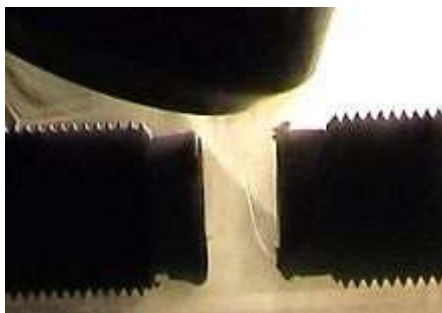


1. Proč má molekula  $O_2$  základní tripletový nikoli singletový stav. Vysvětlete obrázek dole. **Nápověda:** Pro molekuly se stechiometrií  $O_2$  je energie molekulových orbitalů  $\sigma_{2p} < \pi_{2p}$  (u jiných molekul jako  $N_2$ ,  $CN$  je to naopak)



**Obr.** Pramínek tekutého kyslíku je vychylován v magnetickém poli z původního vertikálního směru.

2. Které atomové termy jsou zahrnuté v konfiguracích  $ns^1np^1$ ,  $ns^1nd^1$ . Který z těchto termů má nejnižší energii? Proč?
3. Sestavte Hamiltonián pro benzen? Kolik párových interakcí je třeba uvažovat mezi elektrony?
4. Vysvětlete pojem Fermiho díry. Proč tripletový stav molekuly bývá stabilnější než singletový v případě, že jsou obsazené stejné orbitály?
5. Proč je možné očekávat vznik dimeru  $He_2$  (tzv. excimeru), který vznikne srážkou dvou atomů, z nichž jeden je v základním stavu a druhý v prvním singletovém respektive tripletovém stavu? Vysvětlete? **Bonus:** Který z těchto dimerů – tripletový nebo singletový bude mít delší dobu života? Proč? (bude probíráno v dalších přednáškách).

### Řešení:

1. Základní spinový stav  $O_2$  odpovídá tripletovému spinovému stavu, tj  $S = 1$ , tj. celkový spinový moment hybnosti je nenulový (a tak i celkový moment hybnosti). Nenulový moment hybnosti znamená, že molekula má magnetický dipólový moment, který interaguje s vnějším magnetickým polem.
2. Seřazeno podle rostoucí energie:
  - A)  $^3P_0$  (zahrnuje 1 stav),  $^3P_1$  (zahrnuje 3 podstavy),  $^3P_2$  (zahrnuje 5 podstavů),  $^1P_1$  (zahrnuje 3 podstavy).
  - B)  $^3D_1$  (3 podstavy),  $^3D_2$  (5 podstavů),  $^3D_3$  (7 podstavů),  $^1D_2$  (5 podstavů)

Uvedený počet podstavů rozlišíme energeticky až v magnetickém poli, jinak jsou degenerované.

3. Benzen má 42 elektronů – párových interakcí mezi elektrony je 861.