

Räkneövning 4 i atomers och molekylers struktur

(11.2.2000)

- Hückelmodellen:** Lös Hückelekvationen för linjärt och ringformigt H_3 . Beteckna de diagonala Hamiltonmatriselementen med α och de icke-diagonala Hamiltonmatriselementen till grannatomerna med β . Övriga Hamiltonmatriselement antas vara lika med noll. Rita energinivådiagrammet och bestäm bindningsenergierna för båda molekylerna.
- Tillämpning av Hückelmodellen:** Beräkna bindningsenergierna som funktion av α och β för ringformigt H_3^{2+} , H_3^+ , H_3 och H_3^- utgående från energinivådiagrammet i föregående uppgift. (Ifall du inte löst föregående uppgift kan du konstruera egna uttryck för systemets egenenergi som funktion av α och β). Bestäm α och β när bindningsenergin för H_3^+ är -849 kJ mol^{-1} och för H_3 är den $-1579 \text{ kJ mol}^{-1}$.
- Hückel modellen:** Prof. Markku Räsänen och medarbetare vid laboratoriet för fysikalisk kemi lyckades i december 1999 skapa den första oladdade stabila molekyl som innehåller argon. Molekylens kemiska betckning är HArF. Förklara kvalitativt dess kemiska bindning med hjälp av Hückel-modellen. Anta att vågfunktionen kan skrivas som $\psi = c_1 p_z(F) + c_2 p_z(Ar) + c_3 s(H)$ samt att $\alpha_F = 0,7 = \alpha_{Ar}$ och att $\alpha_H = 0,5$. De icke-diagonala termerna betecknas β_{ij} . Man kan försumma växelverkningsarna mellan F och H. Lös Hückelproblemet och undersök huruvida grundtillståndet är bindande när $\beta_{ij} = (\alpha_i + \alpha_j)/2$. Notera att antalet elektroner i denna enkla modell är 4.
- H_2^+ :** Potentialkurvan för H_2^+ kan approximativt uttryckas som $E = E_H - \frac{V_1 + V_2}{1 + S} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}$ där E_H är väteatomens energi, medan V_1 och V_2 beskriver den attraktiva växelverkan mellan kärnorna och elektronen, och S är överlappsintegralen. Deras värden som funktion av kärnavståndet är givet i tabellen. Rita potentialenergikurvan och bestäm bindningsavståndet vid jämvikt samt dissociations energin.

R/a_0	0,000	1,000	2,000	3,000	4,000
V_1/R_H	1,000	0,729	0,473	0,330	0,250
V_2/R_H	1,000	0,736	0,406	0,199	0,092
S	1,000	0,858	0,587	0,349	0,189

$R_H = 27,3 \text{ eV}$, $a_0 = 52,9 \text{ pm}$, och $E_H = 0,5 R_H$.
- Elektronkonfiguration:** Vilka av följande molekyler N_2 , NO , O_2 , C_2 , F_2 och CN kan man förvänta sig att stabiliseras genom att a) addera en elektron och bilda AB^- eller b) avlägsna en elektron och bilda AB^+ ?
- Molekylstruktur:** Vilka av följande molekyler kan förväntas vara plana: NH_3 , NH_3^+ , CH_3 , NO_3^- , och CO_3^{2-} . Varför ?