orbitals*): a) Excitační energii a excitační vlnovou délku benzenu. Uvažujte v tomto případě hodnotu parametru β = 3,48 eV. Srovnejte s experimentální energií první excitační energie benzenu. b) Vypočítejte delokalizační energii benzenu. Uvažujte v tomto případě hodnotu parametru β = 0,8 eV. Srovnejte s „experimentální“ hodnotou danou jako rozdíl trojnásobku hydrogenačních entalpií cyklohexenu a hydrogenační entalpie benzenu. Data nalezněte v tabulkách.
2. Pro allylový radikál ·CH2–CH=CH: a) Zapište v rámci metody HMO sekulární determinant. b) Určete π-elektronové energetické hladiny. c) Vypočítejte delokalizační energii.

1. Odhadněte relativistickou hmotnost elektronu. a) V 1s orbitalu atomu uranu, kde můžeme předpokládat, že elektron „cítí“ náboj Z = 92 b) V 3s orbitalu atomu draslíku, ve kterém je efektivní náboj roven 2,89. Hmotnosti uvádějte jako násobky klidové hmotnosti elektronu.
2. \*\*\*Bonus\*\*\* Vypočítejte v rámci metody HMO: a) excitační energie naftalenu a azulenu. b) Vypočítejte pro azulen náboje na jednotlivých atomech c) Vypočítejte řád vazby na jednotlivých atomech. d) Vypočítejte pro azulen i naftalen delokalizační energii.