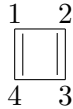


# Chemia kwantowa B – zadania domowe

## Zestaw 12. – odpowiedzi

**Zadanie 1.** Przy użyciu metody Hückla wyznaczyć energie orbitalne cząsteczki cyklobutadienu.

**Rozwizanie 1.** Numerujemy atomy węgla w cząsteczce cyklobutadienu:



a następnie wypisujemy równanie wiekowe:

$$\begin{vmatrix} x_i & 1 & 0 & 1 \\ 1 & x_i & 1 & 0 \\ 0 & 1 & x_i & 1 \\ 1 & 0 & 1 & x_1 \end{vmatrix} = 0. \quad (1)$$

Rozwiązując równanie (1) otrzymujemy

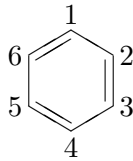
$$\begin{cases} x_1 = -2 \\ x_2 = x_3 = 0 \\ x_4 = 2 \end{cases}, \quad (2)$$

a więc energie orbitali wynoszą

$$\begin{cases} \epsilon_1 = \alpha + 2\beta \\ \epsilon_2 = \epsilon_3 = \alpha \\ \epsilon_4 = \alpha - 2\beta \end{cases}. \quad (3)$$

**Zadanie 2.** (dodatkowe) Przy użyciu metody Hückla wyznaczyć energię wzbudzenia HOMO-LUMO dla cząsteczki benzenu.

**Rozwizanie 2.** Numerujemy atomy węgla w cząsteczce benzenu:



Wypisujemy równanie wiekowe:

$$\begin{vmatrix} x_i & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & x_i & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & x_i & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & x_i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & x_i & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & x_i \end{vmatrix} = 0, \quad (4)$$

skąd otrzymujemy

$$\begin{cases} x_1 = -2 \\ x_2 = x_3 = -1 \\ x_4 = x_5 = 1 \\ x_6 = 2 \end{cases}. \quad (5)$$

Zatem energie orbitali benzenu wynoszą

$$\begin{cases} \epsilon_1 = \alpha + 2\beta \\ \epsilon_2 = \epsilon_3 = \alpha + \beta \\ \epsilon_4 = \epsilon_5 = \alpha - \beta \\ \epsilon_6 = \alpha - 2\beta \end{cases} \quad (6)$$

W cząsteczce benzenu jest sześć elektronów  $\pi$ , zatem w stanie podstawowym zajęte będą trzy orbitale  $\pi$ . Energia orbitali HOMO wynosi więc  $\epsilon_h = \epsilon_2 = \epsilon_3 = \alpha + \beta$ , zaś orbitali LUMO —  $\epsilon_l = \epsilon_4 = \epsilon_5 = \alpha - \beta$ . Energia wzbudzenia HOMO-LUMO wynosi

$$\Delta\epsilon = \epsilon_l - \epsilon_h = -2\beta. \quad (7)$$