

1. Osoita, että seuraavat sp^2 hybridiorbitaalit ovat normitettuja

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}2s + \sqrt{\frac{2}{3}}2p_z \quad \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}2s - \frac{1}{\sqrt{6}}2p_z + \frac{1}{\sqrt{2}}2p_x$$

$$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}2s - \frac{1}{\sqrt{6}}2p_z - \frac{1}{\sqrt{2}}2p_x$$

2. Osoita, että edellisen tehtävän hybridiorbitaalit ovat keskenään ortogonaalisia

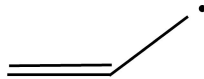
3. Mikä on seuraavien hapen hybridiorbitaalien välinen kulma ?

$$\psi_1 = 0.45 \cdot 2s + 0.71 \cdot 2p_y + 0.55 \cdot 2p_z$$

$$\psi_2 = 0.45 \cdot 2s - 0.71 \cdot 2p_y + 0.55 \cdot 2p_z$$

4. Laadi molekyyliorbitaali kaavio seuraaville: C_2 , C_2^- , C_2^+ ja tarkastele niiden stabiilisuutta sidokskertaluvun perusteella.

5. Tarkastele allyyliradikaalin π -elektronirakennetta Hückelin approksimaation avulla käyttäen kantana hiilten $2p_z$ atomiorbitaaleja. Ratkaise molekyyliorbitaalien energiat ja atomiorbitaalien kertoimet molekyyliorbitaaleissa. Laske energiatasokaaviosi perusteella π -elektronien energia allyyliradikaalille, allyylikationille ja allyyli-anionille.



6. Käytä eteenä esimerkkinä ($\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(A + B)$; $\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(A - B)$) ja osoita, että

matriisioperaatio $C^{-1}HC$ diagonalisoi hamiltonin matriisin. Matriisi C on atomiorbitaalien kertoimien matriisi ja C^{-1} sen käänteismatriisi. Käänteismatriisin muodostamiseen löytyy lukuisia lähteitä internetistä. Muodosta hamiltonin matriisi Hückelin approksimaation mukaisesti