

*Zbirka problema iz teorije hemijske veze*

**Ivan O. Juranif**

*Profesor hemije, Univerzitet u Beogradu*

**Svetozar R. Niketif**

*Profesor hemije, Univerzitet u Beogradu*

HEMIJSKI FAKULTET

Beograd, 1994

## PITANJA I ZADACI

1. Izračunati energiju (npr. u eV) i impuls fotona sledećih talasnih dužina:
  - 1 nm (X zračenje)
  - 200 nm (ultraljubična oblast)
  - 600 nm (vidljiva oblast spektra)
  - 10 : m (infracrvena oblast spektra)
  - 1 m (mikrotalasi)
  - 10 m (radiotalasi)
  
2. Izračunati de Broglie-ovu talasnu dužinu za:
  - elektron sa kinetičkom energijom 200 eV
  - proton sa kinetičkom energijom od  $10^5$  eV
  - burek bačen brzinom od  $1 \text{ m s}^{-1}$
  - Zemlju koja se kreće u orbiti oko Sunca ( $m_Z = 5,98 \cdot 10^{24} \text{ kg}$ ,  $v_Z = 29,8 \text{ km s}^{-1}$ )
  
3. Izračunati de Broglie-ovu talasnu dužinu:
  - Loptice za golf od 10 g izbačene brzinom od 30 m/s
  - Sporog elektrona sa brzinom od 30 m/s
  - Brzog elektrona sa brzinom od  $2,2 \cdot 10^6 \text{ m/s}$ .
  
4. Talasna dužina svetlosnog zračenja je jednaka:
  - a)  $c/h$ ; b)  $hc$ ; c)  $c/\lambda$ ; d)  $c \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$ ; e)  $cF$ ; f)  $hc$ ;
  - g)  $1/F$ ; h)  $cT$
  
5. „estica mase  $10^{-15} \text{ kg}$ , koja se koristi za ilustraciju kretanja molekula u tečnosti, ima kinetičku energiju od  $6,26 \cdot 10^{-21} \text{ J}$ . Izračunati de Broglie-ovu talasnu dužinu ove „estice i poredite vaš rezultat sa de Broglie-evom talasnom dužinom za: (1) He, (2) proton, (3) elektron sa istom kinetičkom energijom.  $m_{\text{He}} = 4,003$ .

6. Elektron pada kroz razliku potencijala od 13,6 eV. Izračunati de Broglie-ovu talasnu dužinu ove ...estice. Kakve veze ima ovaj odgovor sa atomom H?
7. Energija kojom je vezan elektron u Na je 2,3 eV. Kolika je kinetička energija elektrona, emitovanog ozračivanjem Na, emisionom linijom nive na 253,7 nm?
8. Pokazati da operator impulsa u izrazima  $\int \psi^* \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx$  i  $-i\hbar \int \frac{\partial}{\partial x} \psi^* \psi dx$  nije hermitski (Heremite), (tj. da vrednost izraza zavisi od mesta operatora u izrazu) za slučaj  $R = \exp(ikx)$
9. Naznačite koje su od sledećih funkcija prihvatljive kao talasne funkcije ...estice u atomu ili molekulu. Ako neka od njih nije, navedite razlog.  
 a)  $Q=x$     b)  $Q=x^2$     c)  $Q=\sin x$   
 d)  $Q=e^{ix}$     e)  $Q=\exp(-x^2)$
10. Koji je od sledećih izraza svojstvena (sopstvena) funkcija operatora  $d/dx$  ?  
 a)  $x^2$     b)  $\exp(-3,4x^2)$     c)  $37$     d)  $\exp(x)$   
 e)  $\sin(ax)$     f)  $\cos(ax)+i\sin(4x)$
11. Pokazati koje su od sledećih funkcija:  
 $x^2$ ,  $e^{ax}$ ,  $\sin(x)$ ,  $\cos(x)$ ,  $\exp(ikx)$ ,  $\cos(kx)+i\sin(kx)$   
 sopstvene (svojstvene) funkcije operatora:  
 $x$ ,  $C$  (konstanta),  $d/dx$ ,  $d^2/dx^2$ ,  $x(d/dx)$ ;  
 i koje su sopstvene (svojstvene) vrednosti ?
12. Schrödinger-ova jednačina za ...esticu u jednodimenzionalnoj potencijalnoj jami (dužine  $a$  metara) glasi:  

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] \psi = E \psi$$
  
 Pokazati da  $R=A \sin(Bx)$  predstavlja sopstvenu funkciju. Odrediti konstante  $A$  i  $B$  i naći moguće sopstvene vrednosti.
13. „vorna površina je: - Površina sinusoidalnog kretanja elektrona

- Površina u kojoj je verovatnoća nalaženja elektrona najveća
- Površina u kojoj je verovatnoća nalaženja elektrona jednaka nuli
- Ravan simetrije koja prolazi kroz jezgro.

14. Orbitala je:
- Deo prostora iz kojeg elektron ne može "izaći"
  - Jednoelektronska talasna funkcija
  - Deo prostora (zapremina) definisan Heisenberg-ovim uslovom  $\Delta p \Delta x > h$  (principom neodređenosti)
15. Orbitala atoma vodonika, u kojoj je elektron najbliži jezgru okarakterisana je sledećim (n, l, i m) kvantnim brojevima:
- a) n=1 l=0 m=0
  - b) n=0 l=1 m=0
  - c) n=0 l=0 m=1
  - d) n=1 l=1 m=1
16. Predstaviti ugaoni deo sledećih atomskih orbitala u pravouglom koordinatnom sistemu:
- a) 1s, 2s
  - b)  $2p_x$ ,  $2p_y$ ,  $2p_z$
  - c) Svih pet d orbitala

17. U potpunosti sledeću tablicu

| orbitala                                   | Kvantni brojevi |   |       |
|--|-----------------|---|-------|
|  | n               | l | $m_l$ |
| )) |                 |   |       |
| 2s   |                 | 0 |       |
| ?  | 5               | 1 |       |
| 4d   |                 | 2 |       |
| 5f   |                 |   |       |

18. Nacrtati radijalnu talasnu funkciju, odgovarajuću funkciju verovatnoće i funkciju radijalne raspodele (gustine) za 1s, 2s i 3s stanje atoma vodonika.
19. Ako je raspodela ..estica određena funkcijom  $\sqrt{2\pi} \cdot e^{im\phi}$ , kakva je

verovatnoća da se ona nape na ta...kama 0, B/2, B ? Ako se N menja od 0 do 2B, koja je ukupna verovatnoća nalaženja ...estice u ovoj oblasti?

20. Izračunati elektronsku gustinu na jezgru H u jedinicama: (1) elektron  $\text{bor}^{-3}$ , (2)  $\text{C m}^{-3}$ .
21. Izračunati verovatnoću nalaženja 1s elektrona vodonika u delu prostora u kojem se na osnovu klasičnog modela elektron ne može nalaziti - sa vrednošću  $r$  vešom od  $2a_0$ .
22. Napišite elektronske konfiguracije osnovnog stanja neutralnih atoma sa  $Z = 12, 21, 25, 31, 36, 39, 51, 58, 65, 71, 84, 91, 102, 106$ .
23. Entalpija prve jonizacije atoma Li iznosi  $520 \text{ kJ mol}^{-1}$ . Iz ovog podatka izračunati efektivno naelektrisanje koje deluje na 2s elektron Li. Zašto je ono manje od punog naelektrisanja jezgra,  $3+$  ?
24. Koliko iznosi efektivno naelektrisanje jezgra helijuma, ako prvi jonizacioni potencijal helijuma iznosi  $24,48 \text{ eV}$  ?
25. Izračunati talasnu dužinu zračenja vezanog za prelazak litijuma iz osnovnog u prvo ekscitovano stanje. Kada se elektron nalazi u 2s orbitali, efektivno naelektrisanje jezgra za njega je 1,26; kada se valentni elektron nalazi u 3s orbitali, efektivno naelektrisanje jezgra za njega je 1.
26. Izračunajte talasne dužine sledećih linija u spektru H: (1) treće linije Lyman-ovoj seriji, (2) druge linije u Balmer-ovoj seriji, (3) pete linije u Brackett-ovoj seriji.
27. Objasnite činjenicu da je drugi jonizacioni potencijal kiseonika ( $35,15 \text{ eV}$ ) veši od drugog jonizacionog potencijala fluora ( $34,98 \text{ eV}$ ).
28. Procenite afinitet prema elektronu O i  $\text{O}^{-1}$ . Može li  $\text{O}^{2-}$  postojati u gasnoj fazi? Kakvu interpretaciju možete dati za parametar  $b$  u jednašini  $E(q) = aq + bq^2 + cq^3 + dq^4$ , gde je  $q = n - Z$  ( $n$  je broj elektrona)? ( $a = 1,48$ ;  $b = 1,22$ ;  $c = 0,05$ ;  $d = 0,0003 \text{ /aJ}$ .) ( $\text{aJ} = 10^{-18} \text{ J}$ )

29. Na osnovu podataka iz prethodnog zadatka proceniti ...etvrtu jonizacionu energiju  $O[He](2s^2 2p^4)$ .
30. Razmotrimo jednu odrepenu grupu u periodnom sistemu. Kako *fe* se sa porastom atomskog broja menjati sledefe osobine atoma:
- energija jonizacije .....
  - afinitet prema elektronu .....
  - pre...nik atoma .....
  - elektronegativnost .....
31. Pravila najavljena u prethodnom zadatku imaju izvesne izuzetke. Na primer, hlor ima vefi afinitet prema elektronu nego fluor: 3,61 eV, odnosno 3,45 eV Za0to?

32. Za izra...unavanje jonskih polupre...nika jednovalentnih jona Pauling je predloñio sledefi izraz:

$$R_j = C_n / (Z! S)$$

Gde je  $C_n$  konstanta karakteristi...na za izoelektronske jone,  $Z$  je naelektrisanje jezgra, a  $S$  je konstanta zaklanjanja.

Konstante zaklanjanja za jone ...ije elektronske konfiguracije odgovaraju konfiguracijama plemenitih gasova su:

| Konfiguracija | S     |
|---------------|-------|
| He            | 0,18  |
| Ne            | 8     |
| Ar            | 4,52  |
| Kr            | 10,87 |
| Xe            | 26,83 |
|               | 41,80 |

Izra...unati jonske polupre...nike  $K^+$ ,  $Cl^-$ ,  $Rb^+$  i  $Br^-$ . Mepuatomska rastojanja su: za  $KCl$  0,314 nm i za  $RbBr$  0,343 nm.

33. Jonizacioni potencijali i afiniteti prema elektronu vodonika, kiseonika i fluora su:

|    | H     | O     | F        |
|----|-------|-------|----------|
| JP | 13,60 | 13,62 | 17,42 eV |

AE 0,76 1,47 3,42 eV

Izračunati odgovarajuće Mulliken-ove elektronegativnosti.

34. Tablica daje energije veza vodonika, halogena, halogenovodonika i nekih mepuhalogenskih jedinjenja

| Energije veza u kJ mol <sup>-1</sup> |     |     |     |      |     |
|--------------------------------------|-----|-----|-----|------|-----|
| H <sub>2</sub>                       | 435 | HF  | 565 | ClF  | 255 |
| F <sub>2</sub>                       | 155 | HCl | 431 | BrCl | 218 |
| Cl <sub>2</sub>                      | 243 | HBr | 364 | ICl  | 209 |
| Br <sub>2</sub>                      | 192 | HI  | 339 | IBr  | 176 |
| I <sub>2</sub>                       | 151 |     |     |      |     |

- (a) Izračunati elektronegativnosti, P, halogena iz prve dve kolone energija veza
- (b) Uzevši P<sub>F</sub> iz (a) izračunati nove vrednosti P<sub>halogen</sub>; da li su ovi skupovi vrednosti saglasni?
- (c) Razmotrite moguće razloge za veliku energiju veze molekula vodonika.
35. Na osnovu svog znanja o elektronskoj strukturi elemenata porepati sledeće supstance prema porastu oksidacione sposobnosti:  
He<sup>+</sup>, Cl, P, Na, F
- Porepati sledeće supstance prema porastu redukcionne sposobnosti:  
Cs, Li, C, S, Cl
36. Za intermetalna jedinjenja KNa<sub>2</sub>, CsNa<sub>2</sub>, i CsK<sub>2</sub> je opaženo da imaju sledeće vrednosti d<sub>MM</sub>:

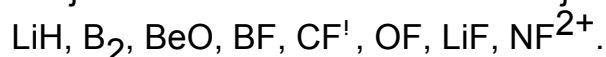
|  |                  |                   |                  |
|--|------------------|-------------------|------------------|
|  | KNa <sub>2</sub> | CsNa <sub>2</sub> | CsK <sub>2</sub> |
| )))))))))))))))))))))))))))))))))))))) Q |                  |                   |                  |
| d <sub>MM</sub> /pm                      | 461              | 487               | 557              |

Metalni poluprečnici su r<sub>Na</sub>=191,1 pm, r<sub>K</sub>=237,9 pm, i r<sub>Cs</sub>=273,4 pm. Nacrtajte dijagram najbližih suseda i odredite udaljenosti najbližih kontakata u ovim jedinjenjima.

37. Napišite elektronske konfiguracije osnovnih stanja C<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, i F<sub>2</sub>. Predvidite

za svaki od ovih molekula uticaj na  $R_e$ , kada se jonizuje elektron iz najviše zauzete molekulske orbitale, ili kada se elektron doda na najnižu nezauzetu molekulsku orbitalu.

38. Niže je data lista dvoatomnih molekula. Urediti molekule po izoelektronskim porodicama i napisati odgovarajuće elektronske konfiguracije za njihova osnovna elektronska stanja:

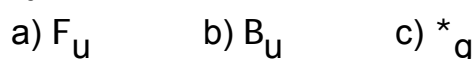


39. Razmotrite jednoelektronski molekularni jon  $\text{HeH}^{2+}$   
 a) Ispisati hamiltonijan za elektronsku energiju u atomskim jedinicama za ovaj sistem.

b) Izračunati elektronske energije najnižih energetske stanja za beskonačno udaljena, i za sjedinjena jezgra (u atomskim jedinicama).

40. Izračunati vrednost gustine preklapanja,  $P_{ab}$ , za molekul  $\text{H}_2$  na tačkama duž z-ose molekula. Uzeti da su koordinate jezgara  $[0, 0, -a_0]$  i  $[0, 0, a_0]$ . Predstaviti grafički zavisnost  $P_{ab}$  od vrednosti koordinate z.

41. Naznačite za svaku od sledećih molekularskih orbitala u homonuklearnom dvoatomnom molekulu da li je vezivna ili antivezivna. Skicirajte svaku od njih:



42. Komentirajte efekat koji ima udaljavanje elektrona iz neke od sledećih molekularskih orbitala  $\text{N}_2$ :  $3F_g$ ,  $1B_u$ ,  $2F_u$ , na  $R_e$  i  $D_e$ .

43. Talasna funkcija za  $1F_g$  stanje molekula  $\text{H}_2$  može se napisati kao linearna kombinacija atomskih orbitala  $N_a$  i  $N_b$ :

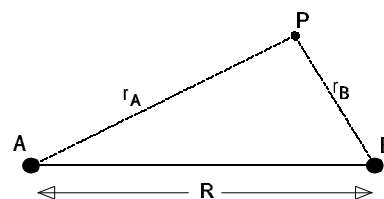
$$R_g = N(N_a + N_b)$$

Izračunati konstantu normiranja, N, uz pretpostavku da je (a)  $S_{ab}=0$  i (b)  $S_{ab}=0,30$ .

44. Napisati hamiltonijane za valentne elektrone kod  $\text{LiH}$  i  $\text{LiH}^+$ . Prodiskutovati razliku između ovih hamiltonijana.



45. Integrali funkcija koje obuhvataju dva atoma se najlakše izraunavaju u eliptičnom koordinatnom sistemu, u kojem se položaj tačke P definiše koordinatama  $(\xi, \eta, \phi)$



$$\xi = (r_A + r_B)R^{-1}; \quad \eta = (r_A - r_B)R^{-1},$$

gde su  $r_A$  i  $r_B$  udaljenosti tačke P od jezgara A i B, a R je rastojanje između jezgara A i B. Azimutalni ugao  $\phi$  definisan je između ravni ABP i proizvoljne ravni kroz AB. Diferencijalni element zapremine u eliptičnom koordinatnom sistemu je:

$$dv = dx dy dz = \frac{R^3}{8} (\xi^2 - \eta^2) d\xi d\eta d\phi$$

a intervali  $\xi, \eta$  i  $\phi$  pri integraciji u celom prostoru su:

$$-1 \leq \xi < 1 \quad -1 \leq \eta \leq 1 \quad 0 \leq \phi < 2\pi$$

Najbolji integral preklapanja  $S_{AB} = \int \psi_A \psi_B dv$  za molekul  $H_2$ .

46. Homonuklearni dvoatomni sistem u osnovnom stanju ima sledeću MO konfiguraciju  $1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 2\sigma_g^2 2\sigma_u^2 1\pi_u^4 3\sigma_g^2 1\pi_g^2$ ;

a) Koliki je ukupan broj vezivnih elektrona?

b) Koji multiplicitet spina očekujete za osnovno stanje?

c) Koji uticaj na disocijacionu energiju ovog molekula očekujete od jonizacije (1) iz  $1\pi_g$  MO? (2) iz  $3\sigma_g$  MO?

d) Koji će biti multiplicitet dobijenog jona nakon jonizacije (jednog elektrona) iz  $1\pi_g$  nivoa?

47. Odrediti koeficijente  $c_A$  i  $c_B$  u izrazu:

$$\psi_{AB} = c_A \psi_A + c_B \psi_B$$

Ako je  $S_{AB} = 0,125$ ;  $H_{AA} = 1,0325$ ;  $H_{BB} = 1,230$ ;  $H_{AB} = 1,0326$

48. Odrediti minimalni bazis atomskih orbitala za molekul HF pomoću kojih treba izraziti molekulsku talasnu funkciju. Energije atomskih orbitala u atomskim jedinicama su:

|    | Li       | F         |
|----|----------|-----------|
| 1s | 1,247774 | 1,2338265 |
| 2s | 1,019632 | 1,157245  |
| 2p |          | 1,072994  |

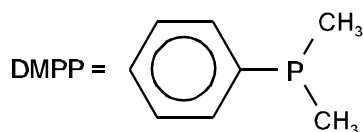
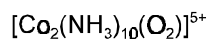
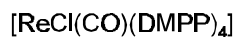
49. Napišite elektronske konfiguracije osnovnog stanja za dvoatomne okside koji sadrže atome od Li do Ne.
50. Niže su navedene  $R_e$  vrednosti za CH radikal u njegovom osnovnom stanju i u ekscitovanom stanju  $CH^*$ , zajedno sa  $R_e$  vrednošću za  $CH^+$  jon.

|  |                       | $R_e$ /pm |
|--|-----------------------|-----------|
| )) Q |                       |           |
| CH   | $1F^2 2F^2 3F^2 1B^1$ | 112,4     |
| $CH^*$                                       | $1F^2 2F^2 3F^1 1B^2$ | 110,3     |
| $CH^+$                                       | $1F^2 2F^2 3F^2$      | 113,1     |
| $(CH^+)^*$                                   | $1F^2 2F^2 3F^1 1B^1$ | 123,4     |

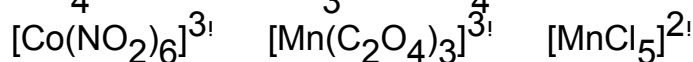
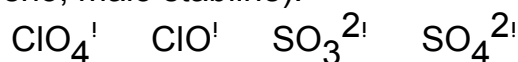
Šta možete zaključiti o vezivnom karakteru  $1B$  i  $3F$  molekulskih orbitala u  $CH$ ?

51. Koji termini odgovaraju sledećim elektronskim konfiguracijama Na:  
 $[Ne](3s^1)$   
 $[Ne](3p^1)$   
 $[Ne](5d^1)$
52. Navedite elektronske konfiguracije sledećih dvoatomnih molekula:  $B_2$ ,  $N_2$ ,  $BN$ ,  $O_2$ , i napišite oznake termina za moguća elektronska stanja.
53. Koja elektronska stanja se javljaju za ekscitovano stanje  $CH$ ,  $1F^2 2F^2 3F^1 1B^2$ ?
54. Bor i azot reaguju na oko  $1200^\circ C$  dajući bor-nitrid, koji ima bruto formulu  $NB$ , a prema rendgenografskim ispitivanjima ima istu strukturu kao i grafit. Dužina  $N-B$  veze je jednaka  $0,145$  nm ( $C-C$  za grafit je  $0,1515$  nm), a udaljenost između slojeva iznosi  $0,335$  nm (kod grafita isto  $0,335$  nm). Pod dejstvom visokog pritiska ovo jedinjenje kristališe kao dijamant. Kako se mogu objasniti ove činjenice?
55. Poznata je izuzetna stabilnost  $ClO_4^-$ , kao i velika stabilnost  $BrO_4^-$  i  $IO_4^-$  jona. Navesti još neke stabilne jone ili molekule sa sličnom konfiguracijom jezgara!

56. Odrediti oksidaciono stanje metala (ili centralnog atoma) u sledećim jonovima i kompleksima:



57. Razvrstajte sledeća jedinjenja i jone na hemijski stabilne i na nestabilne (odnosno, malo stabilne):



Koja pravila olakčavaju ovo razvrstavanje?

58. Da li je pravilo o 18 elektrona poštovano kod: (1) heksakarbonila hroma(0),  $\text{Cr}(\text{CO})_6$ ; (2) tetranitrozil hroma(0),  $\text{Cr}(\text{NO})_4$ ; (3) pentakarbonil mangana(0),  $\text{Mn}(\text{CO})_5$ ?
59. Izračunajte udaljenost između atoma Na i Cl na kojoj je energija jonske i kovalentne strukture biti jednaka. Jonizacioni potencijal Na je 5,138 eV, a afinitet prema elektronu Cl je 3,613 eV.
60. Svaki atom bora ima tri valentna elektrona. Zašto se  $\text{B}_2$  molekul ne drži skupa trostrukom vezom kao  $\text{N}_2$ ?
61. Kakva je geometrija vezivanja oko centralnog atoma u  $\text{CH}_4$ ,  $\text{BF}_3$ ,  $\text{NF}_3$ ,  $\text{ICl}_4^-$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ; a kakva u  $\text{BrO}_3^-$ ,  $\text{CHCl}_3$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ ?
62. Šta su operacije simetrije? Navedite operacije simetrije koje postoje.
63. Šta su elementi simetrije? Navedite elemente simetrije koji postoje. U čemu je razlika između elemenata i operacija simetrije?
64. Odrediti elemente simetrije za molekul formaldehida i proveriti da li operacije simetrije predstavljaju potpunu grupu.
65. Jon  $\text{I}_3^-$  ima simetriju  $\text{C}_{4v}$  kada se nalazi vezan u  $(\text{NH}_4)\text{I}_3$ , a  $\text{D}_{4h}$  simetriju

kada se nalazi vezan u  $\text{Ph}_4\text{AsI}_3$ . U ...emu je razlika između  $\text{I}_3^-$  ionova u ovim jedinjenjima?

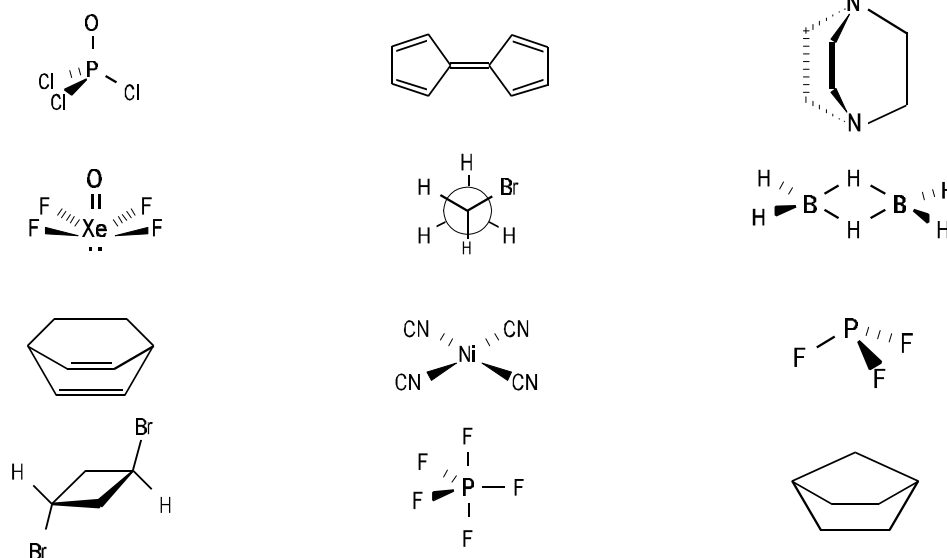
66. Upisati karaktere u tablicu karaktera za  $C_{2h}$  grupu koristeći osnovne funkcije date u desnim kolonama tablice

| $C_{2h}$ | E | $C_2$ | $\sigma$ | $i$ | $F_h$ |
|----------|---|-------|----------|-----|-------|
| $A_g$    |   |       |          |     |       |
| $B_g$    |   |       |          |     |       |
| $A_u$    |   |       |          |     |       |
| $B_u$    |   |       |          |     |       |

|            |                     |  |  |  |              |
|------------|---------------------|--|--|--|--------------|
| $R_z$      | $xy, x^2, y^2, z^2$ |  |  |  |              |
| $R_x, R_y$ | $xz, yz$            |  |  |  |              |
| $z$        |                     |  |  |  | $xyz, z^3$   |
| $x, y$     |                     |  |  |  | $xz^2, yz^2$ |

67. Odrediti grupu simetrije za svaki od sledećih molekula



68. Razložiti svodljiv prikaz [6 0 0] u zbir nesvodljivih prikaza u grupi simetrije  $C_{3v}$ .
69. Napisati direktan proizvod  $E'HE''$  grupe  $D_{3h}$  kao zbir nesvodljivih prikaza.
70. Primenom simetrijskih slika konstruišite skup molekularskih orbitala koje opisuju vezivanje u  $\text{AH}_3$  molekulima. Skicirajte Walsh-ov dijagram za  $\text{AH}_3$  molekule i upotrebite ovaj dijagram da objasnite zašto je  $\text{BH}_3$  planaran, a  $\text{NH}_3$  je trigonalna piramida.

71. Ugao H-O-H je  $104,5^\circ$  za  $\text{H}_2\text{O}$  u osnovnom elektronskom stanju. Napišite hibridne orbitale centrirane na O koje opisuju orbitale slobodnog para na O.  
 Radijalne talasne funkcije za  $2s$  i  $2p$  atomske orbitale na O mogu se aproksimirati orbitalama Slater-ovog tipa,  $R(nl,r) = ((2k)^5/24)^{1/2} \exp(-kr)$  sa  $k(2s)=2,246$ , i  $k(2p)=2,227$ . Koristite orbitalu slobodnog para i za  $r=0, 0,2, 0,4, 0,6, 0,8, 1,2, 1,6, 2,0$  nacrtajte profil elektronske gustine orbitale usamljenog para da bi predstavili variranje elektronske gustine u smeru usamljenog para.
72. Odredite simetrijski prilagopene kombinacije atomskih orbitala vodonika u molekulu acetilena.
73. Sastaviti simetrijski prilagopene kombinacije atomskih orbitala vodonika u molekulu etena (etilena). Eten spada u  $D_{2h}$  grupu simetrije.
74. Napisati potpunu talasnu funkciju atoma berilijuma u vidu Slater-ove determinante.
75. Koja je Lewis-ova formula za: (1) molekulski azot  $\text{N}_2$ , (2) sumpor monoksid  $\text{SO}$ , (3) mepuhalogeno jedinjenje  $\text{ClF}$ ?
76. Koje je formalno naelektrisanje na C i O u  $\text{CO}$ , ugljen monoksidu?
77. Napišite Lewis-ove formule za sledeće molekule: (1)  $\text{PH}_3$ , (2)  $\text{N}_2\text{O}_2$ , (3)  $\text{B}_2\text{H}_6$  i (4)  $[\text{SO}_4]^{2-}$ .
78. Nacrtati moguće prostorne konfiguracije (izomere)  $\text{SF}_4$  molekula. Odrediti najstabilniju strukturu primenom Nyholm-Gillespie-vih pravila i pokazati kako su valentni uglovi F-S-F veza deformisani u odnosu na odgovarajuće "idealizovane" vrednosti.
79. Na osnovu pravila o odbijanju parova valentnih elektrona (VSEPR) predložiti najverovatnije geometrije za: (1)  $\text{OCIF}$ , (2)  $\text{VCIO}_3$ , (3)  $\text{XeO}_3$ , (4)  $\text{F}_3\text{ClO}$ , (5)  $\text{XeF}_6$ .

14

80. Da li jon  $[\text{IF}_3\text{Cl}]^+$  ima dipolni momenat?

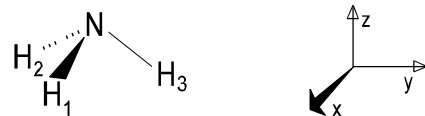
81. Za deformisani  $\text{H}_2$  molekul, kod koga se veze nalaze pod uglom od  $120^\circ$ , mogu se napisati sledeće talasne funkcije za dve orbitale najniže energije (za valentne elektrone):

$$\psi_1 = \frac{1}{2}[2s_{\text{O}} + 2p_{z\text{O}} + (1s_{\text{H}} + 1s_{\text{H}'})]$$

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}[2p_{y\text{O}} + (1s_{\text{H}} - 1s_{\text{H}'})]$$

Napišite njihove ekvivalentne orbitale i odredite u kom delu molekula su one lokalizovane.

82. Ovde su navedene N-H vezivne molekulske orbitale za  $\text{NH}_3$ . Kakve su ekvivalentne orbitale?



$$R_1 = 0,76(2s) + 0,16(2p_z) + 0,27(H_0)$$

$$R_2 = 0,62(2p_x) + 0,49(H_x)$$

$$R_3 = 0,62(2p_y) + 0,49(H_y)$$

gde je:

$$H_0 = (1/3)^{1/2}(h_1 + h_2 + h_3)$$

$$H_x = (1/6)^{1/2}(2h_1 - h_2 - h_3)$$

$$H_y = (1/2)^{1/2}(h_2 - h_3)$$

83. Izvedite Hückel-ov račun za  $\text{H}_2$  i za  $\text{H}_3$  sa jezgama u vrhovima jednakostraničnog trougla. Da li se može očekivati da  $\text{H}_3$  bude stabilan?

84. Ponoviti račun iz prethodnog problema uz uključivanje preklapanja. Da li uključivanje preklapanja menja vaše zaključke u pogledu stabilnosti  $\text{H}_3$ ?  
Uputstvo: Kod rešavanja sekularnih jednačina uvedite novu varijablu  $x$  datu sa

$$x = \frac{\alpha - E}{\beta - SE}$$

gde je  $S$  integral preklapanja.

85. Primenom Hückel-ove metode odredite da li je stabilnija linearna ili

trouglasta konfiguracija  $H_3$ ,  $H_3^+$ , i  $H_3^-$ .



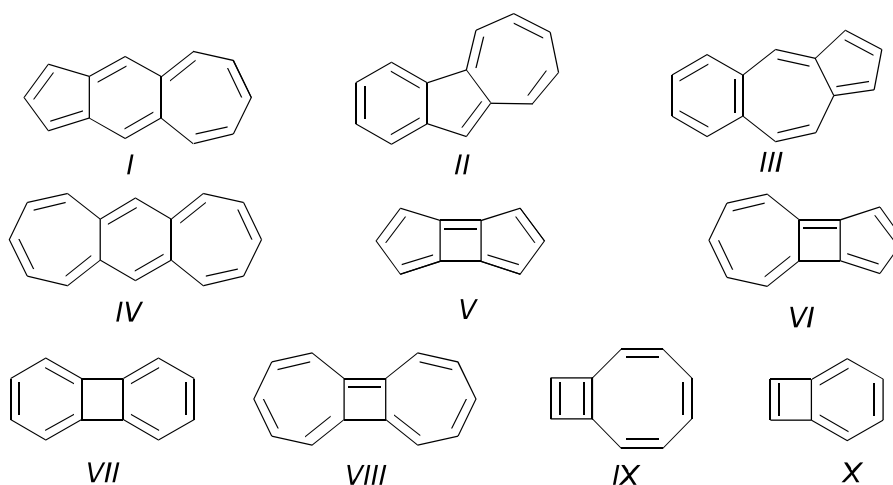
86. Primenom Hückel-ove molekulske-orbitalne metode izračunati energije B-molekulskih orbitala za sledeće molekule:



Za heterociklični sistem uzeti da je

$$\begin{aligned} \alpha_N &= \alpha_C + 0,58\beta_{C,C} \\ \beta_{C,N} &= 0,88\beta_{C,C} \end{aligned}$$

87. Izračunati red veze u molekulu ciklobutadiena. (Nastavak prethodnog zadatka.)
88. Uzeti kao referentnu strukturu dve dvogube veze etilena i izračunati rezonancionu energiju ciklobutadiena.
89. Izračunati sve B-elektronske redove veza u butadienu.
90. Za koji od sledećih ugljovodonika očekujete da su aromatični? U slučaju aromatičnih ugljovodonika, koliko je aromatičnih prstenova zaista prisutno?

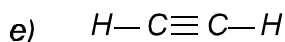
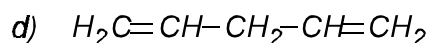
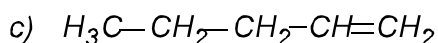
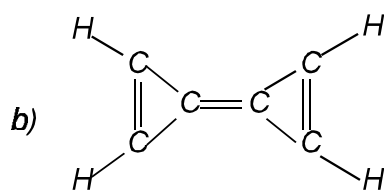
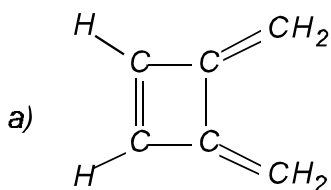


16

91. Odredite B-energetske nivoe za tetrametilen ciklobutan, primenom HMO. Izraunajte energije prvog elektronskog prelaza i energiju konjugacije. Odredite talasne funkcije koje su zauzete elektronima u osnovnom stanju, a odatle i B-elektronske redove veza, kao i raspodelu B-elektronske gustine.

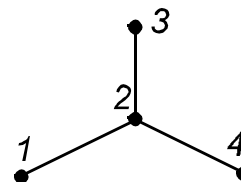
92. Primenom Hückel-ove teorije izraunati raspored naelektrisanja kod alil katjona,  $(\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2)^+$ .

93. Sastaviti HMO determinante za svaki od sledećih molekula:



94. Sastavite i rešite Hückel-ove determinantne jednačine za 2-alilmetil (takode se zove trimetilenmetan). Prikažite energetske nivoe orbitala i naznačite elektronsku konfiguraciju za neutralno osnovno stanje. Izraunajte  $E_B$ . Napite koeficijente za sve MO.

(Proverite da li su sve MO ortogonalne.) Izraunajte gustine naelektrisanja i redove veza.



95. Pretpostavimo da su dve molekulske orbitale sledećeg oblika:

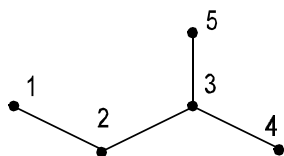
$$\phi_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}x_1 + \frac{1}{\sqrt{3}}x_2 + \frac{1}{\sqrt{3}}x_3,$$

$$\phi_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}x_3 + \frac{1}{\sqrt{3}}x_4 + \frac{1}{\sqrt{3}}x_5,$$

gde su P vef ortonormirane AO. Proverite koliko je preklapanje izmepu ovih MO.



96. Koja je Hückel-ova energija za sledeću molekulsku orbitalu? (Pretpostavimo da su svi centri ugljenici.)

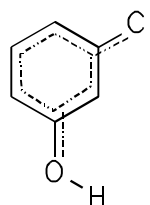
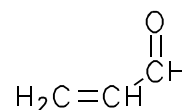
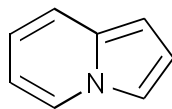
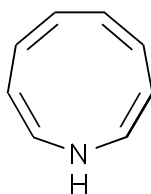


|       |       |       |                      |                       |
|-------|-------|-------|----------------------|-----------------------|
| $c_1$ | $c_2$ | $c_3$ | $c_4$                | $c_5$                 |
| $0$   | $0$   | $0$   | $\frac{1}{\sqrt{2}}$ | $-\frac{1}{\sqrt{2}}$ |

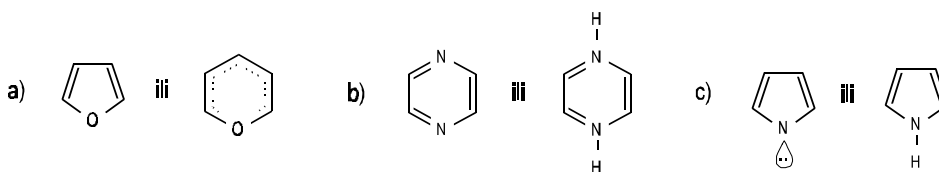
97. Kada molekul  $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{O}$  apsorbuje svetlost odredene frekvence, elektron iz usamljenog para na kiseoniku (označen sa  $n$  kao 'nevezivan') se podigne u najnižu praznu BMO molekula (označena sa  $B^*$ , otuda i  $n \rightarrow B^*$  prelaz). Uz pretpostavku da su MO ovog molekula iste kao one u butadienu, koja od  $\text{C}-\text{C}$  veza bi trebalo da se izduži, a koja da se skрати zbog ovakvog elektronskog prelaza? Izračunajte odgovarajuće promene u dužini veza koristeći podatke za butadien. (Opaženo:  $\text{C}-\text{C}$  veza u  $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{O}$  je +5 pm, a u  $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$  je -4 pm).

98. Odrediti vrednost integrala  $\beta$  u Hückel-ovoj teoriji za slučaj etilena i butadiena. Izmerena energija energetski najnižeg spektralnog prelaza elektrona (u UV spektru) iznosi za etilen  $742 \text{ kJ mol}^{-1}$ , a za butadien  $550 \text{ kJ mol}^{-1}$ .

99. Koliko  $\pi$ -elektrona ima u svakom od sledećih neutralnih molekula?



100. Zamena ugljenika azotom u benzenu menja HMO energetske nivoe, ali ne drastično. Zato se stabilnost molekula piridina sa šest  $\pi$ -elektrona može objasniti  $4n+2$  pravilom. Za koji član od sledećih parova bi odgovarali da bude stabilan na osnovu takvih argumenata.



101. Nacrtajte strukture tri ugljovodonika: (1) fenantrena  $C_{14}H_{10}$ , (2) benzo[a]pirena  $C_{20}H_{12}$ , (3) terfenilena  $C_{22}H_{12}$ . Komentarišite primenu pravila o  $(4n+2)$  B elektrona u svakom od slu...ajeva.

102. Pretpostavite da vinil amin ima planarnu strukturu. Odredite energije B nivoa; B-elektronske redove veza i energiju konjugacije azota sa dvostrukom vezom.

Primenite sledeće parametre:

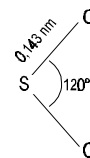
$$\alpha_N = \alpha + 1,48; \alpha_C = \alpha; \beta_{CN} = 0,68; \beta_{CC} = 8$$

U kiselj sredini vinil amin vezuje proton. Odredite ra...unom položaj napada i opišite dobijeno jedinjenje.

103. Primenom teoreme sparivanja nivoa kod alternantnih ugljovodonika odrediti koeficijente za nevezivnu orbitalu kod ciklopentadienila.

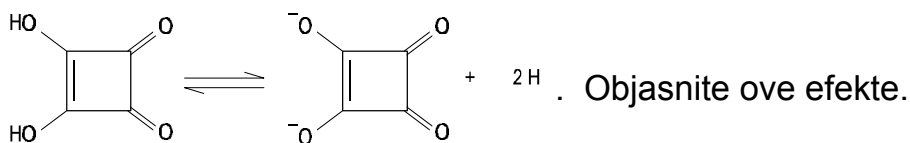
104. Za molekul pirola u osnovnom stanju odredite u okviru Hückel-ove metode:  
a) Sekularne jedna...ine, energetske nivoe i talasne funkcije. b) Raspodelu B-elektronske gustine i B redove veza. c) Indekse slobodne valentnosti i reaktivnost.

105. Primenom Hückel-ove molekulske-orbitalne teorije izra...unati energije B orbitala, odgovarajuće talasne funkcije, i dipolni momenat za molekul  $SO_2$ :



Ako za osnovu uzmemo kiseonik, onda je  $\alpha_S = \alpha + \beta_{SO}$  !  $\beta_{SO} = 8$

106. Kvadratna kiselina disosuje direktno do dianjona i ja...a je kiselina od sumporne



107. Primenite HMO za izračunavanje osobina:

- a) formaldehida;  $\chi_{\text{O}} = +0,78$ ;  $\chi_{\text{C}} = +0,28$ ;  $\delta_{\text{C}_1\text{O}} = 1,18$ ;
- b) glioksala;  $\chi_{\text{O}} = +0,78$ ;  $\chi_{\text{C}} = +0,28$ ;  $\delta_{\text{C}_1\text{O}} = 1,18$ ;  $\delta_{\text{C}_1\text{C}} = 0,58$ ;
- c) formijatnog jona;  $\chi_{\text{C}} = -0,78$ ;  $\chi_{\text{O}} = -0,68$ ;  $\delta_{\text{CO}} = 0,98$ ;
- d) oksalatnog dianjona;  $\chi_{\text{O}} = +0,18$ ;  $\chi_{\text{C}} =$ ;  $\delta_{\text{CO}} = 8$ ;  $\delta_{\text{CC}} = 0,68$ .

Odredite talasne funkcije molekula, raspodelu B-elektronske gustine i ...istih naelektrisanja u osnovnom stanju. Postoji li saglasnost između dobijenih rezultata i vrednosti upotrebljenih parametara? Izračunajte red veze C-C u oksalatnom dianjonu.

108. Koliko se molekularnih orbitala dobija EHT izračunavanjem za butadien?

109. Izračunati ukupan broj energetskih stanja potrebnih za smeštanje valentnih elektrona u  $1 \text{ cm}^3$  srebra.

110. Po čemu se metalna veza razlikuje od pravih kovalentnih i jonskih veza?

111. Objasnite zašto metalna veza nije usmerena. Kako to utiče na strukturni raspored atoma?

112. Objasnite tečljivost metala nasuprot krutosti stakla.

113. Izračunati jaz između traka u polietenu u kome su dužine veza naizmenično  $0,140$  i  $0,146 \text{ nm}$ .

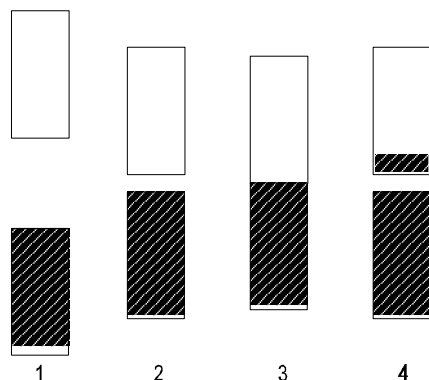
(Poslušajte se 8-vrednostima izračunatim na osnovu podatka da je  $\epsilon = 672 \text{ kJ mol}^{-1}$  za dužinu veze  $0,134 \text{ nm}$ , uz pretpostavku da interakcija opada eksponencijalno sa udaljenošću izraženom u atomskim jedinicama.)

114. Razmotrite sledeće supstance u ...vrstom stanju:



Koje od njih provode elektri...nu struju?

115. Šta predstavlja svaki od dole navedenih parova pravougaonika, na osnovu modela traka za metale i ...vrsta tela?



Svaki broj odgovara jednom od sledećih tipova ...vrstih tela:

- dobar provodnik
- poluprovodnik
- izolator

116. Objasnite zašto je jon  $[\text{Co}(\text{NO}_2)_6]^{3+}$  oktaedarski i ima sparene elektrone, a  $\text{Cu}(\text{ii})$  kompleksni jon  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$  je kvadratno planaran i ima nesporene elektrone.
117. Da li je veza  $\text{Fe}-\text{C}$  verovatnija od veze  $\text{Fe}-\text{N}$  u jonu  $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$ ? Zašto?
118. Razmatrajuci kompleksni jon  $[\text{PtCl}_4]^{2-}$ , šta se moze reci o interakciji između  $5d_z^2$  orbitale platine i  $3p$  orbitala sa koordinirajućih  $\text{Cl}^-$  jonova?
119. Ispisite elektronske konfiguracije ligandnog polja za  $d$  elektrone sledećih molekula: (1)  $[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$ , (2)  $[\text{Ni}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$ , (3)  $[\text{CoCl}_4]^{2-}$ , (4)  $[\text{FeO}_4]^{2-}$ , (5)  $[\text{IrCl}_6]^{3-}$ , (6)  $[\text{MnO}_4]^-$ , (7)  $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ , (8)  $[\text{PtBr}_6]^{2-}$ , (9)  $[\text{Ru}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$ , (10)  $[\text{Cr}(\text{C}_2\text{O}_4)_3]^{3-}$ , (11)  $[\text{NiCl}_2\{\text{P}(\text{C}_6\text{H}_5)_3\}_2]$ .
120. Za koje od sledećih molekula predviđate da će pokazivati Jahn-Teller-ovu distorziju? (1)  $\text{V}(\text{CO})_6$ , (2)  $\text{ReF}_6$ , (3)  $[\text{Mo}(\text{CN})_8]^{4-}$ , (4)  $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ , (5)  $\text{VCl}_4$ ?

121. Nacrtati korelacioni dijagram za tetraedarski  $d^2 ML_4$  kompleks. Redosled orbitala metala je  $e < t_2$ . (Poslušite se tablicama karaktera, direktinih proizvoda i korelacionih tablica tetraedarske grupe simetrije,  $T_d$ .)

122. Molekulsko orbitalna izračunavanja daju sledeće naseljenosti elektronima za  $[Co(CN)_6]^{3-}$ :

Co  $1s^{1,96} 2s^{1,99} 2p^{5,94} 3s^{1,99} 3p^{5,99} 3d^{1,04} 3d^{5,89}$   
 $4s^{0,24} 4p^{0,67}$

C u  $CN^+$   $1s^{1,99} 2s^{1,86} 2p_F^{1,17} 2p_B^{1,53}$

C u  $[Co(CN)_6]^{3-}$   $1s^{1,99} 2s^{1,56} 2p_F^{1,17} 2p_B^{1,62}$

N u  $CN^+$   $1s^{1,99} 2s^{1,64} 2p_F^{1,35} 2p_B^{2,47}$

N u  $[Co(CN)_6]^{3-}$   $1s^{1,99} 2s^{1,62} 2p_F^{1,34} 2p_B^{2,43}$

Dajte interpretaciju ovih naseljenosti.

123. Skicirati molekulsko-orbitalni dijagram energetske nivoa za tetraedarski  $d^8 ML_4$  kompleks, uzimajući u obzir samo F-orbitale na ligandima.

124. Napisati Heitler-London-ovu funkciju  $BeH_2$  i izvesti valentno stanje Be.

125. Pokazati da  $sp$  orbitale ...ine ortonormiran skup.

126. Date su dve ortogonalne hibridne orbitale koje nisu normirane:

$$Q_1 = s + 8p \quad Q_2 = s + *p$$

Normirati orbitale i naći vrednost koeficijenta 8 i \* tako da orbitale budu ekvivalentne i usmerene u suprotnim smerovima.

127. Integral preklapanja između vodonikove  $1s$  orbitale i ugljenikove  $2s$  orbitale udaljene za dužinu  $C-H$  veze je 0,57, a između vodonikove  $1s$  i  $2p_z$  ugljenika (uzevši  $C-H$  kao  $z$  osu) je 0,46. Koliki su integrali preklapanja između vodonikove  $1s$  i ugljenikovih  $sp$ ,  $sp^2$  i  $sp^3$  hibridnih orbitala usmerenih duž  $z$  ose? Kako se ovi rezultati mogu dovesti u vezu sa konstantama istezanja  $C-H$  veze u sledećim molekulima:

$$k = \begin{matrix} HC/CH & H_2C=CH_2 & CH_4 \\ 5,85 & 5,10 & 4,79 \end{matrix} \text{ Ncm}^{-1}$$

128. Metil radikal je planaran. Kog tipa su njegove orbitale i kako je rasporepen nespareni elektron?
129. Kako se menja hibridizacija ugljenikovih atoma u prstenu kada se benzol hidrogenizacijom prevede u cikloheksan.
130. Kakva je hibridizacija ugljenikovih atoma i delokalizacija elektrona u sledećim jedinjenjima:  
 $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$      $\text{CH}_2=\text{C}(\text{CH}_3)-\text{CH}=\text{CH}_2$      $\text{CH}_3-\text{C}(\text{CH}_3)=\text{CH}-\text{CH}_2$
131. Napisati valentno-vezivne strukture za amidnu grupu  $\text{C}(=\text{O})\text{NH}_2$  i molekul vinil-hlorida  $\text{CH}_2=\text{CHCl}$ .
132. Kakav je izraz za energiju  $\text{H}_2\text{O}$  u 0-temperaturi savršenog sparivanja?
133. Posmatrajte molekul litijum hidrida kao da se sastoji od dva valentna elektrona koji se kreću oko dva tačkasta naelektrisanja,  $\text{Li}^+$  srži i golog protona. Predložite talasne funkcije MO i VB tipa za opisivanje elektronskog para u vezi. Po čemu se razlikovati važe talasne funkcije od onih za homopolarnu vezu (npr.  $\text{H}_2$ ), i kako se u njima može uočiti polarni karakter veze?
134. Talasna funkcija za halogenovodonik,  $\text{HX}$ , u aproksimaciji metode valentne veze, ima oblik:  

$$Q = N[\text{R}(\text{H}) + \text{R}(\text{X}) + \text{R}(\text{H}^+\text{X}^-)]$$
Izračunati procenat jonskog karaktera veze,  $P = 100(8^2)/(1+8^2)$ , koristeći sledeće podatke:
- |              | HF    | HCl   | HBr   | HI    |
|--------------|-------|-------|-------|-------|
| $\Delta$ (D) | 1,82  | 1,03  | 0,83  | 0,45  |
| R(nm)        | 0,092 | 0,127 | 0,141 | 0,161 |
135. Kako očekujete da se menjati koeficijenti kovalentne i jonskih struktura u VB funkciji za LiH pri udaljavanju atoma? Kako bi se menjali pri istom postupku sa HF?

136. Energija hidrogenizacije butadiena u butan je  $84,7 \text{ kJ mol}^{-1}$ , dok je za buten jednaka  $50,0 \text{ kJ mol}^{-1}$ . Izračunati rezonancionu energiju butadiena.
137. Molekul  $\text{B}_3\text{H}_9$  nije do sada napravljen. Je li verovatno da je on stabilan?
138. Šta označava termin "elektron deficitarni molekuli"?
139. Zašto se struktura molekula  $\text{B}_2\text{H}_6$  razlikuje od strukture  $\text{C}_2\text{H}_6$ ? Nacrtajte strukturu koju ima molekul  $\text{B}_2\text{H}_6$ , i opišite prirodu dva tipa B-H veza u njoj.
140. Koji faktori odrepuju veličinu međumolekulskih sila? Dati primere.
141. Jonizaciona energija atoma H je  $2,18 \text{ aJ}$ , a zapremina polarizabilnosti ( $\alpha/\text{Å}^3$ ) =  $0,6668 \times 10^{-30} \text{ m}^3$ . Izračunati London-ovu disperzionu energiju po molu na  $R=265 \text{ pm}$  koristeći London-ovu formulu. Koliko se dobro vaš rezultat slaže sa tačnom vrednošću,  $1082 \text{ J/mol}$ ?
142. Za He je energija interakcije indukovanih dipola definisana sa (u atomskim jedinicama)  $E = 1,471/R^6$ . Uporedi interakcije dugog dometa između dva atoma He sa onom za dva atoma H na  $R=8$  borovih poluprečnika.
143. Po čemu su van der Waals-ove veze nalik na metalnu vezu?
144. Zašto su van der Waals-ovi poluprečnici veći od kovalentnih poluprečnika?
145. Šta mislite, zašto se vrednost  $n$  u izrazu za Born-ovu energiju odbijanja može izvesti iz podataka o stižljivosti?
146. Objasnite zašto je dietiletar,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_3$ , polaran. Ako se uzme da su uglovi veza C-O-C u etru i H-O-H u vodi približno jednaki, koja je od ove dve supstance imati veći dipolni momenat?
147. Koji od sledećih molekula imaju znatan dipolni momenat:  
 $\text{CH}_4$ ,  $\text{CH}_3\text{Cl}$ ,  $\text{CCl}_4$  i  $\text{H}_2\text{O}$  ?  
 Označite ih i navesti razloge za to.

148. Postoje tri dihalorobenzena. Pridružite po jedan od sledećih dipolnih momenata svakom od njih.  
 : = 2,25    1,48    0    Debaja
149. Izračunati energiju interakcije dva paralelna dipolarna molekula udaljena 1,0 nm. Pretpostavite da svaki ima dipolni moment veličine  $2 \cdot 10^{-30}$  C m.
150. Kolike su jačine polja kojima su podvrgnuti atomi i molekuli? Neka se molekul vode ( $\mu = 1,84$  D) približava jonu. Koja je najpovoljnija orijentacija molekula kada je taj jon anjon? Izračunati električno polje koje oseća jon kada se centar dipola vode nalazi na (a) 1,0 nm, (b) 0,3 nm, (c) 30 nm od njega. Izraziti odgovor u  $V \cdot m^{-1}$ .
151. U gasnoj fazi litijum-fluorid obrazuje planarni dimer. Procenite energiju dimerizacije po molu dimera pri sledećim uslovima: Rastojanje Li-F u dimeru i monomeru je isto i jednako je 0,155 nm. Uzeti u obzir samo elektrostatičke energije i Born-ovu energiju odbijanja.
152. Objasnite činjenicu da HF ima mnogo višu tačku ključanja ( $19,4^\circ C$ ) nego HCl ( $-85^\circ C$ ), iako je molekulska masa HF niža od one za HCl.
153. Kako bi smo objasnili da je  $H_2O$  tečna, a  $H_2S$  gas na običnoj temperaturi, iako ima veću molekulsku masu od  $H_2O$ ?
154. Predložite objašnjenje činjenice da je gustina leda manja od gustine tečne vode.
155. Jon  $(FHF)^+$  ima linearnu simetričnu strukturu sa protonom koji čini vodoničnu vezu između dva fluora. Molekulske orbitale imaju istu simetrijsku klasifikaciju (F ili B i g ili u) kao i orbitale homonuklearnih dvoatomnih molekula.  
 (a) Dati kvalitativno poređenje oblika i vezivnih osobina molekulskih orbitala  $(FHF)^+$  i onih za homonuklearni dvoatomni molekul  $F_2$ . (Molekulske orbitale za  $F_2$  su veoma slične onima za  $O_2$ . Orbitala  $3F_u$  nije zauzeta u osnovnom stanju  $F_2$ ) Molekulske orbitale  $1F_g$  i  $1F_u$  nije potrebno



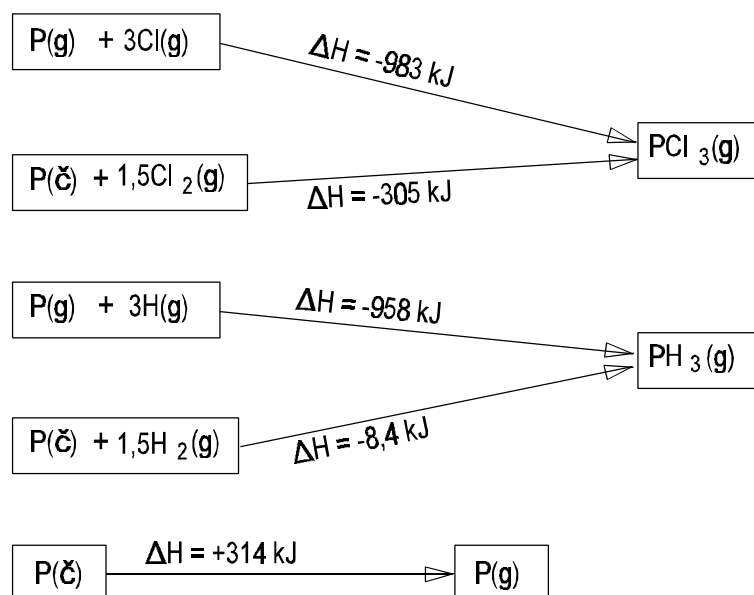
posebno razmatrati jer se one uglavnom svode na unutrašnje,  $1s$ , atomske orbitale fluora.

(b) Objasnite opšti oblik i u...e0fe osnovnih atomskih orbitala u molekulskim orbitalama (FHF)<sup>1</sup> primenom proste LKAO aproksimacije koristeći simetrijske osobine i relativne energije orbitala H i F.

156. Koja od toplota reakcija prikazanih sledećim jednačinama je bitna energija veze H-Cl:

- A  $\text{HCl(g)} \rightarrow \text{H(g)} + \text{Cl(g)}$   
 B  $2\text{HCl(g)} \rightarrow \text{H}_2\text{(g)} + \text{Cl}_2\text{(g)}$   
 C  $\text{HCl(g)} \rightarrow \frac{1}{2}\text{H}_2\text{(g)} + \frac{1}{2}\text{Cl}_2\text{(g)}$   
 D  $\text{HCl(g)} \rightarrow \text{H}^+\text{(aq)} + \text{Cl}^-\text{(aq)}$   
 E  $\text{HCl(g)} \rightarrow \text{H}^+\text{(g)} + \text{Cl}^-\text{(g)}$

157.



Koristeći gore date informacije izračunati (prosečne) vezivne energije sledećih veza:

- i P-Cl u  $\text{PCl}_3$   
 ii P-H u  $\text{PH}_3$   
 iii Cl-Cl u  $\text{Cl}_2$   
 iv H-H u  $\text{H}_2$



## KOMENTARI I REŠENJA

| 158. | $\lambda$ | $p$ (N s mol <sup>-1</sup> ) | E (eV)            |
|------|-----------|------------------------------|-------------------|
|      | 1 nm      | $3,990 \cdot 10^1$           | 1240              |
|      | 0,2 : m   | $1,995 \cdot 10^3$           | 6,20              |
|      | 0,6 : m   | $6,866 \cdot 10^4$           | 2,07              |
|      | 10 : m    | $3,990 \cdot 10^5$           | 0,124             |
|      | 1 m       | $3,990 \cdot 10^{10}$        | $1,24 \cdot 10^6$ |
|      | 10 m      | $3,990 \cdot 10^{11}$        | $1,24 \cdot 10^7$ |

159.  $\lambda = 8,672 \cdot 10^{11}$  m  
 $\lambda = 9,051 \cdot 10^{14}$  m  
 $\lambda = 2,2 \cdot 10^{33}$  m  
 $\lambda = 3,73 \cdot 10^{62}$  m

160.  $\lambda = 2,2 \cdot 10^{33}$  m  
 $\lambda = 2,4 \cdot 10^5$  m  
 $\lambda = 332$  pm

161. (c)

162.  $\lambda = \frac{h}{p}$      $E = \frac{p^2}{2m}$      $p = \sqrt{E \cdot 2m}$      $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$

$\lambda = 1,873 \cdot 10^{-16}$  m  
 (1)  $\lambda = 7,236 \cdot 10^{-12}$  m  
 (2)  $\lambda = 1,448 \cdot 10^{-12}$  m  
 (3)  $\lambda = 6,204 \cdot 10^{-9}$  m

163.  $\lambda = 9,113 \cdot 10^{-8}$  m

164. 2,59 eV

165. Rezultat prvog izraza je  $hkl dv$   
Rezultat drugog izraza je 0

166. Da bi funkcija bila prihvatljiva mora, između ostalog, biti u celom intervalu  $[0,4]$  konačna i da njen kvadrat ima konačan integral. Oba uslova ispunjavaju funkcije (d) i (e).

167. (d) i (f)

168. Operator  $x$  nema sopstvenih funkcija; operatoru  $C$  su sve funkcije sopstvene (sopstvena vrednost je  $C$ ).

Neki od ostalih primera:

$$\frac{d}{dx} e^{ax} = a e^{ax} \quad (\text{sopstvena vrednost je } a)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} e^{ax} = a^2 e^{ax} \quad (\text{sopstvena vrednost je } a^2)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \cos x = -\cos x \quad (\text{sopstvena vrednost je } -1)$$

$$\left( x \frac{d}{dx} \right) x^2 = 2x^2 \quad (\text{sopstvena vrednost je } 2)$$

169.  $B$  se može odrediti iz graničnih uslova ( $R=0$  za  $x=0$  i  $x=a$ ), a  $A$  se može odrediti iz uslova normiranja:  $\int_0^a Q^2(x) dx = 1$ .

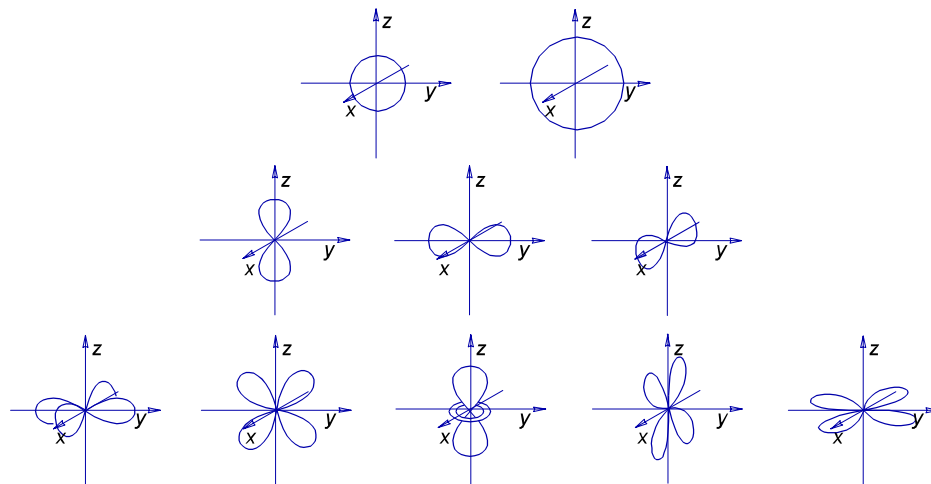
$$A = (2/a)^{1/2} \quad B = nB/a \quad E = \frac{h^2 n^2}{8ma^2}$$

170. Treći odgovor.

171. Drugi odgovor.

172. a)

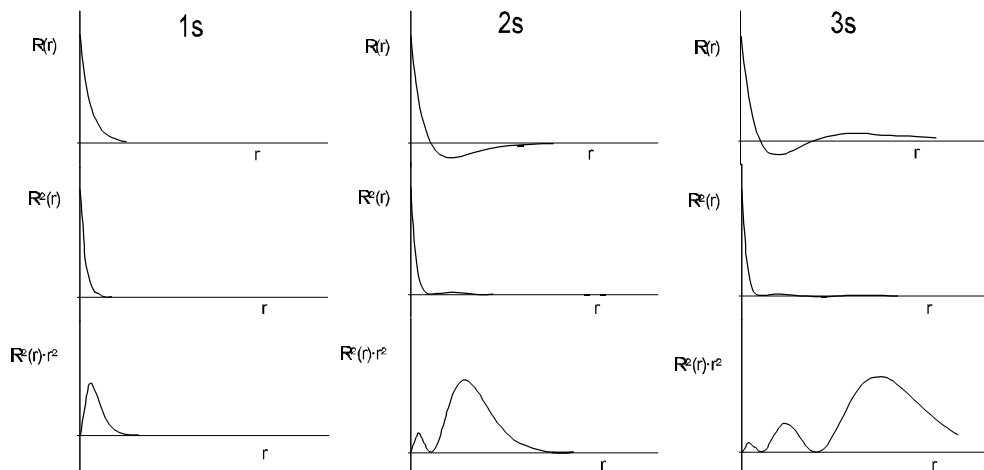
173.



174.

| orbitala | Kvantni brojevi |     |                     |
|----------|-----------------|-----|---------------------|
|          | $n$             | $l$ | $m_l$               |
| 2s       | 2               | 0   | 0                   |
| 5p       | 5               | 1   | ! 1,0,1             |
| 4d       | 4               | 2   | ! 2,! 1,0,1,2       |
| 5f       | 5               | 3   | ! 3,! 2,! 1,0,1,2,3 |

175.



176. 
$$P = \Psi^* \Psi = \frac{1}{2\pi} e^{im\phi} e^{-im\phi} = \frac{1}{2\pi} \text{ za sve ta...ke}$$

$$\int_0^{2\pi} P d\phi = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi = 1$$

177.  $\psi(1s_H) = (2a_0^{-3})^{-1/2} \exp(-r/a_0)$   
 $D = 0,318 \text{ elektron bor}^{-3}$ ;  $3,441 \cdot 10^{11} \text{ Cm}^{-3}$
178. Talasna funkcija je  $R(1s) = N \exp(-r/a_0)$   
 Nafi diferencijalni element zapremine u sferno polarnom koordinatnom sistemu:  $dv = dx dy dz = r^2 \sin^2 \theta dr d\theta d\phi$ .  
 Nafi konstantu normiranja iz uslova da je  $N^2 \int R^2 dv = 1$ ;  
 Rešiti integral:  $P = 4\pi N^2 \int_{2a_0}^{\infty} \phi^2 r^2 dr$ ;  $P = 0,238$
23.  $Z_{\text{ef}} = 1,259$
24. 1.341 a.j.
25. 319 nm
26. a) 97,2 nm; b) 486,0 nm; c) 956,9 nm
27.  $O^+$  ima elektronsku konfiguraciju  $1s^2 2s^2 2p^3$  sa polupopunjenim  $2p$  orbitalama. Ovaj raspored je posebno stabilan. (Slično je kod azota.)
28.  $E(0) = 0 \text{ aJ}$   $E(1) = 0,3097 \text{ aJ}$   $E(2) = 3,0048 \text{ aJ}$   
 Dianjon je nestabilan i spontano se raspada u gasnoj fazi. Koeficijent  $b$  opisuje odbijanje između elektrona.
29.  $E(3) = 16,8 \text{ aJ}$  u odnosu na  $E(0)$   
 $E(4) = 28,8 \text{ aJ}$  u odnosu na  $E(0)$   
 odakle je  $I_4 = 12,0 \text{ aJ}$ . Eksperimentalna vrednost  $I_4$  za O je 12,4 aJ, tako da je naša procena prilično dobra.
30. (a) opada, (b) opada, (c) raste, (d) opada

31. Kod fluora  $1s$  elektroni efikasno zaklanjaju jezgro elektronima u  $2p$  orbitalama. Kod hlora  $2p$  elektroni manje efikasno zaklanjaju jezgro  $3p$  elektronima, pa je zato efektivno naelektrisanje jezgra za valentne elektrone veće kod Cl. (za dalje homologe ovo razmatranje se ne može strogo primeniti, jer dolazi do izražaja veća udaljenost valentnih elektrona od jezgra.)

32. 

|        |             |             |        |
|--------|-------------|-------------|--------|
| $K^+$  | $Cl^-$      | $Rb^+$      | $Br^-$ |
| R [nm] | 0,135 0,179 | 0,153 0,190 |        |

33. 

|          |      |       |
|----------|------|-------|
| H        | O    | F     |
| P = 7,18 | 7,54 | 10,41 |

34. Pauling-ove elektronegativnosti se izražavaju prema formuli:

$$(P_A - P_B)^2 = D_{AB} - 2(D_{AA} + D_{BB})$$

uzimajući kao osnovu  $P_H = 2,2$ .

(a)  $P_F = 3,87$ ;  $P_{Cl} = 3,18$ ;  $P_{Br} = 2,92$ ;  $P_I = 2,89$

(b) Uraditi račun sa trećom kolonom i uporediti slaganje.

(c) U molekulu  $H_2$  valentni elektroni su veoma blizu jezgra

35.  $Na < P < Cl < F < He^+$ ;  $Cl < S < C < Li < Cs$

36. Apscisa  $r_M/r_N$ ; ordinata  $(2r_M - d_{MM})/2r_N$ . U općtem slučaju za kristalnu rešetku  $MN_n$  je

$$(2r_M - d_{MM})/2r_N = n(r_M/r_N) - n(1/n)$$

sa  $n = 1 - d_{MM}/[d_0(n+1)]$

gde je  $d_0$  udaljenost najmanjeg kontakta.

37.  $R_e$  raste u  $C_2^+$ ,  $O_2^-$ ,  $F_2^-$  zbog gubitka elektrona iz vezivne orbitale ili dodavanja elektrona u antivezivnu orbitalu; a obrnuto  $R_e$  opada za suprotne jone.

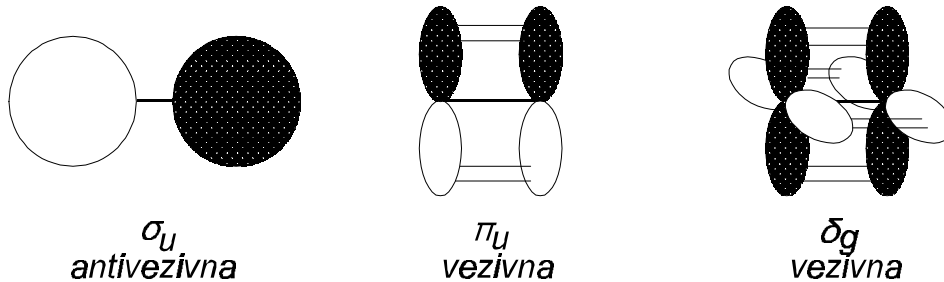
39. a)  $E = -2L^2 - (1/r_H) - (2/r_{He}) + (2/R_{HHe})$ .

b) Razdvojeni atomi: najniža energija za  $H^+ + He^+(1s) = -2$  a.j. Za sjedinjene atome:  $Li^{2+}(1s) = -4,5$  a.j.

32

40. Uzeti da je  $N_a = B^{1/2} \exp(r_a/a_0)$  i  $N_b = B^{1/2} \exp(r_b/a_0)$ . Tada je za  $a_0 \leq r \leq a_0 + a_0$   $P_{ab} = 2N_a N_b = 2B^1 e^{2r/a_0} = 0,08616$ . Levo i desno od ovog intervala funkcija  $P_{ab}$  opada eksponencijalno.

41.



42. Orbitala  $3F_g$  je vezivna. Jonizacija elektrona iz nje bi trebalo da proizvede  $N_2^+$  sa većim  $R_e$  nego kod  $N_2$  i sa manjim  $D_e$ . Opaženo je  $R_e = 111,8$  pm u poredjenju sa  $109,7$  pm za  $N_2$ , a opažena vrednost  $D_e$  takodje pokazuje predvidjeni trend.

$1B_u$  orbitala je vezivna. Opažena vrednost  $R_e$  za  $N_2^+$  je  $117,6$  pm. Jonizacija iz  $2F_u$  udaljava antivezivni elektron. Opažena vrednost  $R_e$  za  $N_2^+$  je  $107,5$  pm.

43. (a)  $N = 0,707$ ; (b)  $N = 620$

44.  $\text{LiH} : \mathcal{H} = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{1}{r_{Li,1}} - \frac{1}{r_{Li,2}} - \frac{1}{r_{H,1}} - \frac{1}{r_{H,2}} + \frac{1}{r_{1,2}} + \frac{1}{R_{LiH}}$

$\text{LiH}^+ : \mathcal{H} = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r_{Li}} - \frac{1}{r_H} + \frac{1}{r_{LiH}}$

45.  $S = \int 1s_A 1s_B dv = \frac{R^3}{8} \int_1^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \frac{1}{\pi} e^{-\frac{R}{2}(\zeta+\eta)} \cdot e^{-\frac{R}{2}(\zeta-\eta)} \cdot (\zeta^2 - \eta^2) d\zeta d\eta d\phi$

$S = \frac{R^3}{4} \int_1^\infty \int_{-1}^1 e^{-R\zeta} \cdot (\zeta^2 - \eta^2) d\zeta d\eta =$



$$= \frac{R^3}{4} \left\{ \frac{2}{R} e^{-R\zeta} \left[ \zeta^2 + \frac{2\zeta}{R} + \frac{2}{R^2} \right] + \frac{2}{3R} e^{-R\zeta} \right\}_{\zeta=1}^{\zeta=\infty} =$$

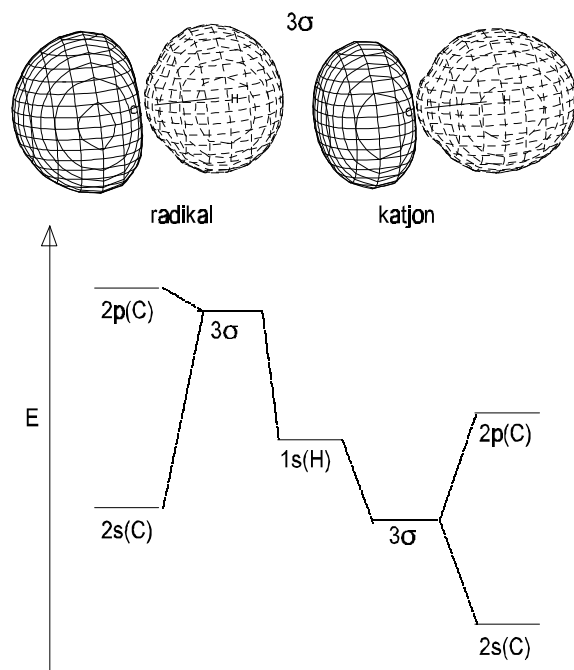
$$= e^{-R} \left[ 1 + R + \frac{R^2}{3} \right]$$

46. a) 4.  
 b) 3 (triplet).  
 c) (1) porast, (2) smanjenje.  
 d) 2 (dublet).

47.  $E_1 = ! 1,260$        $R_1 = 0,177N_A ! 0,984N_B$   
 $E_2 = ! 0,237$        $R_2 = 0,959N_A + 0,284N_B$

48.  $R_1 = c_1(1s_{Li}) + c_2(2s_F)$   
 $R_2 = c_3(2s_{Li}) + c_4(2p_{zF})$

49. LiO :  $[1F^2 2F^2 3F^2 4F^2 1B^3]$   
 BeO :  $[1F^2 2F^2 3F^2 4F^2 1B^4]$   
 BO :  $[1F^2 2F^2 3F^2 4F^2 1B^4 5F^1]$   
 CO :  $[1F^2 2F^2 3F^2 4F^2 1B^4 5F^2]$   
 NO :  $[1F^2 2F^2 3F^2 4F^2 5F^2 1B^4 2B^1]$   
 OO :  $[1F_g^2 1F_u^2 2F_g^2 2F_u^2 3F_g^2 1B_u^4 1B_g^2]$   
 FO :  $[1F^2 2F^2 3F^2 4F^2 5F^2 1B^4 2B^3]$   
 NeO :  $[1F^2 2F^2 3F^2 4F^2 5F^2 1B^4 2B^4]$



50. U CH molekulu je 1F orbitala nevezivna jer se svodi samo na 1s orbitalu ugljenika, koja je po energiji toliko niža od ostalih, da se sa njima ne može kombinovati. Isto

tako, B orbitale su nevezivne, jer na vodoniku nema orbitala koje bi mogle da se kombinuju sa  $p_B$  orbitalama na ugljeniku. Orbitale F tipa su kombinovane iz  $1s$  orbitale vodonika, i  $2s$  i  $2p_z$  orbitala ugljenika.  $2F$  Orbitala predstavlja njihovu vezivnu kombinaciju, dok  $3F$  molekulska orbitala obuhvata vezivnu interakciju  $1s$  orbitale vodonika sa  $2p_x$  orbitalom, a anti-vezivnu interakciju sa  $2s$  orbitalom ugljenika.

U neutralnom radikalu je  $3F$  orbitala prvenstveno orbitala slobodnog elektronskog para na ugljeniku, i kao takva je nevezivna. Kod katjona se odnos udela  $2s$  i  $2p_z$  orbitala malo menja u korist ove poslednje. Zahvaljujući tome se elektronska gustina pomera više u području između dva jezgra, te ova orbitala postaje vezivna.

51.  $2S_{1/2}$   
 $2P_{3/2}, 2P_{1/2}$   
 $2D_{3/2}, 2D_{1/2}$
52.  $B_2: [1F_g^2 1F_u^2 2F_g^2 2F_u^2 1B_u^2]$   $3E_g^!$   
 $N_2: [1F_g^2 1F_u^2 2F_g^2 2F_u^2 1B_u^4 3F_g^2]$   $1E_g^+$   
 $BN: [1F_g^2 2F_u^2 3F_g^2 4F_u^2 1B_u^4]$   $1E_g^+$   
 $O_2: [1F_g^2 1F_u^2 2F_g^2 2F_u^2 3F_g^2 1B_u^4 2B_g^2]$   $3E_g^+$
53.  $4E^+, 2), 4E^-$ .
54.  $C_2$  molekul ima  $2 \times 6 = 12$  valentnih elektrona;  $BN$  molekul ima  $5 + 7 = 12$  valentnih elektrona. Treba primeniti izoelektronski princip.
55. Primena izoelektronskog principa:  $SO_4^{2!}$  i  $PO_4^{3!}$  su izoelektronski sa  $ClO_4^!$ , a  $XeO_4$  sa  $IO_4^!$ .
56.  $Pt^{+4}, P^{+3}, S^{+5}$  (centralni)  $S^! 1$  (terminalni),  $Re^{+1}, (Co_2)^{+5}$  - naelektrisanje je ravnomerno podeljeno na oba Co atoma.
57. Treba primeniti pravila o 8 i/ili 18 elektrona. Stabilni:  $ClO_4^!$ ,  $SO_4^{2!}$ ,  $[Co(NO_2)_6]^{3!}$  Malo stabilni:  $ClO^!$ ,  $SO_3^{2!}$ ,  $[Mn(C_2O_4)_3]^{3!}$ ,  $[MnCl_5]^{2!}$ .

59. Energija privlačenja dva jednostruko naelektrisana jona je:

$$E = \frac{1,389}{R} \cdot 10^{-4}, \text{ gde je } R \text{ udaljenost; sve je dato u SI jedinicama.}$$

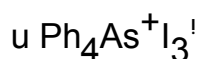
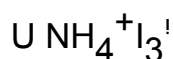
REŠENJE:  $R=0,945 \text{ nm}$

60. Ako se pogleda MO dijagram za molekule druge periode vidi se da  $f_e$  kod  $B_2$  molekula od valentnih orbitala biti popunjene  $2F_g$ ,  $2F_u$  i polupopunjene  $1B_u$ . Pošto je  $2F_u$  orbitala antivezivna, postojaju samo dva vezivna elektrona viška, što odgovara jednoj kovalentnoj vezi.

64.  $H_2C=O$  spada u grupu simetrije  $C_{2v}$ :  $E, C_2, F_v, F_2'$

|        |        |        |        |        |
|--------|--------|--------|--------|--------|
|        | E      | $C_2$  | $F_v$  | $F_v'$ |
| E      | E      | $C_2$  | $F_v$  | $F_v'$ |
| $C_2$  | $C_2$  | E      | $F_v'$ | $F_v$  |
| $F_v$  | $F_v$  | $F_v'$ | E      | $C_2$  |
| $F_v'$ | $F_v'$ | $F_v$  | $C_2$  | E      |

65.  $\left| \frac{0,310nm}{\quad} \right| \left| \frac{0,282nm}{\quad} \right| \quad \left| \frac{0,290nm}{\quad} \right| \left| \frac{0,290nm}{\quad} \right|$



- 66.

| $C_2$<br>h | E | $C_2$ | i  | $F_h$ |
|------------|---|-------|----|-------|
| $A_g$      | 1 | 1     | 1  | 1     |
| $B_g$      | 1 | -1    | 1  | -1    |
| $A_u$      | 1 | 1     | -1 | -1    |
| $B_u$      | 1 | -1    | -1 | 1     |

67.  $C_{3v}$   $D_{2h}$   $D_{3h}$   
 $C_{4v}$   $C_s$   $D_{2h}$   
 $C_{2v}$   $D_{4h}$   $C_{3v}$   
 $C_{2h}$   $D_{3h}$   $C_{2v}$

$$\begin{array}{c}
 68. \\
 \begin{array}{c|ccc}
 & |E & 2C_3 & 3F_V \\
 \hline
 A_1 & |1 & 1 & 1 \\
 A_2 & |1 & 1 & !1 \\
 E & |2 & !1 & 0 \\
 \hline
 & 6 & 0 & 0
 \end{array}
 \end{array}
 = A_1 + A_2 + 2E$$

69.  $E''E'' = A_1'' + A_2'' + E''$

70. Piramidalni molekul ima simetriju  $C_{3v}$ , a planarni molekul ima simetriju  $D_{3h}$ .

*Piramidalni*

$$\begin{array}{c}
 C_{3v} \\
 \begin{array}{c|ccc}
 & E & C_3 & F_V \\
 \hline
 (H_3) & 3 & 0 & 1
 \end{array}
 \end{array}$$

Orbitale vodonika imaju simetrijski prilagodjene kombinacije  $A_1 + E$

Orbitale azota spadaju u sledeće simetrijske vrste:

$$\begin{array}{l}
 2s \quad A_1 \\
 2p_x \quad A_1 \\
 2p_y \quad E \\
 2p_z \quad E
 \end{array}$$

Molekulske orbitale su  $2a_1$  ( $1a_1$  je nevezivna unutrašnja 1s orbitala azota),  $1e$ ,  $3a_1$ ,  $2e$  i  $4a_1$ .

*Planarni*

$$\begin{array}{c}
 D_{3h} \\
 \begin{array}{c|ccccc}
 & E & C_3 & C_2 & F_h & S_3 & F_V \\
 \hline
 (H_3) & 3 & 0 & 1 & 3 & 0 & 1
 \end{array}
 \end{array}$$

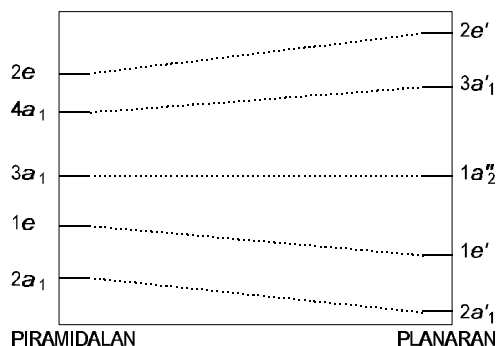
Orbitale vodonika imaju simetrijski prilagodjene kombinacije  $A_1' + E'$

Orbitale azota spadaju u sledeće simetrijske vrste:

$$\begin{array}{l}
 2s \quad A_1' \\
 2p_x \quad E' \\
 2p_y \quad E' \\
 2p_z \quad A_2''
 \end{array}$$

Molekulske orbitale su  $2a_1'$  ( $1a_1'$  je nevezivna unutrašnja 1s orbitala azota),  $1e'$ ,  $a_2''$ ,  $2e'$  i  $3a_1'$ .

Približan Walsh-ov dijagram bi bio



Molekuli  $BH_3$  i  $NH_3$  se razlikuju po naseljenosti  $4a_1$  ( $3a_1'$ ) molekulske orbitale koja je stabilizovana u piramidalnoj konfiguraciji jezgara.

71. Nacrtajte grafik  $Q = 0,514(2s) + 0,707(2p_y) + 0,485(2p_z)$  da bi dobili profil koji dopire do 243 pm. Orbitale slobodnog para su kompaktne.

72.  $E_g^+ \quad 1s+1s' \quad ; \quad E_u^+ \quad 1s-1s'$

73. Ako se z-osa postavi da prolazi kroz jezgra ugljenika, a y osa da se nalazi u ravni molekula, onda se mogu sastaviti sledeće kombinacije: (pogledati tablice karaktera u prilogu)

$$Q(A_{1g}) = 2(h_1+h_2+h_3+h_4)$$

$$Q(B_{1u}) = 2(h_1! h_2+h_3! h_4)$$

$$Q(B_{2u}) = 2(h_1+h_2! h_3! h_4)$$

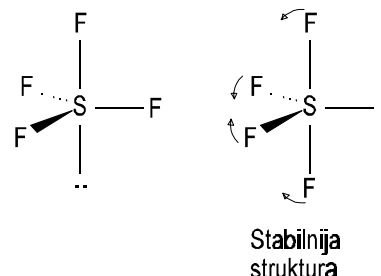
$$Q(B_{3g}) = 2(h_1! h_2! h_3+h_4)$$

74. 
$$\psi = \begin{vmatrix} 1s(1)\alpha(1) & 1s(1)\beta(1) & 2s(1)\alpha(1) & 2s(1)\beta(1) \\ 1s(2)\alpha(2) & 1s(2)\beta(2) & 2s(2)\alpha(2) & 2s(2)\beta(2) \\ 1s(3)\alpha(3) & 1s(3)\beta(3) & 2s(3)\alpha(3) & 2s(3)\beta(3) \\ 1s(4)\alpha(4) & 1s(4)\beta(4) & 2s(4)\alpha(4) & 2s(4)\beta(4) \end{vmatrix}$$

75.

Aksijalni ugao F! S! F je  $173^\circ$

Ekvatorijalni ugao F! S! F je  $102^\circ$



79. (1) „ etri para valentnih elektrona.

Tetraedarski osnovni raspored. Jezgra

su rasporedjena u obliku V. (2) „ etri valentna para. Tetraedarski (približno) raspored jezgara. (3) „ etri valentna para. Tetraedarski osnovni raspored. Jezgra su rasporedjena na vrhovima trigonalne

piramide (kao kod  $NH_3$ ). (4) Pet valentnih parova. Osnovni raspored - trigonalna bipiramida. Raspored jezgara je sli...an kao  $SF_4$ . (5) Sedam valentnih parova. Osnovni raspored - petougona bipiramida. Raspored jezgara je otprilike kao u deformisanom oktaedru.

80. Oko joda možemo izbrojati 6 parova valentnih elektrona. Osnovni oblik je oktaedar. Sa dva slobodna para orijentisana aksijalno molekul je

kvadratno planaran. Dva nasuprotna dipola I! F veza se poništavaju; F je elektronegativniji od Cl, pa ce postojati ukupan dipolni momenat u smeru trefe I! F veze.

$$81. \quad Q_1 + Q_2 = 0,5(2s_O) + 0,5(2p_{zO}) + 0,58(2p_{yO}) + 1,08(1s_H) + 0,08(1s_{H'}) \\ Q_1 - Q_2 = 0,5(2s_O) + 0,5(2p_{zO}) - 0,58(2p_{yO}) + 0,08(1s_H) + 1,08(1s_{H'})$$

82. Podsetimo se, da tri  $sp^2$  orbitale mogu da se predstavje kao

$$F_1 = 3^{1/2}(s + \sqrt{2}p_x) \\ F_2 = 3^{1/2}(s - \sqrt{2}p_x + (3/2)^{1/2}p_y) \\ F_3 = 3^{1/2}(s - \sqrt{2}p_x - (3/2)^{1/2}p_y)$$

$$\text{tj.} \quad \begin{aligned} 1_1 &= 0,44(2s) + 0,09(2p_z) + 0,51(2p_x) + 0,42(h_1) + 0,07(h_2 + h_3) \\ 1_2 &= 0,44(2s) + 0,09(2p_z) - 0,25(2p_x) + 0,44(2p_y) + 0,42(h_2) + 0,07(h_1 + h_3) \\ 1_3 &= 0,44(2s) + 0,09(2p_z) - 0,25(2p_x) - 0,44(2p_y) + 0,42(h_3) + 0,07(h_1 + h_2) \end{aligned}$$

$$83. \quad H_2 \quad \begin{vmatrix} x & 1 \\ 1 & x \end{vmatrix} = 0 \quad E_{1,2} = \alpha \pm \beta; \quad E_{\text{tot}} = 2\alpha + 2\beta$$

$$H_3 \quad \begin{vmatrix} x & 1 & 1 \\ 1 & x & 1 \\ 1 & 1 & x \end{vmatrix} = 0 \quad E_1 = \alpha + 2\beta, \quad E_{2,3} = \alpha - \beta; \quad E_{\text{tot}} = 3\alpha + 3\beta$$

$H_3$  sistem nema neku posebnu stabilizaciju u odnosu na  $H_2$

85. Za linearan  $H_3$  :

$$\begin{vmatrix} \alpha - E & \beta & 0 \\ \beta & \alpha - E & \beta \\ 0 & \beta & \alpha - E \end{vmatrix} = 0 \quad \begin{aligned} E_3 &= \alpha + \sqrt{2}\beta \\ E_2 &= \alpha \\ E_1 &= \alpha - \sqrt{2}\beta \end{aligned}$$

$$E_1 = \alpha - \sqrt{2}\beta$$

$$E_{\text{ukup}} =$$

|                     | $H_3^+$                | $H_3$                  | $H_3^-$                |
|---------------------|------------------------|------------------------|------------------------|
|                     | —                      | —                      | —                      |
|                     | —                      | $\frac{8}{9}$          | $\frac{89}{9}$         |
|                     | $\frac{89}{9}$         | $\frac{89}{9}$         | $\frac{89}{9}$         |
| $E_{\text{ukup}} =$ | $2\alpha + 2,838\beta$ | $3\alpha + 2,838\beta$ | $4\alpha + 2,838\beta$ |

Za trouglast  $H_3$  :

$$\begin{vmatrix} \alpha-E & \beta & \beta \\ \beta & \alpha-E & \beta \\ \beta & \beta & \alpha-E \end{vmatrix} = 0 \quad E_3 = E_2 = \alpha + 8$$

$$E_1 = \alpha + 28$$

$$E_{\text{ukupno}} = \begin{matrix} 2\alpha + 48 & 3\alpha + 38 & 4\alpha + 28 \end{matrix}$$

$$E(\text{trouglast } H_3^+) < E(\text{linearan } H_3^+)$$

$$E(\text{trouglast } H_3) < E(\text{linearan } H_3)$$

$$E(\text{trouglast } H_3^-) > E(\text{linearan } H_3^-)$$

86.

$$\begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 1 \\ 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 \\ 1 & 0 & 1 & x \end{vmatrix} = 0 \quad x = (\alpha - E)/8$$

$$= x \begin{vmatrix} x & 1 & 0 \\ 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 1 & 0 & 1 \\ x & 1 & 0 \\ 1 & x & 1 \end{vmatrix} = 0$$

$$= x [x^3 - 2x] - [(x^2 - 1) + 1] - [1 + (x^2 - 1)] =$$

$$= x^4 - 2x^2 - x^2 - x^2 = x^4 - 4x^2 = 0 \quad \vee \quad x = 0, 0, 2, -2$$

$$E_1 = \alpha + 28 \quad E_2 = E_3 = \alpha \quad E_4 = \alpha - 28$$

$$\begin{vmatrix} \alpha_C - E & \beta_{CC} & 0 & \beta_{CC} \\ \beta_{CC} & \alpha_C - E & \beta_{CN} & 0 \\ 0 & \beta_{CN} & \alpha_N - E & \beta_{CN} \\ \beta_{CC} & 0 & \beta_{CN} & \alpha_C - E \end{vmatrix} \Rightarrow \begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 1 \\ 1 & x & 0,8 & 0 \\ 0 & 0,8 & x+0,5 & 0,8 \\ 1 & 0 & 0,8 & x \end{vmatrix} = 0$$

$$x_1 = 1,730$$

$$x_2 = 0$$

$$x_3 = 0,299$$

$$x_4 = 1,931$$

$$E_1 = \alpha_C + 1,730\beta_{CC}$$

$$E_2 = \alpha_C$$

$$E_3 = \alpha_C + 0,299\beta_{CC}$$

$$E_4 = \alpha_C + 1,931\beta_{CC}$$

87. Iz prethodnog zadatka imamo podatke o energiji orbitala

$$\begin{array}{l} x = 2 \\ x = 0 \\ x = 2 \end{array} \quad \begin{array}{l} - \\ \underline{8} \quad \underline{8} \\ \underline{89} \end{array}$$

Odatle se uvrštavanjem u sekularne jedna...ine dobijaju koeficijenti:

$$\begin{array}{l} \text{za } x=2 \\ \text{za } x=0 \end{array} \quad \begin{array}{l} 2c_1 + c_2 + c_4 = 0 \\ 2c_2 + c_1 + c_3 = 0 \\ 2c_3 + c_2 + c_4 = 0 \\ 2c_4 + c_3 + c_1 = 0 \end{array} \quad \begin{array}{l} \text{odavde je} \\ c_1 = c_3 \\ c_1 = c_2 \end{array}$$

Prema tome je  $c_1 = c_2 = c_3 = c_4$

Iz uslova normiranja proizilazi da je  $c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 + c_4^2 = 4c_1^2 = 1$

$$c_1 = 1/2 \quad R_1 = (1/2)(N_1 + N_2 + N_3 + N_4)$$

Za  $x = 0$

$$\begin{array}{l} c_2 + c_4 = 0 \\ c_1 + c_3 = 0 \end{array} \quad \begin{array}{l} c_2 = -c_4 \\ c_1 = -c_3 \end{array}$$

Sistem jedna...ina nije kompletan (ne postoji veza izmedju  $c_1$  i  $c_2$ , kao i izmedju  $c_3$  i  $c_4$ ), ali se na osnovu simetrije molekula moñe zaklju...iti da je  $c_1^2 = c_2^2$ , tj., da je  $c_1 = \pm c_2$ . Radi se dakle o dve kombinacije sa istom energijom, te nañ par degenerisanih orbitala moñemo napisati na sledefi na...in:

$$\begin{array}{l} R_2 = (1/2)(N_1 + N_2 - N_3 - N_4) \\ R_3 = (1/2)(N_1 - N_2 - N_3 + N_4) \end{array}$$

Red veze je dat formulom:  $\rho_{rs} = \sum_i n_i c_{ri} c_{si}$

Otuda imamo

$$\begin{array}{l} \rho_{1,2} = 2(1/2)^2 + (1/2)^2 - (1/2)^2 = 0,5 \\ \rho_{2,3} = 2(1/2)^2 - (1/2)^2 + (1/2)^2 = 0,5 \\ \rho_{3,4} = 2(1/2)^2 + (1/2)^2 - (1/2)^2 = 0,5 \\ \rho_{1,4} = 2(1/2)^2 - (1/2)^2 + (1/2)^2 = 0,5 \end{array}$$

88.  $2^{\circ}E_{\text{etilen}} = 4'' + 48$ ; a  $E_{\text{butadien}} = 4'' + 4,488$ . Rezonanciona energija butadiena bi bila 0,488.

89.  $\rho_{1,2} = \rho_{3,4} = 0,8944$ ;  $\rho_{2,3} = 0,4472$ .



90. Aromati...ni molekuli ispunjavaju pravilo o  $4m+2$  B-elektrona. Aromati...ni prstenovi su oni u kojima su sve veze približno ekvivalentne.

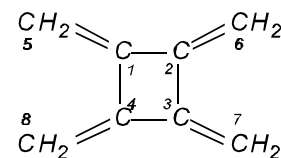
91.  $x = \pm 2,4142; \pm 1; \pm 1; \pm 0,4142$

$$R_1 = 0,4142(N_1 + N_2 + N_3 + N_4) + 0,1913(N_5 + N_6 + N_7 + N_8)$$

$$R_2 = 0,1636(N_1! N_3 + N_5 + N_7) + 0,4725(N_2! N_4 + N_6! N_8)$$

$$R_3 = 0,4725(N_1! N_3 + N_5 + N_7)! 0,1636(N_2! N_4 + N_6! N_8)$$

$$R_4 = 0,1913(N_1 + N_2 + N_3 + N_4)! 0,4142(N_5 + N_6 + N_7 + N_8)$$



$$q_1 = q_5 = 1 \quad p_{1,2} = 0,3536 \quad p_{1,5} = 0,8536$$

92. 
$$\begin{vmatrix} x & 1 & 0 \\ 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix} = (x - \sqrt{2})(x + \sqrt{2}) \cdot x = 0 \quad x = 0, \pm \sqrt{2}$$

Na isti na...in kao u zadatku za ciklobutadien rešavamo sistem linearnih jedna...ina za koeficijente i dobijamo sledeće B-elektronske talasne funkcije:

$$x = \sqrt{2} \quad R_1 = (1/2)(N_1! \sqrt{2}N_2 + N_3)$$

$$x = 0 \quad R_2 = (1/2)^{1/2}(N_1! N_3)$$

$$x = -\sqrt{2} \quad R_3 = (1/2)(N_1 + \sqrt{2}N_2 + N_3)$$

Redosled po energiji:  $R_1 > R_2 > R_3$

$$q_m = \sum_r n_r c_{rm}^2 \quad q_1 = 2(1/2)^2 = 1/2$$

$$q_2 = 2(1/2) = 1$$

$$q_3 = 2(1/2)^2 = 1/2$$

Raspored naelektrisanja:

93. a) 
$$\begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & x & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & x & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & x & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & x & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & x \end{vmatrix}$$

b) 
$$\begin{vmatrix} x & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & x & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & x & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & x & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & x & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & x \end{vmatrix}$$

42 Raspored vrsta i kolona se može menjati zavisno od redosleda brojanja, ali se uvek može svesti na dati oblik. Primeri c) d) i e) sadrže izolovane dvogube veze koje se opisuju jednako kao i B=veza u etilenu.

94.

|  |  |  |
|--|--|--|
| $E_1 = +1,73218$<br>$E_2 = E_3 = 0$<br>$E_4 = -1,73218$<br><br>$E_B = +3,46418$<br><br>$q_1 = q_2 = q_3 = q_4 = 1$<br>$p_{1,2} = p_{3,2} = p_{4,2} = 0,5774$ |  | $\theta_1 = \frac{1}{\sqrt{6}}(\phi_1 + \sqrt{3}\phi_2 + \phi_3 + \phi_4)$<br>$\theta_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - \phi_4)$<br>$\theta_3 = \frac{1}{\sqrt{6}}(\phi_1 - 2\phi_3 - \phi_4)$<br>$\theta_4 = \frac{1}{\sqrt{6}}(\phi_1 - \sqrt{3}\phi_2 + \phi_3 + \phi_4)$ |
|--|--|--|

95.  $\int \phi_1 \phi_2 dv = \frac{1}{3}$  Ovo je očigledno jer dve MO imaju jednu zajedničku AO, ( $P_3$ )

96. U okviru Hückel-ove metode ova orbitala se može simetrijski korelisati sa  $1_2$  u problemu 92. Prema tome i ovde može biti  $E = 0$

97.  $B^* = 0,602N_1 - 0,372N_2 - 0,372N_3 + 0,602N_4$   
 Dolaskom elektrona u ovu orbitalu centralna veza postaje jača, terminalne veze slabe.

98. Energija spektralnog prelaza može se izračunati po formuli:  
 $E = n^2 R + c$  gde je  $n$  razlika u energiji orbitala između kojih prelazi elektron, izražena u 8 jedinicama.

1.  $742 = 28 + c$

2.  $550 = 1,25 \cdot 8 + c$

S))))))))))))) Q

(1. - 2.)  $192 = 0,768$

$8 = 253 \text{ kJ mol}^{-1}$

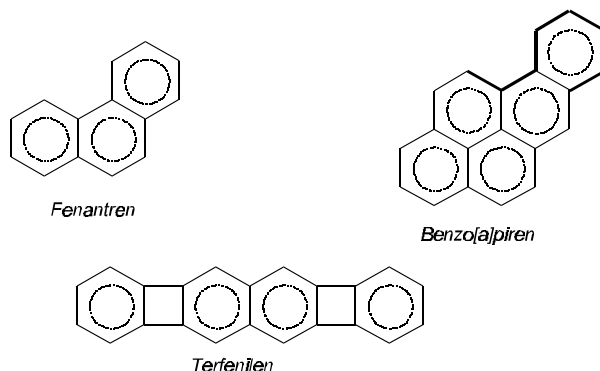
99. 10; 10; 4; 6; 10.

100. Kiseonik daje 2 B-elektrona pa u furanu imamo ukupno 6, a u piranu 7 B-elektrona.

Azot, koji ima dva liganda daje samo jedan B-elektron, a sa tri liganda dva

B-elektrona. Zato u diazabenzenu ima 6 B-elektrona, u dihidrodiazabenzenu 8, u piril radikal 5 i u pirolu 6 B-elektrona. Prema tome je a) levi ; b) levi ; c) desni .

101.



*Fenantren*: 14 B elektrona. Pravilo o  $4n+2$  B elektrona je zadovoljeno.

*Benzopiren*: 20 B elektrona. Ne zadovoljava Hhckel-ovo pravilo. Molekul je veoma karcinogen. Da li ovo poti...e od deficita dva B elektrona, ili od prisustva regiona nalik na zaliv (izvu...en debelom linijom), predmet je spekulacija.

*Terfenilen*: 22 B elektrona. Zadovoljava Hhckel-ovo pravilo. Molekul ima isti broj elektrona kao i pentacen. Skelet je neuobi...ajen, sa kondenzovanim ...etvero...lanim i 0esto...lanim prstenovima. Molekul je sintetizovan 1985.g. u okviru programa usmerenog na dobijanje 'organskog metala'.

102. Dobija se iminijum jon:  $[H_2N=CH! CH_3]^+$ .

103.  $c_1 = ! c_3 = c_5 = 1/3$  ;  $c_2 = c_4 = 0$

104. Hhckel-ova determinanta je:

Iz nje se dalje mogu izra...unati svi trañeni rezultati.

$$\begin{vmatrix} x+1 & 0,8 & 0 & 0 & 0,8 \\ 0,8 & x & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & x & 1 \\ 0,8 & 0 & 0 & 1 & x \end{vmatrix}$$

105.  $\begin{vmatrix} x & 1 & 0 \\ 1 & x-1 & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix} = 0$

$$E_1 = \alpha + \beta \quad \psi_1 = \sqrt{\frac{1}{3}}(\phi_1 + \phi_2 + \phi_3)$$

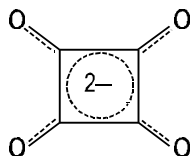
$$E_2 = \alpha \quad \psi_2 = \sqrt{\frac{1}{2}}(\phi_1 - \phi_3)$$

$$E_3 = \alpha - 2\beta \quad \psi_3 = \sqrt{\frac{1}{6}}(\phi_1 - 2\phi_2 + \phi_3)$$

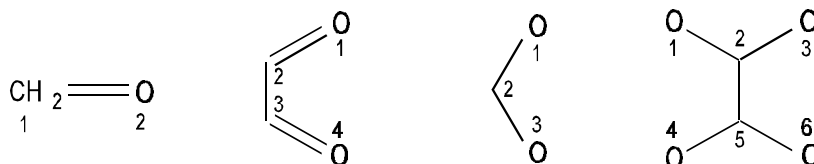
Molekul  $\text{SO}_2$  ima 4 B-elektrona i raspored naelektrisanja se može izračunati kao u zadatku 92.:

$$\begin{aligned} q_1 = q_3 = 5/3 & \quad q_2 = 2/3 \\ \cdot 1 = \cdot 3 = 1 \cdot 5/3 = 5/3 & \quad \cdot 2 = 2 \cdot 2/3 = 4/3 \\ \cdot m = \cdot 1 - \cdot 2 \cdot 1/2 = 1 & \\ : = R_{\text{S}} \cdot \cos(1/2) \cdot m & = 1,43 \cdot 0,5 \cdot 1 = 0,715 \end{aligned}$$

106. Jačina kiseline zavisi uglavnom od stabilnosti anjona. Dianjon kvadratne kiseline je posebno stabilan zbog ekstenzivne delokalizacije elektrona. Ime se dobija potpuno simetričan dianjon.



107.



- a)  $q_1=1,2216$ ;  $q_2=0,7784$   
 b)  $q_1=q_4=1,2069$ ;  $q_2=q_3=0,7931$ ;  $p_{2,3}=0,2069$   
 c)  $q_1=q_3=1,5196$ ;  $q_2=0,9607$   
 d)  $q_1=q_3=q_4=q_6=1,5165$ ;  $q_2=q_5=0,9669$

108. 22 MO

109. Gustina Ag je  $10,49 \cdot 10^3 \text{ kg m}^{-3}$

Relativna atomska masa Ag je 108,87

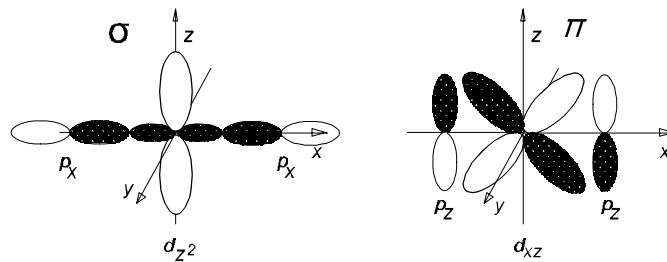
$$10,49 \text{ g Ag sadrži } (10,49/108,87) \cdot 6,022 \cdot 10^{23} = 5,8 \cdot 10^{22} \text{ atoma Ag}$$

Svaki atom Ag ima jedan valentni (5s) elektron i za njihovo smeđtanje je

potrebno  $2,9 \cdot 10^{22}$  energetskih nivoa (stanja).

110. U metalnoj vezi elektroni nisu ograničeni (odnosno nisu podložni lokalizaciji) na prostor oko određenih jezgara ili parova jezgara.
111. Metal se može opisati kao mnoštvo pozitivnih jona u "moru" elektrona. Elektroni se mogu kretati po celoj masi metala i zato ne daju prednost ni jednom pravcu u prostoru. Atomi metala se pakuju tako da preklapanje valentnih orbitala sa susednih atoma bude što veće, kako bi se ostvarila efikasnija delokalizacija elektrona.
112. Pošto sile koje drže atome metala na okupu nisu usmerene, lako se vrši preraspodela jezgara bez bitnih promena u energiji elektronskog "mora". Kod staklastih materijala prevladaju kovalentne veze (u neuredjenoj makrostrukturi) koje se menjaju sa promenom položaja jezgara.
113.  $\epsilon_{0,146} = 672 \cdot \exp(-(0,146 - 0,134)/0,0529) = 536 \text{ kJ mol}^{-1}$   
 $\epsilon_{0,140} = 672 \cdot \exp(-(0,140 - 0,134)/0,0529) = 600 \text{ kJ mol}^{-1}$   
 Vezivna traka je od  $-1136 \text{ kJ mol}^{-1}$  do  $-64 \text{ kJ mol}^{-1}$   
 Antivezivna traka je od  $+64 \text{ kJ mol}^{-1}$  do  $+1136 \text{ kJ mol}^{-1}$   
 Jaz između traka je  $128 \text{ kJ mol}^{-1}$
114. Mg, Na, Be (B je slab provodnik)
115. Dobar provodnik 3 i 4  
 Poluprovodnik 2  
 Izolator 1
116. Prvi kompleks ima sve nivoe ili potpuno popunjene ili potpuno prazne. Drugi kompleks ima neparan broj elektrona i nepotpuno popunjen e nivo.
117.  $(:C:::N:)^-$  Na osnovu Lewis-ove formule bi negativno naelektrisanje bilo skoncentrisano na C atomu. Azot, kao elektronegativniji, privlači dobar deo elektronske gustine, ali je ipak veći deo negativnog naelektrisanja na C. Zato se ovaj kraj molekula orijentuje prema pozitivnom jonu Fe. Pored toga, interakcija d orbitala sa antivezivnim B orbitalama CN<sup>-</sup> je efikasnija preko C-kraja.

118.

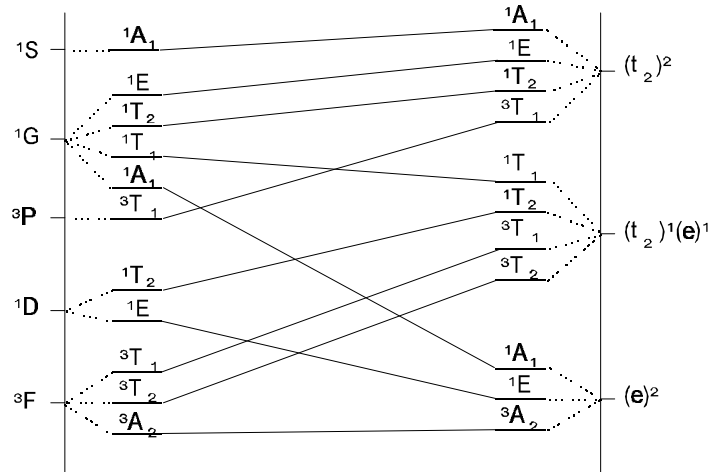


Ako uzmemo da se  $x$  i  $y$  osa poklapaju sa vezama Pt! Cl onda moñemo uo...iti sledefe tipove interakcije:  $p$  Orbitale Cl koje su orijentisane duñ  $x$  i  $y$  osa kompleksa interagovafe sa  $d(z^2)$  orbitalom Pt. Ovo je interakcija F tipa. Ostale  $p$  orbitale liganada fe ostvarivati B preklapanje sa ostalim  $d$  orbitalama

119. 1)  $d^3 : t_{2g}^3$ ; 2)  $d^8 : t_{2g}^6 e_g^2$ ; 3)  $d^7 : e^4 t_{2g}^3$ ; 4)  $d^2 : e^2$ ; 5)  $d^6 : t_{2g}^4 e_g^2$ ; 6)  $d^0$ ; 7)  $d^8 : e_g^4 a_{1g}^2 b_{2g}^2$ ; 8)  $d^6 : t_{2g}^4 e_g^2$ ; 9)  $d^5 : t_{2g}^5$ ; 10)  $d^3 : t_g^3$ ; 11)  $d^8 : 1a^2, 1b_1^2, 1b_2^2, 1b_3^2$

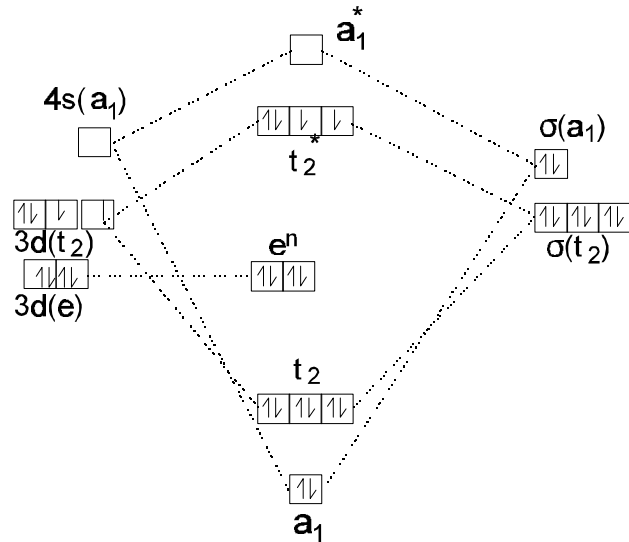
120. (2), (4), (5)

121.



122. U slobodnom CN<sup>!</sup> analiza populacije elektrona pokazuje da je formalno naelektrisanje C<sup>!0,55</sup>, N<sup>!0,45</sup>, a za liganu u [Co(CN)<sub>6</sub>]<sup>3!</sup> nalazimo da raspodela naelektrisanja C<sup>!0,34</sup>, N<sup>!0,38</sup>. Ovo zna...i da je 0,21e predano iz C orbitala ka Co u [Co(CN)<sub>6</sub>]<sup>3!</sup>, a 0,07e iz orbitala smeñtenih na N. Ukupan prenos naelektrisanja na Co od strane svakog liganada je ! 0,28e, a za ðest liganada nalazimo 6 x ! 0,28 = ! 1,68e na Co. Ovo smanjuje formalno naelektrisanje na Co od +3e na 1,32e. Ovaj rezultat, medjutim, dosta zavisi od izbora osnovnog skupa kod MO izra...unavanja.

123.



124. Za molekul  $\text{BeH}_2$  mogu se za svaku vezu napisati sledeće talasne funkcije (samo prostorni deo):

$$\text{za prvu vezu: } Q(\text{I}) = 1s_{\text{H}}(1)h_1(2) + 1s_{\text{H}}(2)h_1(1)$$

$$\text{za drugu vezu: } Q(\text{II}) = 1s_{\text{H}}(1)h_2(2) + 1s_{\text{H}}(2)h_2(1)$$

$h_1$  i  $h_2$  su hibridne atomske orbitale berilijuma:

$$h_1 = N(2s + 2p_z) \quad h_2 = N(2s - 2p_z)$$

Za linearnu konfiguraciju jezgara je  $\sigma = 1$ , pa je

$$h_1 = 2^{1/2}(2s + 2p_z) \quad h_2 = 2^{1/2}(2s - 2p_z)$$

Valentno stanje berilijuma u  $\text{BeH}_2$  je  $\text{Be}[1s^2, h_{\text{Be}}^2]$

125. Uslov ortogonalnosti:  $\int \psi_1 \psi_2 \, dv = 0$

$$\text{Uslov normiranja: } \int \psi^2 \, dv = 1$$

Uvrstiti  $R_1 = 2^{1/2}(s+p)$  i  $R_2 = 2^{1/2}(s-p)$  i rešiti.

126. Iz uslova normiranja,  $\int N^2 dv = 1$ , sledi  $N = (1+2)^{1/2}$  i  $N = (1-2)^{1/2}$ . Iz uslova ortogonalnosti sledi:  $\int (s+2p)(s-2p) dv = 0$ ; pa je  $1-2=0$ . Uslov da su  $N_1$  i  $N_2$  ekvivalentne zahteva da je  $2=2$ .

$$2 = 2 = 1, \quad N_1 = s + p, \quad N_2 = s - p$$

$$127. \int (1s_H)(sp)dv = 2^{1/2} \int s_H(s_C+p)dv = 2^{1/2}(0,57+0,46) = 0,728$$

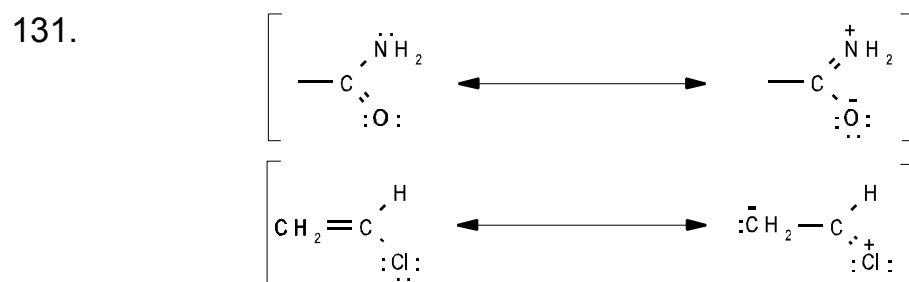
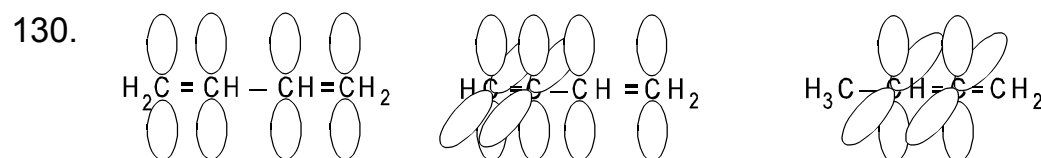
$$\int (1s_H)(sp^2)dv = 3^{1/2} \int s_H(s_C+2p)dv = 3^{1/2}(0,57+2 \cdot 0,46) = 0,705$$

$$\int (1s_H)(sp^3)dv = (1/2) \int s_H(s_C+3p)dv = (1/2)(0,57+3 \cdot 0,46) = 0,683$$

Konstante sile istezanja povefavaju se sa povefavanjem integrala preklapanja.

128. Planarni raspored liganada objaŇnjava se  $sp^2$  hibridizacijom. Metil-radikal ima 7 valentnih elektrona. Őest elektrona se nalazi u tri vezivne F-orbitale, a sedmi, nespareni, elektron se nalazi u B-orbitali (nehibridizovana  $p$ -orbitala ugljenika).

129.  $sp^2$  6  $sp^3$



132. U aproksimaciji savrŇenog sparivanja formiraju se parovi elektrona, tako da izmedju razli...itih parova interakcija bude vrlo mala. Elektroni se mogu razvrstati na one koji su blisko vezani za pojedine atome u molekulu i one koji obezbedjuju veze.

U molekulu vode moŇemo izdvojiti sledefe grupe elektrona i odgovarajufo energetske doprinose:

|   |       |
|---|-------|
| UnutraŇnji elektroni u kiseoniku            | $E_1$ |
| Elektroni u vezi H! O                       | $E_2$ |
| Elektroni u vezi H! O                       | $E_3$ |
| Slobodni elektronski par na kiseoniku       | $E_4$ |
| Drugi slobodni elektronski par na kiseoniku | $E_5$ |

$E_n$  ozna...ava energije elektronskih parova kada ne bili prisutni ostali



elektroni. Za ukupnu energiju treba uzeti u obzir interakcije između pojedinih parova elektrona. Ovi doprinose su označeni sa  $G_{nm}$ . Prema tome se ukupna energija molekula vode može definisati kao:

$$E = E_1 + E_2 + E_3 + E_4 + E_5 + G_{12} + G_{13} + G_{14} + G_{15} + G_{23} + G_{24} + G_{25} + G_{34} + G_{35} + G_{45}$$

133. MO:  $Q(1,2) = R(1)R(2)[(1)8(2)! (2)8(1)]$ ;  $R = c_1 N_{Li} + c_2 N_H$   
 VB:  $Q(1,2) = [N_H(1)N_H(2)][(1)8(2)! (2)8(1)]$   
 $[Li^+ :H^- \leftrightarrow Li-H]$

134. Pri rešavanju zadatka uzeti da su  $R(H|X)$  i  $R(H^+X^-)$  ortogonalne i normirane svaka za sebe, da  $R(H|X)$  nema dipolni momenat i da je za  $R(H^+X^-)$  dipolni momenat:  $= eR$ .

REŠENJE:  $P_{HF} = 41,2\%$   $P_{HCl} = 16,89\%$   $P_{HBr} = 12,3\%$   $P_{HI} = 5,8\%$

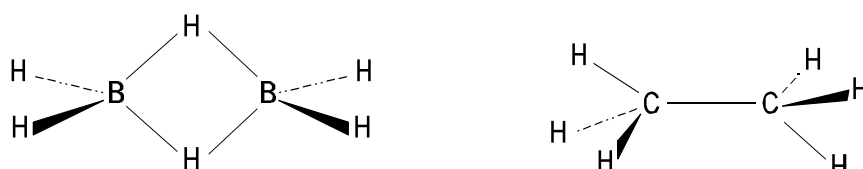
135. U oba slučaja koeficijent kovalentne strukture bi se povećavao, a koeficijent polarne strukture bi se smanjivao. (Ovo važi za disocijaciju u vakuumu.)

136. Prema modelu nezavisnih veza trebalo bi da butadien ima dvostruko veću toplotu hidrogenizacije od butena:  $50,0 \text{ mol}^{-1} = 100,0 \text{ kJ mol}^{-1}$ . Razlika do  $84,7 \text{ kJ mol}^{-1}$ , tj.  $15,3 \text{ kJ mol}^{-1}$  predstavlja rezonancionu energiju.

137. Nacrtati moguće strukture za molekul i proveriti da li ima koja od tih struktura zadovoljava neophodan uslov za stabilnost: da su vezivne orbitale potpuno popunjene elektronima.

138. To su molekuli u kojima nema dovoljno elektrona za pisanje odgovarajuće Lewis-ove formule sa oktetima oko svakog atoma.

139.



140. Na veličinu međumolekulskih sila utiču naelektrisanje u molekulu (jonovi), polarnost (dipolarni molekuli) i polarizabilnost (molekuli sa labavo vezanim, pokretljivim, elektronima).

141. Koristefi London-ovu formulu  $E^{London} = -\frac{3}{2} \frac{I_A I_B}{I_A + I_B} \frac{\alpha_A \alpha_B}{(4\pi\epsilon_0)^2 R^6}$

dobijamo:

$$E^{London} = -\frac{3}{2} \frac{1,18 \times 10^{-18}}{2} \frac{(0,67 \times 10^{30})^2 6,022 \times 10^{23}}{(265 \times 10^{12})^6} = -1263 \text{ Jmol}^{-1}$$

142. Za H@H,  $E = ! 6,499/8^6 = 65 \text{ J/mol}$

Za He@He,  $E = ! 1,471/8^6 = 15 \text{ J/mol}$

Interakcija He@He je, prema tome, samo oko 20% od interakcije H@H na udaljenosti  $R = 8 a_0$ .

143. Nisu usmerene i deluju izmedju ...estica koje se ne razlikuju po naelektrisanju.

144. Kovalentna veza je utoliko ja...a ukoliko je preklapanje izmedju orbitala susednih atoma vefe, Kod van der Waals-ovih interakcija je obrnuto.

145. Na malim razmacima izmedju jezgara kriva potencijalne energije ima prakti...no isti nagib kao i kriva odbojnog potencijala.

146. Kiseonik je elektronegativniji od ugljenika pa dipoli molekula imaju sledefi smer:

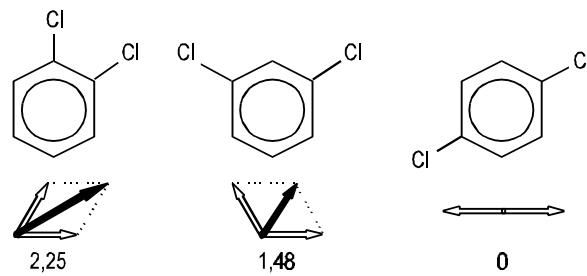


Ugljenik i vodonik imaju sli...ne elektronegativnosti, a pošto su C! O veze duñe od C! H veza, dipolni momenat dietil etra je vefi od dipolnog momenta vode.

147.  $\text{CH}_3\text{Cl}$  i  $\text{H}_2\text{O}$

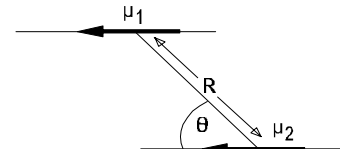
$\text{CCl}_4$  takodje ima polarne veze, ali se njihovi dipoli zbog simetri...nog rasporeda uzajamno potiru, tako da je rezultujufi dipolni momenat molekula jednak nuli.

148.



149. Energija interakcije dva dipola je data izrazom:

$$E = \frac{\mu_1 \mu_2}{4\pi\epsilon_0 R^3} (1 - 3\cos^2\theta)$$



Za optimalni raspored jezgara, kada su oba dipola u istoj liniji i jednakog smeru, energija iznosi:

$$E = \frac{-2\mu_1\mu_2}{4\pi\epsilon_0 R^3} = \frac{(2 \times 10^{-30})^2 \times (-2)}{4\pi \cdot 8,854 \times 10^{-12} \times 10^{-9}} =$$

$$= -1,438 \cdot 10^{-22} \text{ J}$$

150. Potencijal od naelektrisanja  $q$  je  $q/(4\pi\epsilon_0 R)$ . Kada je centar dipola na udaljenosti  $R$  od tačke, i dipol je usmeren ka njoj, naboj  $+q$  je na udaljenosti  $R + d/2$ , a naboj  $-q$  je na  $R - d/2$  od te tačke. Otuda je potencijal na toj tački jednak:

$$\begin{aligned} \phi &= \frac{q}{4\pi\epsilon_0 \left(R - \frac{d}{2}\right)} - \frac{q}{4\pi\epsilon_0 \left(R + \frac{d}{2}\right)} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 R} \left( \frac{1}{1 - \frac{d}{2R}} - \frac{1}{1 + \frac{d}{2R}} \right) = \\ &= \frac{q}{4\pi\epsilon_0 R} \left[ \left( 1 + \frac{d}{2R} + \dots \right) - \left( 1 - \frac{d}{2R} + \dots \right) \right] = \\ &\approx \frac{q}{4\pi\epsilon_0 R} \cdot \frac{2d}{2R} = \frac{qd}{4\pi\epsilon_0 R^2} = \frac{\mu}{4\pi\epsilon_0 R^2} \end{aligned}$$

Električno polje je negativan gradijent potencijala:

$$E = -\frac{d\phi}{dR} = \frac{2\mu}{4\pi\epsilon_0 R^3}$$

$$Za : = 1,84 \cdot 10^{-30} \text{ C m}$$

$$E = \frac{1,84 \cdot 3,34 \cdot 10^{-30} \text{ C m}}{1\pi \cdot (8,854 \cdot 10^{-12} \text{ J}^{-1} \text{ C}^2 \text{ m}^{-1} \text{ R}^3)} = \frac{1,105 \cdot 10^{-19}}{R^3} \text{ V m}^{-1}$$

(a)  $E = 1,11 \cdot 10^8 \text{ V m}^{-1}$  (b)  $E = 4,09 \cdot 10^9 \text{ V m}^{-1}$

(c)  $E = 4,09 \cdot 10^3 \text{ V m}^{-1}$

Pozitivan kraj dipola  $f_e$  zauzeti poloñaj bliñi anjonu. Kiseonik nosi negativan kraj dipola.

151. Izraz za elektrostatiku energiju interakcije izmedju jonova dat je uz problem 59. Born-ova energija odbijanja je data izrazom: ,

$$E_{\text{odb}} = \frac{B}{R^n} \text{ gde je } B \text{ konstanta}$$

koja zavisi od geometrije sistema, a  $n$  je koeficijent karakterističan za određenu konfiguraciju elektrona.

Za LiF se uzima srednja vrednost od He i Ne, tj., 6.

Ukupan izraz za interakciju izmedju jonova  $f_e$  biti:

$$E = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 R} + \frac{B}{R^n} \quad Y$$

$$Y = \frac{K}{R} + \frac{B}{R^6}$$

Za LiF to izlazi

$$E_{\text{LiF}} = \frac{-1,389 \cdot 10^{-4}}{R} + \frac{B}{R^6} ,$$

B određujemo iz uslova da na ravnotežnoj udaljenosti mora biti  $\frac{dE}{dR} = 0$

odnosno  $\frac{K}{R^2} - \frac{nB}{R^{n+1}} = 0$  , pa je  $B = \frac{KR^{n-1}}{n}$  .

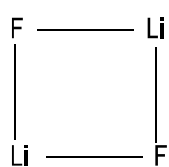
Za LiF je  $B = \frac{1,389 \cdot 10^{-4} \cdot (1,55 \cdot 10^{-10})^5}{6} = 2,071 \cdot 10^{-54}$

Energija molekula LiF  $f_e$  biti jednaka

| Konfiguracija plemenitog gasa | $n$ |
|-------------------------------|-----|
| ))))))))))                    | 5   |
| ))))))))))                    | 7   |
| ))))))))))                    | 9   |
| ))))))))))                    | 10  |
| ))))))))))                    | 12  |

$$E_{LiF} = -\frac{1,389 \cdot 10^{-4}}{1,55 \cdot 10^{-10}} + \frac{2,071 \cdot 10^{-54}}{(1,55 \cdot 10^{-10})^6} = -8,959 \cdot 10^5 \text{ J/mol} + 1,491 \cdot 10^5$$

J/mol = 746,8 kJ/mol



Kod planarnog dimera imamo sledeći raspored.

Kod njega postoje sledeće interakcije:

4 puta Li-F na udaljenosti R

Li-Li na udaljenosti  $\sqrt{2}R$

F-F na udaljenosti  $\sqrt{2}R$

Ukupna energija dimera iznosi:

$$E_{dim} = k \frac{\sqrt{2}-4}{R} + B \left( \frac{4}{R^6} + \frac{1}{(\sqrt{2}R)^5} + \frac{1}{(\sqrt{2}R)^7} \right)$$

U izrazu za Born-ovu energiju apsolutno će dominirati izraz  $B/(\sqrt{2}R)^7$  pa se formula može prostije napisati:

$$E_{dim} = K \frac{\sqrt{2}-4}{R} + \frac{B}{(\sqrt{2}R)^7}$$

B se i ovde izražava analogno postupku kod monomera, pa dobijamo:

$$B = 8,050 \cdot 10^{-63}$$

Ukupna energija dimera je

$$E_{dim} = \frac{(\sqrt{2}-4) \cdot 1,389 \cdot 10^{-4}}{1,55 \cdot 10^{-10}} + \frac{8,050 \cdot 10^{-63}}{(\sqrt{2} \cdot 1,55 \cdot 10^{-10})^7} =$$

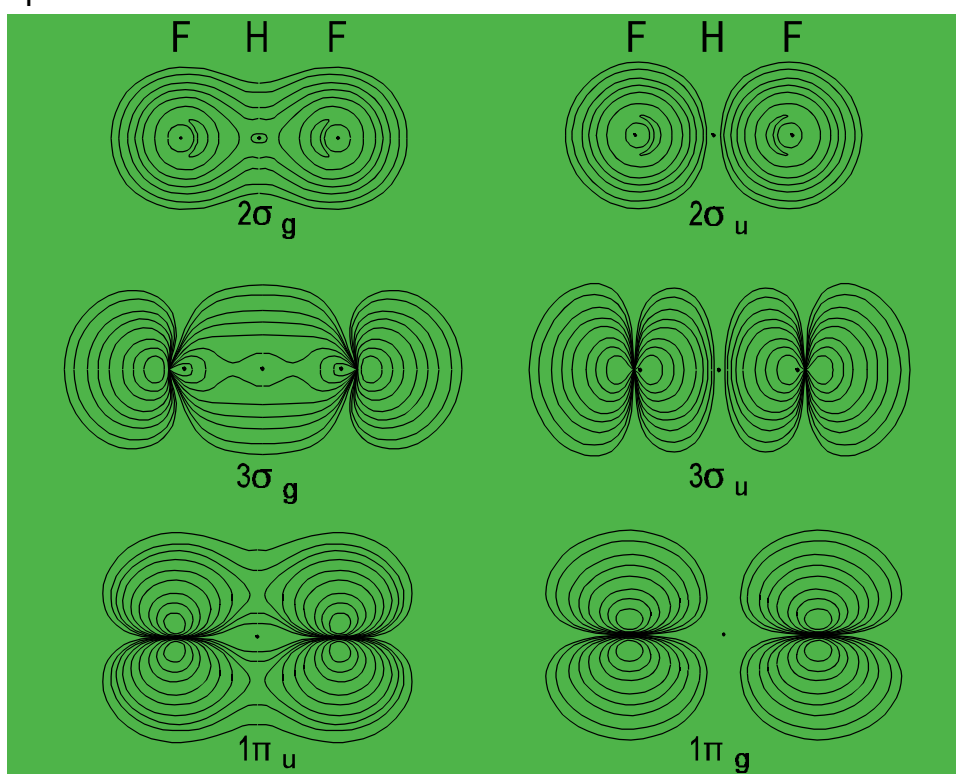
$$= -2,3172 \cdot 10^6 \text{ J/mol} + 3,310 \cdot 10^5 \text{ J/mol} = -1986,2 \text{ kJ/mol.}$$

Energija interakcije će biti:

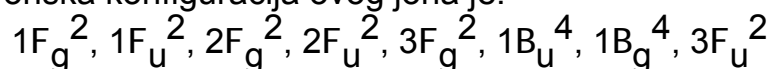
$$E_{int} = E_{dim} - 2E_{LiF} = -1986,2 - 2 \cdot 746,8 = -492,6 \text{ kJ/mol}$$

152. Vodonična veza između molekula HF je toliko jaka da se u gasovitom stanju obično javljaju molekuli  $(HF)_n$ , što znatno povećava relativnu molekulsku masu i utiče na povišavanje tačke ključanja.
153. Kiseonik je mnogo elektronegativniji od sumpora pa su vodonične veze u vodi mnogo jače nego u vodonik sulfidu. Za isparavanje vode potrebno je utrošiti energiju za raskidanje vodoničnih veza i zato je tačka ključanja vode nenormalno visoka. (Za  $H_2O$  dobrim delom važi i objašnjenje dato ranije za HF.)

154. Vodoni...na veza ima u znatnoj meri kovalentan karakter i zato se u kristalima vode optimalna interakcija medju molekulima ostvaruje u rasporedu koji odgovara strukturi dijamanta. To nije najgušće pakovanje, tako da pri kristalisanju izmedju molekula ostaje više prostora no u te...nom stanju. Zato led ima manju gustinu od te...ne vode na 0 °C.
155. Pošto se radi o linearnom i simetri...nom jonu, orbitale  $\text{HF}_2^+$  će biti istog tipa kao kod homonuklearnih dvoatomnih molekula:



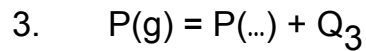
Elektronska konfiguracija ovog jona je:



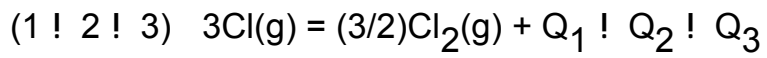
Za razliku od dvoatomnih molekula, ovde orbitale  $u$  simetrije nisu prave antivezivne, već nevezivne, što obezbedjuje da je u kona...nom bilansu sistem stabilan.

156. A

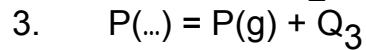
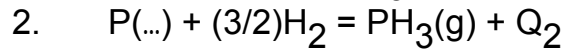
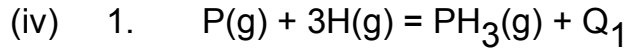
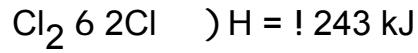
157. (i)  $(983 \text{ kJ})/3 = 328 \text{ kJ}$   
(ii)  $(958 \text{ kJ})/3 = 319 \text{ kJ}$   
(iii) 1.  $\text{P(g)} + 3\text{Cl(g)} = \text{PCl}_3\text{(g)} + Q_1$   
2.  $\text{P(...)} + (3/2)\text{Cl}_2\text{(g)} = \text{PCl}_3\text{(g)} + Q_2$



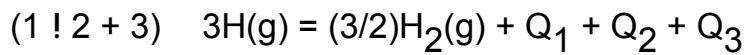
)))))))))



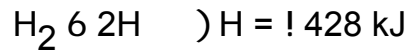
$! 938 \text{ kJ} + 305 \text{ kJ} + 314 \text{ kJ} = ! 364 \text{ kJ}$



)))))))))



$! 958 \text{ kJ} + 8,4 \text{ kJ} + 314 \text{ kJ} = ! 635 \text{ kJ}$



PRILOZI





## Prilog 1.

## VREDNOSTI NEKIH KORISNIH KONSTANTI

| Veličina  | SI Jedinice                                   | Atomske jedinice    |
|---|---|---------------------|
| Planck-ova konstanta  | $6,626 \times 10^{-34}$ J sec                 | 2B                  |
| Planck-ova konstanta $h/2B$   | $1,055 \times 10^{-34}$ J sec                 | 1                   |
| Masa mirovanja elektrona  | $9,110 \times 10^{-31}$ kg                    | 1                   |
| Naboj elektrona   | $-1,602 \times 10^{-19}$ C                    | -1                  |
| Masa mirovanja protona  | $1,673 \times 10^{-27}$ kg                    | $1,836 \times 10^3$ |
| Masa mirovanja neutrona   | $1,675 \times 10^{-27}$ kg                    | $1,839 \times 10^3$ |
| Brzina svetlosti u vakuumu  | $2,998 \times 10^8$ m/sec                     | 137,039             |
| Avogadro-ov broj  | $6,022 \times 10^{23}$ mol <sup>-1</sup>      |                     |
| Permitivnost slobodnog prostora<br>$\epsilon_0$   | $8,854 \times 10^{-12}$ F/m                   | 1                   |
| Boltzmann-ova konstanta   | $1,381 \times 10^{-23}$ J/K                   |                     |
| Dvostruka vrednost jonizacionog potencijala atoma vodonika sa beskonačnom masom jezgara | $4,360 \times 10^{-18}$ J                     | 1 Hartree           |
| Jakost električnog polja jedan Bohr-ov poluprečnik od jezgra                            | $5,142 \times 10^{11}$ V/m                    | 1                   |
| Polarizabilnost (molekula)  | $1,648 \times 10^{-41}$<br>$C^2 m^2 J^{-1}$   | 1                   |
| Bohr-ov magneton  | $9,274 \times 10^{-24}$ J/T                   | 1/2                 |
| Dipolni momenat elektron-protona udaljenih jedan Bohr-ov poluprečnik                    | $8,478 \times 10^{-30}$ C m<br>(2,542 debaja) | 1                   |
| Atomska jedinica vremena  | $2,419 \times 10^{-17}$ sec                   | 1                   |
| Bohr-ov poluprečnik   | $5,292 \times 10^{-11}$ m                     | 1 Bohr              |



## Prilog 2.

TABLICA ZA PRETVARANJE ENERGIJA IZRAĐENIH U RAZLIČNIM JEDINICAMA

|                 | J                      | J/mol                  | eV                     | m <sup>-1</sup>       | Hz <sup>*</sup>       | kcal/mol               | a.j.                   |
|-----------------|------------------------|------------------------|------------------------|-----------------------|-----------------------|------------------------|------------------------|
| J/molekul       | 1                      | 6,02@10 <sup>23</sup>  | 6,24@10 <sup>18</sup>  | 5,03@10 <sup>24</sup> | 1,51@10 <sup>33</sup> | 1,44@10 <sup>20</sup>  | 2,29@10 <sup>17</sup>  |
| J/mol           | 1,66@10 <sup>-24</sup> | 1                      | 1,04@10 <sup>-5</sup>  | 8,36                  | 2,50@10 <sup>9</sup>  | 2,39@10 <sup>-4</sup>  | 3,80@10 <sup>-7</sup>  |
| eV              | 1,60@10 <sup>-19</sup> | 9,65@10 <sup>4</sup>   | 1                      | 8,08@10 <sup>5</sup>  | 2,42@10 <sup>14</sup> | 23,06                  | 3,67@10 <sup>-2</sup>  |
| m <sup>-1</sup> | 1,99@10 <sup>-25</sup> | 0,120                  | 1,24@10 <sup>-6</sup>  | 1                     | 3,34@10 <sup>-9</sup> | 2,86@10 <sup>-5</sup>  | 1,56@10 <sup>-8</sup>  |
| Hz              | 6,63@10 <sup>-34</sup> | 3,99@10 <sup>-10</sup> | 4,14@10 <sup>-15</sup> | 3,00@10 <sup>8</sup>  | 1                     | 9,54@10 <sup>-14</sup> | 1,52@10 <sup>-16</sup> |
| kcal/mol        | 6,95@10 <sup>-21</sup> | 4,184@10 <sup>3</sup>  | 4,34@10 <sup>-2</sup>  | 3,49@10 <sup>4</sup>  | 1,05@10 <sup>13</sup> | 1                      | 1,5@10 <sup>-3</sup>   |
| a.j.            | 4,36@10 <sup>-18</sup> | 2,63@10 <sup>6</sup>   | 27,21                  | 2,19@10 <sup>7</sup>  | 6,58@10 <sup>15</sup> | 627,51                 | 1                      |

\* Jedinice Hz i m<sup>-1</sup> nisu prave dimenzije energije već su sa njom povezane relacijom  $E=h\nu$ , odnosno  $E=hc/\lambda$ .

Da bi se izvršilo pretvaranje jedinica iz leve kolone u jedinice u vrsti na vrhu, pomnožiti sa faktorom koji je u odgovarajućem položaju vrsta-kolona, npr., 1 kcal/mol = 4,184@10<sup>3</sup> = 4,184 kJ/mol.

Prilog 3.

### KORISNI INTEGRALI

$$\int x^n e^{ax} dx = (x^n e^{ax}/a) - (n/a) \int x^{n-1} e^{ax} dx$$

$$\int (\sin^n ax) dx = \frac{\sin^{n-1} ax \cdot \cos ax}{n \cdot a} + \frac{n-1}{n} \int (\sin^{n-2} ax) dx$$

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax} dx = (n!/a^{n+1}) = \Gamma_{n+1}(a), \quad n > -1, \quad a > 0$$

$$\int_0^{\infty} e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\pi/a}$$

$$\int_0^{\infty} x e^{-ax^2} dx = 1/2a$$

$$\int_0^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{4} \sqrt{\pi/a^3}$$

$$\int_0^{\infty} x^3 e^{-ax^2} dx = 1/2a^2$$

$$\int_0^{\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx = \frac{1 \cdot 3 \cdot \dots \cdot (2n-1)}{2^{n+1}} \sqrt{\frac{\pi}{a^{2n+1}}}$$

$$\int_0^{\infty} x^{2n+1} e^{-ax^2} dx = n!/2a^{n+1}$$

$$\int_1^{\infty} e^{-ax} dx = e^{-a}/a$$

$$\int_0^1 e^{-ax} dx = (1/a)(1 - e^{-a})$$

$$\int_1^{\infty} xe^{-ax} dx = (e^{-a}/a^2)(1 + a)$$

$$\int_0^1 xe^{-ax} dx = (1/a^2)[1 - e^{-a}(1 + a)]$$

$$\int_1^{\infty} x^2 e^{-ax} dx = (2e^{-a}/a^3)(1 + a + a^2/2)$$

$$\int_0^1 x^2 e^{-ax} dx = (2/a^3)[1 - e^{-a}(1 + a + a^2/2)]$$

$$\int_1^{\infty} x^n e^{-ax} dx = (n! e^{-a}/a^{n+1}) \sum_{k=0}^n a^k/k! \equiv A_n(a)$$

$$\int_y^{\infty} x^n e^{-ax} dx = (n! e^{-ay}/a^{n+1}) \sum_{k=0}^n (ay)^k/k!$$

$$\int_{-1}^{+1} e^{-ax} dx = (1/a)(e^a - e^{-a})$$

$$\int_{-1}^{+1} xe^{-ax} dx = (1/a^2)[e^a - e^{-a} - a(e^a + e^{-a})]$$

$$\int_{-1}^{+1} x^n e^{-ax} dx = (-1)^{n+1} A_n(-a) - A_n(a)$$

$$\int_{-1}^{+1} x^n dx = \begin{cases} 0 & n = 1, 3, 5, \dots \\ 2/(n+1) & n = 0, 2, 4, \dots \end{cases}$$

## Prilog 4.

**DETERMINANTE U KVANTNOJ HEMIJI**

Determinante se javljaju u kvantnoj hemiji u dva osnovna konteksta:

- (1) pri rešavanju sekularnih jednačina nastalih primenom varijacionog principa u iznalaženju najboljih koeficijenata LKAO, i
- (2) u opisu višeelektronskih talasnih funkcija u vidu Slater-ovih determinanti.

Zbog toga je korisno podsetiti se šta su determinante, kakve su osobine determinanti i kako se računava vrednost determinante.

*Determinanta* je skalar predstavljen u vidu skupa brojeva uredjenog u  $n$  redova i  $n$  kolona ( $n \geq 1$ ):

$$\begin{vmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{vmatrix}$$

*Osobine determinanti:*

- (1) Transponovanjem (medjusobnom izmenom redova i kolona) vrednost determinante ostaje nepromenjena.
- (2) Medjusobna izmena dva reda (ili dve kolone) menja znak determinante.
- (3) Množenjem svakog elementa jednog reda (ili jedne kolone) konstantom  $k$ , množi se vrednost determinante sa  $k$ .
- (4) Determinanta sa dva identična reda (ili kolone) jednaka je nuli.
- (5) Determinanta čiji su svi elementi jednog reda (ili kolone) nule takodje je jednaka nuli.
- (6) Determinanta ne menja vrednost ako svim elementima jednog reda (ili jedne kolone) dodamo elemente nekog drugog reda (ili kolone) pomnožene proizvoljnom konstantom.

Osobine (2) i (4) obezbeđuju matematički formalizam za definisanje Pauli-jevog principa kod konstruisanja višeelektronskih talasnih funkcija.

*Kofaktor* elementa  $D_{rs}$  determinante  $*D*$  je determinanta dobijena brisanjem  $r$ -tog reda  $s$ -te kolone, i pomnožena faktorom  $(-1)^{r+s}$ . Na primer za

gore pomenutu 3x3 determinantu,

$$\text{kofaktor elementa } a = (-1)^{1+1} \begin{vmatrix} \cancel{a} & \cancel{b} & \cancel{c} \\ d & e & f \\ g & h & i \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} e & f \\ h & i \end{vmatrix}$$

$$\text{kofaktor elementa } f = (-1)^{2+3} \begin{vmatrix} a & b & \cancel{c} \\ \cancel{d} & \cancel{e} & \cancel{f} \\ g & h & i \end{vmatrix} = - \begin{vmatrix} a & b \\ g & h \end{vmatrix}$$

Vrednost determinante definisana je na sledeci na...in.

(1) Za determinante dimenzija 2x2:

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12}$$

(2) Za determinante dimenzija 3x3:

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{21}a_{32}a_{13} - a_{31}a_{22}a_{23} - a_{23}a_{32}a_{11} - a_{21}a_{12}a_{33}$$

Odredjivanje vrednosti determinanti 2x2 i 3x3 moŕe se mnemoni...ki prikazati na sledeci na...in:

$$\begin{array}{c} + \\ \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} \\ - \end{array}$$

$$\begin{array}{cccc} + & + & + & - & - & - \\ \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{vmatrix} \end{array}$$

dakle, mnoŕe se elementi na dijagonalama, pri ...emu se proizvodi uzimaju sa znakom + ili -, kao ŕto je nazna...eno. Determinanta 3x3 je proŕirena prepisivanjem prve dve kolone iza trefe.

(3) Za determinante vefih dimenzija primenjuje se Laplace-ovo razvijanje koje se sastoji u tome da se determinanta predstavi kao suma proizvoda svih elemenata u jednom redu (ili koloni) sa odgovarajuim kofaktorima. Na primer:



$$\begin{vmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{vmatrix} = a \begin{vmatrix} e & f \\ h & i \end{vmatrix} - b \begin{vmatrix} d & f \\ g & i \end{vmatrix} + c \begin{vmatrix} d & e \\ g & h \end{vmatrix}$$

U ovom primeru sumu ...ine svi elementi prvog reda pomnoženi sa svojim kofaktorima. Laplace-ovo razvijanje primenjuje se sve dok se determinante ne svedu na 2x2 ili 3x3, koje se potom razvijaju na na...in opisan pod (1) ili (2). Tako se, na primer, determinanta dimenzija 5x5 razvije u pet 4x4 determinanti od kojih se svaka razvije u ...etri 3x3 determinante, a svaka od njih u tri 2x2 determinante, što daje ukupno 20 determinanti dimenzija 3x3, ili 60 determinanti dimenzija 2x2. O...igledno je da je ovaj metod zametan za determinante velikih dimenzija, zbog ...ega se u praksi vrednost velikih determinanti ra...una kompjuterski.

#### Rešavanje skupa linearnih homogenih jedna...ina

U Hhckel-ovoj metodi dobija se skup linearnih homogenih jedna...ina:

$$c_1(H_{11}-ES_{11}) + c_2(H_{12}-ES_{12}) + \dots + c_n(H_{1n}-ES_{1n}) = 0$$

$$c_1(H_{21}-ES_{21}) + c_2(H_{22}-ES_{22}) + \dots + c_n(H_{2n}-ES_{2n}) = 0$$

⋮  
⋮  
⋮

$$c_1(H_{n1}-ES_{n1}) + c_2(H_{n2}-ES_{n2}) + \dots + c_n(H_{nn}-ES_{nn}) = 0$$

gde su integralima  $H_{ij}$  i  $S_{ij}$  dodeljene određene vrednosti.

Problem se sastoji u tome da se nadju vrednosti za energije,  $E$ , za koje ovaj sistem jedna...ina ima netrivialna rešenja,  $c_j \dots 0$ , za bar neke od  $i=0,1,2,\dots,n$ .

**Ovaj uslov je ispunjen samo ako je determinanta sistema jednaka nuli:**

$$\begin{vmatrix} H_{11}-ES_{11} & H_{12}-ES_{12} & \dots & H_{1n}-ES_{1n} \\ H_{21}-ES_{21} & H_{22}-ES_{22} & \dots & H_{2n}-ES_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{n1}-ES_{n1} & H_{n2}-ES_{n2} & \dots & H_{nn}-ES_{nn} \end{vmatrix} = 0$$

Ova determinanta može da se razvije na gore opisani na...in u polinom  $n$ -tog stepena po  $E$ , ...ijim se rešavanjem dobija  $n$  vrednosti za  $E$ .

66

Za primere videti zadatke 83-107.

## Prilog 5.

**TEORIJA GRUPA SIMETRIJE****A. OSNOVNE DEFINICIJE**

*Operacija* je transformacija koordinatnog sistema, ili transformacija molekula u koordinatnom sistemu, kojom se molekul dovodi u novi položaj.

*Operacija simetrije* je operacija kojom se molekul dovodi u ekvivalentan položaj, tj. u položaj koji se ne može razlikovati od prvobitnog,

*Element simetrije* je geometrijski entitet (tačka, prava, ili ravan molekula) u odnosu na koji se može izvršiti data operacija simetrije.

*Grupa simetrije molekula.* Skup svih operacija simetrije za dati molekul čini grupu  $G$ . Grupa zadovoljava sledeća tri uslova:

- Kombinacija ("proizvod") dva elementa date grupe predstavlja takodje jedan od elemenata grupe
- Svaka grupa sadrži element identičnosti,  $E$ .
- Svakom elementu grupe odgovara inverzni element koji je takodje član iste grupe.
- Kombinacija (množenje) elemenata je asocijativna, ali ne uvek i komutativna.

*Podgrupa* je podskup elemenata jedne grupe koji čine grupu samu za sebe (tj., da zadovolji sva tri gore navedena uslova).

*Konjugovane operacije.* Operacije  $P$  i  $Q$  su konjugovane ako važi:

$$X^{-1} P X = Q \quad (\text{za svako } X \text{ koje pripada grupi } G)$$

*Red grupe ( $h$ )* je broj elemenata grupe. Kod grupa simetrije to je ukupan broj operacija simetrije date grupe.

*Klase operacija* su sve operacije konjugovane datoj operaciji  $P$ :

$$X^{-1} P X \quad (X \text{ pripada grupi } G)$$

Broj operacija koje pripadaju datoj klasi obeležava se sa  $g$ .

*Prikaz (reprezentacija)* je skup matematičkih entiteta (najčešće matrica) koji je izomorfan sa grupom operacija simetrije.

*Svodljiv prikaz (reducibilna reprezentacija)* je takav prikaz gde se sve matrice mogu na jedinstven način transformisati u blok-dijagonalni oblik.

*Nesvodljiv prikaz (ireducibilna reprezentacija)* je prikaz ...ije se matrice ne mogu transformisati u blok-dijagonalni oblik ni na koji na...in.

*Karakter prikaza* za datu klasu operacija simetrije je trag matrice ekvivalentne datoj klasi operacija simetrije za dati (svodljiv ili nesvodljiv) prikaz.

*Tablica karaktera* sadrži karaktere svih nesvodljivih prikaza sve klase operacije simetrije za datu grupu.

## B. ZNAČENJE OZNAKA U TABLICAMA KARAKTERA

### *Klase operacija simetrije*

- E operacija identi...nosti.
- $C_n$  rotacija za  $2\pi/n$ .
- $F_v$  refleksija u ravni koja sadrži glavnu osu rotacije.
- $F_h$  refleksija u ravni okomitoj na glavnu osu rotacije.
- $F_d$  refleksija u ravni koja sadrži glavnu osu rotacije ( $C_n > 2$ ) i polovi ugao između  $C_2$  osa okomitih na tu osu.
- i inverzija u centru
- $S_n$  rotacija za  $2\pi/n$  i zatim refleksija u ravni okomitoj na tu osu.

### *Nesvodljivi prikazi*

- ' opšta oznaka za (svodljiv ili nesvodljiv) prikaz.
  - A jednodimenzionalni prikaz simetri...an pri rotaciji za  $2\pi/n$  oko glavne  $C_n$  ose. (Za  $C_1$ ,  $C_s$  i  $C_i$  grupe ozna...ava samo jednodimenzionalni prikaz.)
  - B jednodimenzionalni prikaz antisimetri...an pri rotaciji za  $2\pi/n$  oko glavne  $C_n$  ose.
  - E dvodimenzionalni prikaz.
  - T (F) trodimenzionalni prikaz (u nekim tablicama se ozna...ava sa F).
  - G ...etverodimenzionalni prikaz (javlja se u ikozaedarskim grupama I i  $I_h$  ...ije tablice nisu ovde prikazane).
- kod aksijalnih grupa rotacije (tzv. linearnih grupa)  $C_{4v}$  i  $D_{4h}$ :
- E jednodimenzionalni prikaz.
  - A, ) dvodimenzionalni prikazi
- donji indeks:

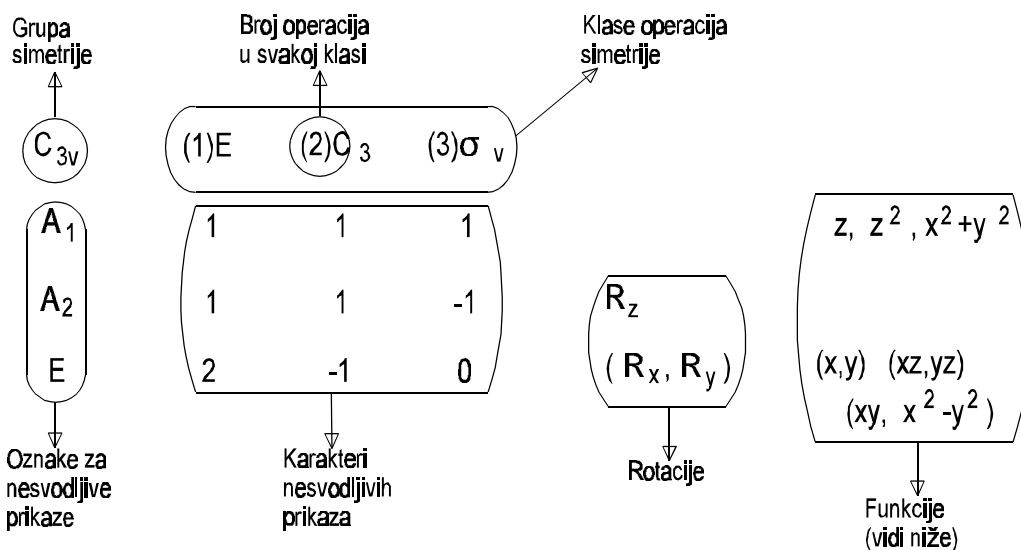
- 1 prikaz simetri...an pri  $F_v$  i  $F_d$  refleksiji, ili pri rotaciji oko  $C_2$  ose okomite na glavnu  $C_n$  ( $n>2$ ) osu.
- 2 prikaz antisimetri...an pri  $F_v$  i  $F_d$  refleksiji, ili pri rotaciji  $C_2$  ose okomite na glavnu  $C_n$  ( $n>2$ ) osu.
- g prikaz simetri...an pri inverziji u centru.
- u prikaz antisimetri...an pri inverziji u centru.

- gornji indeks:

- ' prikaz simetri...an pri  $F_h$  refleksiji (za linearnu grupu oznaka je +).
- " prikaz antisimetri...an pri  $F_h$  refleksiji (za linearnu grupu oznaka je -).

Prikaz je simetri...an u odnosu na određenu klasu operacija simetrije ako je odgovarajući karakter +1, a antisimetri...an ako je karakter -1.

### C. PRIMER ZA TABLICU KARAKTERA



U desnim kolonama tablica karaktera prikazane su funkcije ( $\Gamma$  i rotacije, R) koje imaju iste simetrijske osobine kao i odgovarajući nesvodljivi prikazi. Tako se za grupu simetrije  $C_{3v}$  kaže da, na primer, funkcije  $(xz, yz)$  uzete kao par

"...ine bazis (osnovu) za nesvodljiv prikaz E", ili

"pripadaju nesvodljivom prikazu E", ili

"transformišu se kao nesvodljiv prikaz E"

pri ...emu ove funkcije mogu biti, na primer,  $d_{xz}$  i  $d_{yz}$  orbitale.

#### D. SVODJENJE PRIKAZA

Ako je svodljiv prikaz  $\Gamma$  definisan kao:

$$\Gamma = \sum_i a_i \Gamma_i$$

$$a_i = \frac{1}{h} \sum_R g_R \chi_i(R) \chi(R)$$

tada je:

- gde je
- $a_i$  = ceo broj koji pokazuje koliko se puta  $i$ -ti nesvodljiv prikaz,  $\Gamma_i$ , nalazi u datom svodljivom prikazu.
  - $h$  = red grupe.
  - $g_R$  = karakter  $i$ -tog nesvodljivog prikaza koji odgovara operaciji simetrije R-te klase.
  - $\chi_i(R)$  = karakter svodljivog prikaza koji odgovara operaciji simetrije R-te klase.
  - $E_R$  = sabiranje po svim klasama operacija simetrije date grupe.

#### Primer za odredjivanje reda grupe i svodjenje prikaza

Red grupe,  $h$ , jednak je sumi kvadrata karaktera  $P(E)$  za sve nesvodljive prikaze:

$$\sum_i (\chi_i(E))^2 = h$$

Za grupu simetrije  $C_{3v}$ , na primer:

$$h = 1^2 + 1^2 + 2^2 = 6.$$

Svodljiv prikaz  $\Gamma$ , ...iji su karakteri 6 0 0 moñe se u grupi simetrije  $C_{3v}$  svesti na sledefi na...in (vidi zadatak 46):

$$a(A_1) = (1/6)\{(1@1@6)+(2@1@0)+(3@1@0)\} = 1$$

$$a(A_2) = (1/6)\{(1@1@6)+(2@1@0)+(3@1@0)\} = 1$$

$$a(E) = (1/6)\{(1@2@6)+(2@1@0)+(3@0@0)\} = 2$$

$$\Gamma = A_1 + A_2 + 2E .$$

## E. TABLICE KARAKTERA ZA NEKE VAŽNIJE GRUPE SIMETRIJE MOLEKULA

## Neaksijalne grupe

|       |   | $C_1$ |                 | $E$                         |
|-------|---|-------|-----------------|-----------------------------|
|       |   | A     |                 | 1                           |
| $C_i$ | E | i     |                 |                             |
| $A_g$ | 1 | 1     | $R_x, R_y, R_z$ | $x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz$ |
| $A_u$ | 1 | -1    | $x, y, z$       |                             |

|       |   | $C_s$ | $E$           | $F_h$               |  |  |
|-------|---|-------|---------------|---------------------|--|--|
| $A'$  | 1 | 1     | $x, y, R_z$   | $x^2, y^2, z^2, xy$ |  |  |
| $A''$ | 1 | -1    | $z, R_x, R_y$ | $xz, yz$            |  |  |

 $C_n$  Grupe ( $n = 2, 3, 4, 5, 6$ )

|   |   | $C_2$ | $E$              | $C_2$               |  |  |
|---|---|-------|------------------|---------------------|--|--|
| A | 1 | 1     | $z, R_z$         | $x^2, y^2, z^2, xy$ |  |  |
| B | 1 | -1    | $x, y, R_x, R_y$ | $xz, yz$            |  |  |

| $C_3$ | E | $C_3$ | $C_3^2$  |                    |                           | $g = \exp(2\pi i/3)$ |
|-------|---|-------|----------|--------------------|---------------------------|----------------------|
| A     | 1 | 1     | 1        | $z, R_z$           | $x^2 + y^2, z^2$          |                      |
| E     | 2 | 1     | $g, g^*$ | $(x, y)(R_x, R_y)$ | $(x^2 - y^2, xy)(xz, yz)$ |                      |

| $C_4$ | E | $C_4$ | $C_2$ | $C_4^3$ |                    |                  |
|-------|---|-------|-------|---------|--------------------|------------------|
| A     | 1 | 1     | 1     | 1       | $z, R_z$           | $x^2 + y^2, z^2$ |
| B     | 1 | -1    | 1     | -1      |                    | $x^2 - y^2, xy$  |
| E     | 2 | 1     | -1    | -1      | $(x, y)(R_x, R_y)$ | $(xz, yz)$       |





| $C_5$ | E | $C_5$    | $C_5^2$  | $C_5^3$ | $C_5^4$  |                   | $g=\exp(2Bi/5)$ |
|-------|---|----------|----------|---------|----------|-------------------|-----------------|
| A     | 1 | 1        | 1        | 1       | 1        | $z, R_z$          | $x^2+y^2, z^2$  |
| $E_1$ | 9 | $g^*$    | $g^{*2}$ | $g^2$   | $g^*$    | $(x,y)(R_x, R_y)$ | $(xz, yz)$      |
| $E_2$ | 9 | $g^{*2}$ | $g^*$    | $g^*$   | $g^{*2}$ | A                 | $(x^2-y^2, xy)$ |

| $C_6$ | E | $C_6$  | $C_3$  | $C_2$ | $C_3^2$ | $C_6^5$ |                   | $g=\exp(2Bi/6)$ |
|-------|---|--------|--------|-------|---------|---------|-------------------|-----------------|
| A     | 1 | 1      | 1      | 1     | 1       | 1       | $z, R_z$          | $x^2+y^2, z^2$  |
| B     | 1 | -1     | 1      | -1    | 1       | -1      |                   |                 |
| $E_1$ | 9 | $g^*$  | $-g^*$ | -1    | $-g^*$  | $g^*$   | $(x,y)(R_x, R_y)$ | $(xz, yz)$      |
| $E_2$ | 9 | $-g^*$ | $-g^*$ | 1     | $-g^*$  | $-g^*$  | A                 | $(x^2-y^2, xy)$ |

### $C_{nv}$ Grupe ( $n = 2, 3, 4, 5, 6$ )

| $C_2$ | E | $C_2$ | $F_v(xz)$ | $F_v'(yz)$ |          |                 |
|-------|---|-------|-----------|------------|----------|-----------------|
| $\nu$ |   |       |           |            |          |                 |
| $A_1$ | 1 | 1     | 1         | 1          | $z$      | $x^2, y^2, z^2$ |
| $A_2$ | 1 | 1     | -1        | -1         | $R_z$    | $xy$            |
| $B_1$ | 1 | -1    | 1         | -1         | $x, R_y$ | $xz$            |
| $B_2$ | 1 | -1    | -1        | 1          | $y, R_x$ | $yz$            |

| $C_3$ | E | $2C_3$ | $3F_v$ |                   |                         |
|-------|---|--------|--------|-------------------|-------------------------|
| $\nu$ |   |        |        |                   |                         |
| $A_1$ | 1 | 1      | 1      | $z$               | $x^2+y^2, z^2$          |
| $A_2$ | 1 | 1      | -1     | $R_z$             |                         |
| E     | 2 | -1     | 0      | $(x,y)(R_x, R_y)$ | $(x^2-y^2, xy)(xz, yz)$ |

| $C_4$ | E | $2C_4$ | $C_2$ | $2F_v$ | $2F_d$ |                     |                |
|-------|---|--------|-------|--------|--------|---------------------|----------------|
| $\nu$ |   |        |       |        |        |                     |                |
| $A_1$ | 1 | 1      | 1     | 1      | 1      | z                   | $x^2+y^2, z^2$ |
| $A_2$ | 1 | 1      | 1     | -1     | -1     | $R_z$               |                |
| $B_1$ | 1 | -1     | 1     | 1      | -1     |                     | $x^2-y^2$      |
| $B_2$ | 1 | -1     | 1     | -1     | 1      |                     | xy             |
| E     | 2 | 0      | -2    | 0      | 0      | (x,y)( $R_x, R_y$ ) | (xz,yz)        |

| $C_5$ | E | $2C_5$            | $2C_5^2$          | $5F_v$ |                     |                   |
|-------|---|-------------------|-------------------|--------|---------------------|-------------------|
| $\nu$ |   |                   |                   |        |                     |                   |
| $A_1$ | 1 | 1                 | 1                 | 1      | z                   | $x^2+y^2, z^2$    |
| $A_2$ | 1 | 1                 | 1                 | -1     | $R_z$               |                   |
| $E_1$ | 2 | $2\cos 72^\circ$  | $2\cos 144^\circ$ | 0      | (x,y)( $R_x, R_y$ ) | (xz,yz)           |
| $E_2$ | 2 | $2\cos 144^\circ$ | $2\cos 72^\circ$  | 0      |                     | ( $x^2-y^2, xy$ ) |

| $C_6$ | E | $2C_6$ | $2C_3$ | $C_2$ | $3F_v$ | $3F_d$ |                     |                   |
|-------|---|--------|--------|-------|--------|--------|---------------------|-------------------|
| $\nu$ |   |        |        |       |        |        |                     |                   |
| $A_1$ | 1 | 1      | 1      | 1     | 1      | 1      | z                   | $x^2+y^2, z^2$    |
| $A_2$ | 1 | 1      | 1      | 1     | -1     | -1     | $R_z$               |                   |
| $B_1$ | 1 | -1     | 1      | -1    | 1      | -1     |                     |                   |
| $B_2$ | 1 | -1     | 1      | -1    | -1     | 1      |                     |                   |
| $E_1$ | 2 | 1      | -1     | -2    | 0      | 0      | (x,y)( $R_x, R_y$ ) | (xz,yz)           |
| $E_2$ | 2 | -1     | -1     | 2     | 0      | 0      |                     | ( $x^2-y^2, xy$ ) |

### $C_{nh}$ Grupe ( $n = 2,3,4,5,6$ )

| $C_2$ | E | $C_2$ | i  | F   |            |                     |
|-------|---|-------|----|-----|------------|---------------------|
| $h$   |   |       |    | $h$ |            |                     |
| $A_g$ | 1 | 1     | 1  | 1   | $R_z$      | $x^2, y^2, z^2, xy$ |
| $B_g$ | 1 | -1    | 1  | -1  | $R_x, R_y$ | xz,yz               |
| $A_u$ | 1 | 1     | -1 | -1  | z          |                     |
| $B_u$ | 1 | -1    | -1 | 1   | x,y        |                     |

| $C_3$ |   | E | $C_3$ | $C_3^2$ | F  | $S_3$ | $S_3^2$ |   |              | $g=\exp(2\pi i/3)$ |
|-------|---|---|-------|---------|----|-------|---------|---|--------------|--------------------|
| h     |   |   |       |         | h  |       |         |   |              |                    |
| A'    |   | 1 | 1     | 1       | 1  | 1     | 1       |   | $R_z$        | $x^2+y^2, z^2$     |
| A''   |   | 1 | 1     | 1       | -1 | -1    | -1      |   | z            |                    |
| E'    | g | 1 | g     | g*      | 1  | g     | g*      | A | (x,y)        | $(x^2-y^2, xy)$    |
| E''   | g | 1 | g*    | g       | -1 | -g*   | -g      | A | $(R_x, R_y)$ | $(xz, yz)$         |

| $C_{4h}$       |   | E | $C_4$ | $C_2$ | $C_4^3$ | i  | $S_4^3$ | $F_h$ | $S_4$ |   |              |                |
|----------------|---|---|-------|-------|---------|----|---------|-------|-------|---|--------------|----------------|
| A <sub>g</sub> |   | 1 | 1     | 1     | 1       | 1  | 1       | 1     | 1     |   | $R_z$        | $x^2+y^2, z^2$ |
| B <sub>g</sub> |   | 1 | -1    | 1     | -1      | 1  | -1      | 1     | -1    |   |              | $x^2-y^2, xy$  |
| E <sub>g</sub> | g | 1 | i     | -1    | -i      | 1  | i       | -1    | -i    | A | $(R_x, R_y)$ | $(xz, yz)$     |
| A <sub>u</sub> |   | 1 | 1     | 1     | 1       | -1 | -1      | -1    | -1    |   | z            |                |
| B <sub>u</sub> |   | 1 | -1    | 1     | -1      | -1 | 1       | -1    | 1     |   |              |                |
| E <sub>u</sub> | g | 1 | i     | -1    | -i      | -1 | -i      | 1     | i     | A | (x,y)        |                |

| $C_{5h}$          |                | E | $C_5$           | $C_5^2$        | $C_5^3$         | $C_5^4$         | $F_h$ | $S_5$           | $S_5^7$         | $S_5^3$          | $S_5^9$          |       | $g=\exp(2\pi i/5)$ |            |
|-------------------|----------------|---|-----------------|----------------|-----------------|-----------------|-------|-----------------|-----------------|------------------|------------------|-------|--------------------|------------|
| A'                |                | 1 | 1               | 1              | 1               | 1               | 1     | 1               | 1               | 1                | 1                | $R_z$ | $x^2+y^2, z^2$     |            |
| E <sub>1</sub> '  | g              | 1 | g               | g <sup>2</sup> | g <sup>*2</sup> | g*              | 1     | g               | g <sup>2</sup>  | g <sup>*2</sup>  | g*               | A     | (x,y)              |            |
| E <sub>2</sub> '  | g <sup>2</sup> | 1 | g <sup>*2</sup> | g*             | g               | g <sup>*2</sup> | 1     | g <sup>2</sup>  | g*              | g                | g <sup>*2</sup>  | A     | $(x^2-y^2, xy)$    |            |
| A''               |                | 1 | 1               | 1              | 1               | 1               | -1    | -1              | -1              | -1               | -1               |       | z                  |            |
| E <sub>1</sub> '' | g              | 1 | g               | g <sup>2</sup> | g <sup>*2</sup> | g*              | -1    | -g              | -g <sup>2</sup> | -g <sup>*2</sup> | -g*              | A     | $(R_x, R_y)$       | $(xz, yz)$ |
| E <sub>2</sub> '' | g <sup>2</sup> | 1 | g <sup>*2</sup> | g*             | g               | g <sup>*2</sup> | -1    | -g <sup>2</sup> | -g*             | -g               | -g <sup>*2</sup> | A     |                    |            |



|         |   |    |    |    |    |    |              |                 |
|---------|---|----|----|----|----|----|--------------|-----------------|
| $A_1'$  | 1 | 1  | 1  | 1  | 1  | 1  |              | $x^2+y^2, z^2$  |
| $A_2'$  | 1 | 1  | -1 | 1  | 1  | -1 | $R_z$        |                 |
| $E'$    | 2 | -1 | 0  | 2  | -1 | 0  | $(x,y)$      | $(x^2-y^2, xy)$ |
| $A_1''$ | 1 | 1  | 1  | -1 | -1 | -1 |              |                 |
| $A_2''$ | 1 | 1  | -1 | -1 | -1 | 1  | $z$          |                 |
| $E''$   | 2 | -1 | 0  | -2 | 1  | 0  | $(R_x, R_y)$ | $(xz, yz)$      |

| D <sub>4h</sub> | E | 2C <sub>4</sub> | C <sub>2</sub> | 2C <sub>2</sub> ' | 2C <sub>2</sub> " | i  | 2S <sub>4</sub> | F <sub>h</sub> | 2F <sub>v</sub> | 2F <sub>d</sub> |                                   |  |
|-----------------|---|-----------------|----------------|-------------------|-------------------|----|-----------------|----------------|-----------------|-----------------|-----------------------------------|--|
| A <sub>1g</sub> | 1 | 1               | 1              | 1                 | 1                 | 1  | 1               | 1              | 1               | 1               |                                   | x <sup>2</sup> +y <sup>2</sup> ,z <sup>2</sup> |
| A <sub>2g</sub> | 1 | 1               | 1              | -1                | -1                | 1  | 1               | 1              | -1              | -1              | R <sub>Z</sub>                    | x <sup>2</sup> -y <sup>2</sup>                 |
| B <sub>1g</sub> | 1 | -1              | 1              | 1                 | -1                | 1  | -1              | 1              | 1               | -1              |                                   | xy   |
| B <sub>2g</sub> | 1 | -1              | 1              | -1                | 1                 | 1  | -1              | 1              | -1              | 1               | (R <sub>x</sub> ,R <sub>y</sub> ) | (xz,yz)  |
| E <sub>g</sub>  | 2 | 0               | -2             | 0                 | 0                 | 2  | 0               | -2             | 0               | 0               | )                                 |  |
| A <sub>1u</sub> | 1 | 1               | 1              | 1                 | 1                 | -1 | -1              | -1             | -1              | -1              |                                   |  |
| A <sub>2u</sub> | 1 | 1               | 1              | -1                | -1                | -1 | -1              | -1             | 1               | 1               |                                   |  |
| B <sub>1u</sub> | 1 | -1              | 1              | 1                 | -1                | -1 | 1               | -1             | -1              | 1               | z                                 |  |
| B <sub>2u</sub> | 1 | -1              | 1              | -1                | 1                 | -1 | 1               | -1             | 1               | -1              |                                   |  |
| E <sub>u</sub>  | 2 | 0               | -2             | 0                 | 0                 | -2 | 0               | 2              | 0               | 0               | (x,y)                             |  |

| D <sub>5h</sub>  | E | 2C <sub>5</sub> | 2C <sub>5</sub> <sup>2</sup> | 5C <sub>2</sub> | F  | 2S <sub>5</sub> | 2S <sub>5</sub> <sup>3</sup> | 5F <sub>v</sub> |                                   |  |
|------------------|---|-----------------|------------------------------|-----------------|----|-----------------|------------------------------|-----------------|-----------------------------------|--|
| A <sub>1</sub> ' | 1 | 1               | 1                            | 1               | 1  | 1               | 1                            | 1               |                                   | x <sup>2</sup> +y <sup>2</sup> ,z <sup>2</sup> |
| A <sub>2</sub> ' | 1 | 1               | 1                            | -1              | 1  | 1               | 1                            | -1              | R <sub>Z</sub>                    |  |
| E <sub>1</sub> ' | 2 | 2cos72°         | 2cos144°                     | 0               | 2  | 2cos72°         | 2cos144°                     | 0               | (x,y)                             |  |
| E <sub>2</sub> ' | 2 | 2cos144°        | 2cos72°                      | 0               | 2  | 2cos144°        | 2cos72°                      | 0               |                                   | (x <sup>2</sup> -y <sup>2</sup> ,xy)           |
| A <sub>1</sub> " | 1 | 1               | 1                            | 1               | -1 | -1              | -1                           | -1              |                                   |  |
| A <sub>2</sub> " | 1 | 1               | 1                            | -1              | -1 | -1              | -1                           | 1               | z                                 |  |
| E <sub>1</sub> " | 2 | 2cos72°         | 2cos144°                     | 0               | -2 | -2cos72°        | -2cos144°                    | 0               | (R <sub>x</sub> ,R <sub>y</sub> ) | (xz,yz)  |
| E <sub>2</sub> " | 2 | 2cos144°        | 2cos72°                      | 0               | -2 | -2cos144°       | -2cos72°                     | 0               | )                                 |  |

| D <sub>6h</sub> | E | 2C <sub>6</sub> | 2C <sub>3</sub> | C <sub>2</sub> | 3C <sub>2</sub> ' | 3C <sub>2</sub> " | i  | 2S <sub>3</sub> | 2S <sub>6</sub> | F <sub>h</sub> | 3F <sub>d</sub> | 3F <sub>v</sub> |                                   |  |
|-----------------|---|-----------------|-----------------|----------------|-------------------|-------------------|----|-----------------|-----------------|----------------|-----------------|-----------------|-----------------------------------|--|
| A <sub>1g</sub> | 1 | 1               | 1               | 1              | 1                 | 1                 | 1  | 1               | 1               | 1              | 1               | 1               |                                   | x <sup>2</sup> +y <sup>2</sup> ,z <sup>2</sup> |
| A <sub>2g</sub> | 1 | 1               | 1               | 1              | -1                | -1                | 1  | 1               | 1               | 1              | -1              | -1              | R <sub>Z</sub>                    |  |
| B <sub>1g</sub> | 1 | -1              | 1               | -1             | 1                 | -1                | 1  | -1              | 1               | -1             | 1               | -1              |                                   |  |
| B <sub>2g</sub> | 1 | -1              | 1               | -1             | -1                | 1                 | 1  | -1              | 1               | -1             | -1              | 1               |                                   |  |
| E <sub>1g</sub> | 2 | 1               | -1              | -2             | 0                 | 0                 | 2  | 1               | -1              | -2             | 0               | 0               | (R <sub>x</sub> ,R <sub>y</sub> ) | (xz,yz)  |
| E <sub>2g</sub> | 2 | -1              | -1              | 2              | 0                 | 0                 | 2  | -1              | -1              | 2              | 0               | 0               | )                                 | (x <sup>2</sup> -y <sup>2</sup> ,xy)           |
| A <sub>1u</sub> | 1 | 1               | 1               | 1              | 1                 | 1                 | -1 | -1              | -1              | -1             | -1              | -1              |                                   |  |
| A <sub>2u</sub> | 1 | 1               | 1               | 1              | -1                | -1                | -1 | -1              | -1              | -1             | 1               | 1               |                                   |  |
| B <sub>1u</sub> | 1 | -1              | 1               | -1             | 1                 | -1                | -1 | 1               | -1              | 1              | -1              | 1               | z                                 |  |
| B <sub>2u</sub> | 1 | -1              | 1               | -1             | -1                | 1                 | -1 | 1               | -1              | 1              | 1               | -1              |                                   |  |
| E <sub>1u</sub> | 2 | 1               | -1              | -2             | 0                 | 0                 | -2 | -1              | 1               | 2              | 0               | 0               |                                   |  |
| E <sub>2u</sub> | 2 | -1              | -1              | 2              | 0                 | 0                 | -2 | 1               | 1               | -2             | 0               | 0               | (x,y)                             |  |



**S<sub>4</sub> Grupa**

| S <sub>4</sub> | E | S <sub>4</sub> | C <sub>2</sub> | S <sub>4</sub> <sup>3</sup> |  |  |
|----------------|---|----------------|----------------|-----------------------------|--|--|
| A              | 1 | 1              | 1              | 1                           | R <sub>z</sub>                         | x <sup>2</sup> +y <sup>2</sup> ,z <sup>2</sup> |
| B              | 1 | -1             | 1              | -1                          | z                                      | x <sup>2</sup> -y <sup>2</sup> ,xy             |
| E              | 1 | i              | -1             | -i                          | (x,y)(R <sub>x</sub> ,R <sub>y</sub> ) | (xz,yz)  |
|                | 9 | 1              | -i             | -1                          | i                                      | A  |

**Kubne grupe**

| T <sub>d</sub> | E | 8C <sub>3</sub> | 3C <sub>2</sub> | 6S <sub>4</sub> | 6F <sub>d</sub> |   |  |
|----------------|---|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|---|--|
| A <sub>1</sub> | 1 | 1               | 1               | 1               | 1               |   | x <sup>2</sup> +y <sup>2</sup> +z <sup>2</sup>                                     |
| A <sub>2</sub> | 1 | 1               | 1               | -1              | -1              |   |  |
| E              | 2 | -1              | 2               | 0               | 0               |   | (2z <sup>2</sup> -x <sup>2</sup> -y <sup>2</sup> ,x <sup>2</sup> -y <sup>2</sup> ) |
| T <sub>1</sub> | 3 | 0               | -1              | 1               | -1              | (R <sub>x</sub> ,R <sub>y</sub> ,R <sub>z</sub> ) |  |
| T <sub>2</sub> | 3 | 0               | -1              | -1              | 1               | (x,y,z)   | (xy,xz,yz)   |

| O <sub>h</sub>  | E | 8C <sub>3</sub> | 6C <sub>2</sub> | 6C <sub>4</sub> | 3C <sub>2</sub> | i  | 6S <sub>4</sub> | 8S <sub>6</sub> | 3F <sub>h</sub> | 6F <sub>d</sub> |   |  |
|-----------------|---|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|----|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|---|--|
| A <sub>1g</sub> | 1 | 1               | 1               | 1               | 1               | 1  | 1               | 1               | 1               | 1               |   | x <sup>2</sup> +y <sup>2</sup> +z <sup>2</sup>                                     |
| A <sub>2g</sub> | 1 | 1               | -1              | -1              | 1               | 1  | -1              | 1               | 1               | -1              |   |  |
| E <sub>g</sub>  | 2 | -1              | 0               | 0               | 2               | 2  | 0               | -1              | 2               | 0               |   | (2z <sup>2</sup> -x <sup>2</sup> -y <sup>2</sup> ,x <sup>2</sup> -y <sup>2</sup> ) |
| T <sub>1g</sub> | 3 | 0               | -1              | 1               | -1              | 3  | 1               | 0               | -1              | -1              | (R <sub>x</sub> ,R <sub>y</sub> ,R <sub>z</sub> ) |  |
| T <sub>2g</sub> | 3 | 0               | 1               | -1              | -1              | 3  | -1              | 0               | -1              | 1               |   | (xy,xz,yz)   |
| A <sub>1u</sub> | 1 | 1               | 1               | 1               | 1               | -1 | -1              | -1              | -1              | -1              |   |  |
| A <sub>2u</sub> | 1 | 1               | -1              | -1              | 1               | -1 | 1               | -1              | -1              | 1               |   |  |
| E <sub>u</sub>  | 2 | -1              | 0               | 0               | 2               | -2 | 0               | 1               | -2              | 0               |   |  |
| T <sub>1u</sub> | 3 | 0               | -1              | 1               | -1              | -3 | -1              | 0               | 1               | 1               | (x,y,z)   |  |
| T <sub>2u</sub> | 3 | 0               | 1               | -1              | -1              | -3 | 1               | 0               | 1               | -1              |   |  |



## Aksijalne grupe

| $C_{4v}$          | E        | $2C_4^N$   | $\infty$ | $4C_2$   |                  |                 |
|-------------------|----------|------------|----------|----------|------------------|-----------------|
| $A_1 / E^+$       | 1        | 1          | $\infty$ | 1        | z                | $x^2+y^2, z^2$  |
| $A_2 / E^-$       | 1        | 1          | $\infty$ | -1       | $R_z$            |                 |
| $E_1 / A$         | 2        | $2\cos N$  | $\infty$ | 0        | $(x,y)(R_x,R_y)$ | $(xz,yz)$       |
| $E_2 / \setminus$ | 2        | $2\cos 2N$ | $\infty$ | 0        |                  | $(x^2-y^2, xy)$ |
| $E_3 / M$         | 2        | $2\cos 3N$ | $\infty$ | 0        |                  |                 |
| $\infty$          | $\infty$ | $\infty$   | $\infty$ | $\infty$ |                  |                 |

| $D_{4h}$      | E        | $2C_4^N$   | $\infty$ | $4C_2$   | i        | $2C_2^N$    | $\infty$ | $4C_2$   |              |                 |
|---------------|----------|------------|----------|----------|----------|-------------|----------|----------|--------------|-----------------|
| $E_g^+$       | 1        | 1          | $\infty$ | 1        | 1        | 1           | $\infty$ | 1        |              | $x^2+y^2, z^2$  |
| $E_g^-$       | 1        | 1          | $\infty$ | -1       | 1        | 1           | $\infty$ | -1       | $R_z$        |                 |
| $A_g$         | 2        | $2\cos N$  | $\infty$ | 0        | 2        | $-2\cos N$  | $\infty$ | 0        | $(R_x, R_y)$ | $(xz, yz)$      |
| $\setminus_g$ | 2        | $2\cos 2N$ | $\infty$ | 0        | 2        | $2\cos 2N$  | $\infty$ | 0        |              | $(x^2-y^2, xy)$ |
| $\infty$      | $\infty$ | $\infty$   | $\infty$ | $\infty$ | $\infty$ | $\infty$    | $\infty$ | $\infty$ |              |                 |
| $E_u^+$       | 1        | 1          | $\infty$ | 1        | -1       | -1          | $\infty$ | -1       | z            |                 |
| $E_u^-$       | 1        | 1          | $\infty$ | -1       | -1       | -1          | $\infty$ | 1        |              |                 |
| $A_u$         | 2        | $2\cos N$  | $\infty$ | 0        | -2       | $2\cos N$   | $\infty$ | 0        | $(x,y)$      |                 |
| $\setminus_u$ | 2        | $2\cos 2N$ | $\infty$ | 0        | -2       | $-2\cos 2N$ | $\infty$ | 0        |              |                 |
| $\infty$      | $\infty$ | $\infty$   | $\infty$ | $\infty$ | $\infty$ | $\infty$    | $\infty$ | $\infty$ |              |                 |

## F. TABLICE DIREKTHNIH PROIZVODA

Direktan proizvod dva nesvodljiva prikaza dobija se množenjem odgovarajućih karaktera za svaku klasu operacija simetrije i, ako je dobijen prikaz svodljiv, svodjenjem na sumu nesvodljivih prikaza (vidi zadatak 71 i 72).

*Opšta pravila:*  $g \otimes g = g$ ,  $u \otimes u = g$ ,  $u \otimes g = g$ ,  $g \otimes u = u$ . Isto važi za prikaze na gornjim indeksima ' i '. Uglavina zagrada, [ ], se koristi za označavanje antisimetrične komponente proizvoda degerisanog prikaza sa samim sobom.

*Direktan proizvod imaginarnih karaktera* se dobija množenjem svakog od dva navedena niza karaktera prikaza E koristeći sledeća pravila:

$$\varepsilon \times \varepsilon = \varepsilon^*$$

$$\varepsilon \times \varepsilon^* = 1$$

$$\varepsilon^* \times \varepsilon^* = \varepsilon$$

Tako na primer, direktan proizvod ExE u grupi  $C_3$  dobija se na sledefi na...in:

$$(1 \ \varepsilon \ \varepsilon^*) \times (1 \ \varepsilon \ \varepsilon^*) = 1 \ \varepsilon^* \ \varepsilon$$

$$(1 \ \varepsilon^* \ \varepsilon) \times (1 \ \varepsilon^* \ \varepsilon) = 1 \ \varepsilon \ \varepsilon^*$$

$$(1 \ \varepsilon^* \ \varepsilon) \times (1 \ \varepsilon \ \varepsilon^*) = 1 \ 1 \ 1$$

$$(1 \ \varepsilon \ \varepsilon^*) \times (1 \ \varepsilon^* \ \varepsilon) = 1 \ 1 \ 1$$

Óto o...igledno iznosi  $E+2A$ .

*Primena u kvantnoj hemiji.* Integral je razli...it od nule ako direktan proizvod nesvodljivih prikaza kojima pripadaju funkcije (i operator) pod integralom sadrñi potpuno simetri...an nesvodljiv prikaz  $A_{1g}$  (ili  $A_1$  odnosno A), tj. prikaz ...iji su karakteri za sve klase operacija simetrije jednaki jedinici

Za  $T, O, T_h, O_h, T_d$

---



---

|        | $A_1$ | $A_2$ | E             | $T_1$             | $T_2$             |
|--------|-------|-------|---------------|-------------------|-------------------|
| )))))) |       |       |               |                   |                   |
| $A_1$  | $A_1$ | $A_2$ | E             | $T_1$             | $T_2$             |
| $A_2$  |       | $A_1$ | E             | $T_2$             | $T_1$             |
| E      |       |       | $A_1+[A_2]+E$ | $T_1+T_2$         | $T_1+T_2$         |
| $T_1$  |       |       |               | $A_1+E+[T_1]+T_2$ | $A_2+E+T_1+T_2$   |
| $T_2$  |       |       |               |                   | $A_1+E+[T_1]+T_2$ |

---



---

Za  $C_2, C_3, C_6, D_3, D_6, C_{2v}, C_{3v}, C_{6v}, C_{2h}, C_{3h}, C_{6h}, D_{3h}, D_{6h}, D_{3d}, S_6$

---



---

|        | $A_1$ | $A_2$ | $B_1$ | $B_2$ | $E_1$           | $E_2$           |
|--------|-------|-------|-------|-------|-----------------|-----------------|
| )))))) |       |       |       |       |                 |                 |
| $A_1$  | $A_1$ | $A_2$ | $B_1$ | $B_2$ | $E_1$           | $E_2$           |
| $A_2$  |       | $A_1$ | $B_2$ | $B_1$ | $E_1$           | $E_2$           |
| $B_1$  |       |       | $A_1$ | $A_2$ | $E_2$           | $E_1$           |
| $B_2$  |       |       |       | $A_1$ | $E_2$           | $E_1$           |
| $E_1$  |       |       |       |       | $A_1+[A_2]+E_2$ | $B_1+B_2+E_1$   |
| $E_2$  |       |       |       |       |                 | $A_1+[A_2]+E_2$ |

---



---

---



---

**Za  $D_2, D_{2h}$** 


---



---

|                |   |                |                |                |
|----------------|---|----------------|----------------|----------------|
|                | A | B <sub>1</sub> | B <sub>2</sub> | B <sub>3</sub> |
| ))))))))))     |   |                |                |                |
| A              | A | B <sub>1</sub> | B <sub>2</sub> | B <sub>3</sub> |
| B <sub>1</sub> |   | A              | B <sub>3</sub> | B <sub>2</sub> |
| B <sub>2</sub> |   |                | A              | B <sub>1</sub> |
| B <sub>3</sub> |   |                |                | A              |

---



---



---



---

**Za  $C_4, D_4, C_{4v}, C_{4h}, D_{4h}, D_{2d}, S_4$** 


---



---

|                |                |                |                |                |  |
|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|--|
|                | A <sub>1</sub> | A <sub>2</sub> | B <sub>1</sub> | B <sub>2</sub> | E  |
| ))))))))))     |                |                |                |                |  |
| A <sub>1</sub> | A <sub>1</sub> | A <sub>2</sub> | B <sub>1</sub> | B <sub>2</sub> | E  |
| A <sub>2</sub> |                | A <sub>1</sub> | B <sub>2</sub> | B <sub>1</sub> | E  |
| B <sub>1</sub> |                |                | A <sub>1</sub> | A <sub>2</sub> | E  |
| B <sub>2</sub> |                |                |                | A <sub>1</sub> | E  |
| E              |                |                |                |                | A <sub>1</sub> +A <sub>2</sub> +B <sub>1</sub> +B <sub>2</sub> |

---



---



---



---

**Za  $C_5, D_5, C_{5v}, C_{5h}, D_{5h}, D_{5d}$** 


---



---

|                |                |                |  |  |
|----------------|----------------|----------------|--|--|
|                | A <sub>1</sub> | A <sub>2</sub> | E <sub>1</sub>                                 | E <sub>2</sub>                                 |
| ))))))))))     |                |                |  |  |
| A <sub>1</sub> | A <sub>1</sub> | A <sub>2</sub> | E <sub>1</sub>                                 | E <sub>2</sub>                                 |
| A <sub>2</sub> |                | A <sub>1</sub> | E <sub>1</sub>                                 | E <sub>2</sub>                                 |
| E <sub>1</sub> |                |                | A <sub>1</sub> +A <sub>2</sub> +E <sub>2</sub> | E <sub>1</sub> +E <sub>2</sub>                 |
| E <sub>2</sub> |                |                |  | A <sub>1</sub> +A <sub>2</sub> +E <sub>1</sub> |

---



---



---



---

**Za  $D_{4d}, S_8$** 


---



---

|                |                |                |                |                |  |  |  |
|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|--|--|--|
|                | A <sub>1</sub> | A <sub>2</sub> | B <sub>1</sub> | B <sub>2</sub> | E <sub>1</sub>                                 | E <sub>2</sub>   | E <sub>3</sub>                                 |
| ))))))))))     |                |                |                |                |  |  |  |
| A <sub>1</sub> | A <sub>1</sub> | A <sub>2</sub> | B <sub>1</sub> | B <sub>2</sub> | E <sub>1</sub>                                 | E <sub>2</sub>   | E <sub>3</sub>                                 |
| A <sub>2</sub> |                | A <sub>1</sub> | B <sub>2</sub> | B <sub>1</sub> | E <sub>1</sub>                                 | E <sub>2</sub>   | E <sub>3</sub>                                 |
| B <sub>1</sub> |                |                | A <sub>1</sub> | A <sub>2</sub> | E <sub>3</sub>                                 | E <sub>2</sub>   | E <sub>1</sub>                                 |
| B <sub>2</sub> |                |                |                | A <sub>1</sub> | E <sub>3</sub>                                 | E <sub>2</sub>   | E <sub>1</sub>                                 |
| E <sub>1</sub> |                |                |                |                | A <sub>1</sub> +A <sub>2</sub> +E <sub>2</sub> | E <sub>1</sub> +E <sub>3</sub>                                 | B <sub>1</sub> +B <sub>2</sub> +E <sub>2</sub> |
| E <sub>2</sub> |                |                |                |                |  | A <sub>1</sub> +A <sub>2</sub> +B <sub>1</sub> +B <sub>2</sub> | E <sub>1</sub> +E <sub>3</sub>                 |
| E <sub>3</sub> |                |                |                |                |  |  | A <sub>1</sub> +A <sub>2</sub> +E <sub>2</sub> |

---



---

Za  $C_{4v}$ ,  $D_{4h}$

|                      |                |                |                |                                      |                                      |
|----------------------|----------------|----------------|----------------|--------------------------------------|--------------------------------------|
|                      | E <sup>-</sup> | E <sup>-</sup> | A              |                                      |                                      |
| S))))))))))))))))))Q | E <sup>+</sup> | E <sup>+</sup> | E <sup>-</sup> | A                                    | )                                    |
|                      | E <sup>-</sup> |                | E <sup>+</sup> | A                                    | )                                    |
|                      | A              |                |                | E <sup>+</sup> + [E <sup>-</sup> ]+) | A+M                                  |
| )                    |                |                |                |                                      | E <sup>+</sup> + [E <sup>-</sup> ]+' |
| M                    |                |                |                |                                      |                                      |
| .                    |                |                |                |                                      |                                      |
| @                    |                |                |                |                                      |                                      |

**G. KORELACIONE TABLICE**

Korelacione tablice pokazuju vezu izmedju nesvodljivih prikaza date grupe i njenih podgrupa. Korelacija izmedju bilo koje dve grupe simetrije može se postifi iterativnom upotrebom ovih tablica. Na primer, korelacija izmedju grupa simetrije  $C_{4v}$  i  $C_2$  može se nafi iz tablice koja povezuje grupu  $C_{4v}$  sa grupom  $C_{2v}$ , a zatim iz tablice koja povezuje grupu  $C_{2v}$  sa grupom  $C_2$ .

|            |                |       |                |                |
|------------|----------------|-------|----------------|----------------|
|            | $C_{2v}$       | $C_2$ | $C_s$<br>F(zx) | $C_s$<br>F(yz) |
| )))))))))) |                |       |                |                |
|            | A <sub>1</sub> | A     | A'             | A'             |
|            | A <sub>2</sub> | A     | A''            | A''            |
|            | B <sub>1</sub> | B     | A'             | A''            |
|            | B <sub>2</sub> | B     | A''            | A'             |

|            |                |       |        |
|------------|----------------|-------|--------|
|            | $C_{3v}$       | $C_3$ | $C_s$  |
| )))))))))) |                |       |        |
|            | A <sub>1</sub> | A     | A'     |
|            | A <sub>2</sub> | A     | A''    |
|            | E <sup>-</sup> | E     | A'+A'' |

|            |                |                                |                                |
|------------|----------------|--------------------------------|--------------------------------|
|            | $C_{4v}$       | $C_{2v}$<br>F <sub>v</sub>     | $C_{2v}$<br>F <sub>d</sub>     |
| )))))))))) |                |                                |                                |
|            | A <sub>1</sub> | A <sub>1</sub>                 | A <sub>1</sub>                 |
|            | A <sub>2</sub> | A <sub>2</sub>                 | A <sub>2</sub>                 |
|            | B <sub>1</sub> | A <sub>1</sub>                 | A <sub>2</sub>                 |
|            | B <sub>2</sub> | A <sub>2</sub>                 | A <sub>1</sub>                 |
|            | E <sup>-</sup> | B <sub>1</sub> +B <sub>2</sub> | B <sub>1</sub> +B <sub>2</sub> |

|                    |                   |          |                |  |                         |                         |
|--------------------|-------------------|----------|----------------|--|-------------------------|-------------------------|
|                    | $D_{3h}$          | $C_{3h}$ | $C_{3v}$       | $C_{2v}$<br>F <sub>h</sub> 6F <sub>v</sub> | $C_s$<br>F <sub>h</sub> | $C_s$<br>F <sub>v</sub> |
| )))))))))))))))))) |                   |          |                |  |                         |                         |
|                    | A <sub>1</sub> '  | A'       | A <sub>1</sub> | A <sub>1</sub>                             | A'                      | A'                      |
|                    | A <sub>2</sub> '  | A'       | A <sub>2</sub> | B <sub>2</sub>                             | A'                      | A''                     |
|                    | E <sup>2</sup>    | E'       | E <sup>2</sup> | A <sub>1</sub> +B <sub>2</sub>             | 2A'                     | A'+A''                  |
|                    | A <sub>1</sub> '' | A''      | A <sub>2</sub> | A <sub>2</sub>                             | A''                     | A''                     |
|                    | A <sub>2</sub> '' | A''      | A <sub>1</sub> | B <sub>1</sub>                             | A''                     | A'                      |
|                    | E''               | E''      | E              | A <sub>2</sub> +B <sub>1</sub>             | 2A''                    | A'+A''                  |

| $T_d$ | $T$ | $D_{2d}$  | $C_{3v}$ | $C_{2v}$      |
|-------|-----|-----------|----------|---------------|
| $A_1$ | $A$ | $A_1$     | $A_1$    | $A_1$         |
| $A_2$ | $A$ | $B_1$     | $A_2$    | $A_2$         |
| $E$   | $E$ | $A_1+B_1$ | $E$      | $A_1+A_2$     |
| $T_1$ | $T$ | $A_2+E$   | $A_2+E$  | $A_2+B_1+B_2$ |
| $T_2$ | $T$ | $B_2+E$   | $A_1+E$  | $A_1+B_2+B_1$ |

| $O_h$    | $O$   | $T_d$ | $T_h$ | $D_{4h}$        | $D_{3d}$     |
|----------|-------|-------|-------|-----------------|--------------|
| $A_{1g}$ | $A_1$ | $A_1$ | $A_g$ | $A_{1g}$        | $A_{1g}$     |
| $A_{2g}$ | $A_2$ | $A_2$ | $A_g$ | $B_{1g}$        | $A_{2g}$     |
| $E_g$    | $E$   | $E$   | $E_g$ | $A_{1g}+B_{1g}$ | $E_g$        |
| $T_{1g}$ | $T_1$ | $T_1$ | $T_g$ | $A_{2g}+E_g$    | $A_{2g}+E_g$ |
| $T_{2g}$ | $T_2$ | $T_2$ | $T_g$ | $B_{2g}+E_g$    | $A_{1g}+E_g$ |
| $A_{1u}$ | $A_1$ | $A_2$ | $A_u$ | $A_{1u}$        | $A_{1u}$     |
| $A_{2u}$ | $A_2$ | $A_1$ | $A_u$ | $B_{1u}$        | $A_{2u}$     |
| $E_u$    | $E$   | $E$   | $E_u$ | $A_{1u}+B_{1u}$ | $E_u$        |
| $T_{1u}$ | $T_1$ | $T_2$ | $T_u$ | $A_{2u}+E_u$    | $A_{2u}+E_u$ |
| $T_{2u}$ | $T_2$ | $T_1$ | $T_u$ | $B_{2u}+E_u$    | $A_{1u}+E_u$ |

| $D_{4h}$ | $D_{3d}$<br>$C_{2'}(6C_2')$ | $D_{2d}$<br>$C_{2''}(6C_2'')$ | $D_{2h}$<br>$C_2$ | $D_{2h}$<br>$C_2''$ | $D_2$<br>$C_2'$ | $D_2$<br>$C_2''$ | $C_{4h}$ | $C_{4v}$ | $C_{2v}$<br>$C_{2',Fv}$ | $C_{2v}$<br>$C$ |
|----------|-----------------------------|-------------------------------|-------------------|---------------------|-----------------|------------------|----------|----------|-------------------------|-----------------|
| $A_{1g}$ | $A_1$                       | $A_1$                         | $A_g$             | $A_g$               | $A$             | $A$              | $A_g$    | $A_1$    | $A_1$                   | $A_1$           |
| $A_{2g}$ | $A_2$                       | $A_2$                         | $B_{1g}$          | $B_{1g}$            | $B_1$           | $B_1$            | $A_g$    | $A_2$    | $A_2$                   | $A_2$           |
| $B_{1g}$ | $B_1$                       | $B_2$                         | $A_g$             | $B_{1g}$            | $A$             | $B_1$            | $B_g$    | $B_1$    | $A_1$                   | $A_2$           |
| $B_{2g}$ | $B_2$                       | $B_1$                         | $B_{1g}$          | $A_g$               | $B_1$           | $A$              | $B_g$    | $B_2$    | $A_2$                   | $A_1$           |
| $E_g$    | $E$                         | $E$                           | $B_{2g}+B_{3g}$   | $B_{2g}+B_{3g}$     | $B_2+B_3$       | $B_2+B_3$        | $E_g$    | $E$      | $B_1+B_2$               | $B_1+B_2$       |
| $A_{1u}$ | $B_1$                       | $B_1$                         | $A_u$             | $A_u$               | $A$             | $A$              | $A_u$    | $A_2$    | $A_2$                   | $A_2$           |
| $A_{2u}$ | $B_2$                       | $B_2$                         | $B_{1u}$          | $B_{1u}$            | $B_1$           | $B_1$            | $A_u$    | $A_1$    | $A_1$                   | $A_1$           |
| $B_{1u}$ | $A_1$                       | $A_2$                         | $A_u$             | $B_{1u}$            | $A$             | $B_1$            | $B_u$    | $B_2$    | $A_2$                   | $A_1$           |
| $B_{2u}$ | $A_2$                       | $A_1$                         | $B_{1u}$          | $A_u$               | $B_1$           | $A$              | $B_u$    | $B_1$    | $A_1$                   | $A_2$           |
| $E_u$    | $E$                         | $E$                           | $B_{2u}+B_{3u}$   | $B_{2u}+B_{3u}$     | $B_2+B_3$       | $B_2+B_3$        | $E_u$    | $E$      | $B_1+B_2$               | $B_1+B_2$       |

| D <sub>6h</sub>                            | D <sub>3d</sub><br>C <sub>2</sub> | D <sub>3d</sub><br>C <sub>2</sub> | D <sub>2h</sub><br>F <sub>h</sub> 6F(xy)<br>F <sub>v</sub> 6F(yz) | C <sub>6v</sub> | C <sub>3v</sub><br>F <sub>v</sub> | C <sub>2v</sub><br>C <sub>2</sub> | C <sub>2v</sub><br>C <sub>2</sub> | C <sub>2h</sub><br>C <sub>2</sub> | C <sub>2h</sub><br>C <sub>2</sub> | C <sub>2h</sub><br>C <sub>2</sub> |
|--|-----------------------------------|-----------------------------------|---|-----------------|-----------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|
| )) |                                   |                                   |   |                 |                                   |                                   |                                   |                                   |                                   |                                   |
| A <sub>1g</sub>                            | A <sub>1g</sub>                   | A <sub>1g</sub>                   | A <sub>g</sub>  | A <sub>1</sub>  | A <sub>1</sub>                    | A <sub>1</sub>                    | A <sub>1</sub>                    | A <sub>g</sub>                    | A <sub>g</sub>                    | A <sub>g</sub>                    |
| A <sub>2g</sub>                            | A <sub>2g</sub>                   | A <sub>2g</sub>                   | B <sub>1g</sub>   | A <sub>2</sub>  | A <sub>2</sub>                    | B <sub>1</sub>                    | B <sub>1</sub>                    | A <sub>g</sub>                    | B <sub>g</sub>                    | B <sub>g</sub>                    |
| B <sub>1g</sub>                            | A <sub>2g</sub>                   | A <sub>1g</sub>                   | B <sub>2g</sub>   | B <sub>2</sub>  | A <sub>2</sub>                    | A <sub>2</sub>                    | B <sub>2</sub>                    | B <sub>g</sub>                    | A <sub>g</sub>                    | B <sub>g</sub>                    |
| B <sub>2g</sub>                            | A <sub>1g</sub>                   | A <sub>2g</sub>                   | B <sub>3g</sub>   | B <sub>1</sub>  | A <sub>1</sub>                    | B <sub>2</sub>                    | A <sub>2</sub>                    | B <sub>g</sub>                    | B <sub>g</sub>                    | A <sub>g</sub>                    |
| E <sub>1g</sub>                            | E <sub>g</sub>                    | E <sub>g</sub>                    | B <sub>2g</sub> +B <sub>3g</sub>                                  | E <sub>1</sub>  | E                                 | A <sub>2</sub> +B <sub>2</sub>    | A <sub>2</sub> +B <sub>2</sub>    | 2B <sub>g</sub>                   | A <sub>g</sub> +B <sub>g</sub>    | A <sub>g</sub> +B <sub>g</sub>    |
| E <sub>2g</sub>                            | E <sub>g</sub>                    | E <sub>g</sub>                    | A <sub>g</sub> +B <sub>1g</sub>                                   | E <sub>2</sub>  | E                                 | A <sub>1</sub> +B <sub>1</sub>    | A <sub>1</sub> +B <sub>1</sub>    | 2A <sub>g</sub>                   | A <sub>g</sub> +B <sub>g</sub>    | A <sub>g</sub> +B <sub>g</sub>    |
| A <sub>1u</sub>                            | A <sub>1u</sub>                   | A <sub>1u</sub>                   | A <sub>u</sub>  | A <sub>2</sub>  | A <sub>2</sub>                    | A <sub>2</sub>                    | A <sub>2</sub>                    | A <sub>u</sub>                    | A <sub>u</sub>                    | A <sub>u</sub>                    |
| A <sub>2u</sub>                            | A <sub>2u</sub>                   | A <sub>2u</sub>                   | B <sub>1u</sub>   | A <sub>1</sub>  | A <sub>1</sub>                    | B <sub>2</sub>                    | B <sub>2</sub>                    | A <sub>u</sub>                    | B <sub>u</sub>                    | B <sub>u</sub>                    |
| B <sub>1u</sub>                            | A <sub>2u</sub>                   | A <sub>1u</sub>                   | B <sub>2u</sub>   | B <sub>1</sub>  | A <sub>1</sub>                    | A <sub>1</sub>                    | B <sub>1</sub>                    | B <sub>u</sub>                    | A <sub>u</sub>                    | B <sub>u</sub>                    |
| B <sub>2u</sub>                            | A <sub>1u</sub>                   | A <sub>2u</sub>                   | B <sub>3u</sub>   | B <sub>2</sub>  | A <sub>2</sub>                    | B <sub>1</sub>                    | A <sub>1</sub>                    | B <sub>u</sub>                    | B <sub>u</sub>                    | A <sub>u</sub>                    |
| E <sub>1u</sub>                            | E <sub>u</sub>                    | E <sub>u</sub>                    | B <sub>2u</sub> +B <sub>3u</sub>                                  | E <sub>1</sub>  | E                                 | A <sub>1</sub> +B <sub>1</sub>    | A <sub>1</sub> +B <sub>1</sub>    | 2B <sub>u</sub>                   | A <sub>u</sub> +B <sub>u</sub>    | A <sub>u</sub> +B <sub>u</sub>    |
| E <sub>2u</sub>                            | E <sub>u</sub>                    | E <sub>u</sub>                    | A <sub>u</sub> +B <sub>1u</sub>                                   | E <sub>2</sub>  | E                                 | A <sub>2</sub> +B <sub>2</sub>    | A <sub>2</sub> +B <sub>2</sub>    | 2A <sub>u</sub>                   | A <sub>u</sub> +B <sub>u</sub>    | A <sub>u</sub> +B <sub>u</sub>    |

| R <sub>3</sub>                             | O  | D <sub>4</sub>  | D <sub>3</sub>                      |
|--|--|---|-------------------------------------|
| )) |  |   |                                     |
| S  | A <sub>1</sub>                                   | A <sub>1</sub>  | A <sub>1</sub>                      |
| P  | T <sub>1</sub>                                   | A <sub>2</sub> +E   | A <sub>2</sub> +E                   |
| D  | E+T <sub>2</sub>                                 | A <sub>1</sub> +B <sub>1</sub> +B <sub>2</sub> +E                   | A <sub>1</sub> +2E                  |
| F  | A <sub>2</sub> +T <sub>1</sub> +T <sub>2</sub>   | A <sub>2</sub> +B <sub>1</sub> +B <sub>2</sub> +2E                  | A <sub>1</sub> +2A <sub>2</sub> +2E |
| G  | A <sub>1</sub> +E+T <sub>1</sub> +T <sub>2</sub> | 2A <sub>1</sub> +A <sub>2</sub> +B <sub>1</sub> +B <sub>2</sub> +2E | 2A <sub>1</sub> +A <sub>2</sub> +3E |
| H  | E+2T <sub>1</sub> +T <sub>2</sub>                | A <sub>1</sub> +2A <sub>2</sub> +B <sub>1</sub> +B <sub>2</sub> +3E | A <sub>1</sub> +2A <sub>2</sub> +4E |

## H. TOK-DIJAGRAM ZA ODREĐIVANJE GRUPE SIMETRIJE MOLEKULA

Pravilnim odgovorom na pitanja (sa "da" ili "ne"), slJd' fi ovaj tok-dijagram, moñe se odrediti grupa simetrije kojoj pripada molekul ...iji su elementi simetrije, bar delimi...no poznati.

Pitanja su data u skrafenom obliku, na primer, "i?" zna...i "Ima li molekul centar inverzije?", ili " $nC_2$ " zna...i "Ima li molekul  $nC_2$  osa simetrije koje su okomite na glavnu osu simetrije  $C_n$ ?", i sli...no. Znak  $\ddagger$  obeleñava ose koje se poklapaju.

