ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ Ι

ΑΣΚΗΣΕΙΣ 8

1. Δώστε την εξίσωση του Schrödinger σε μορφή εξίσωσης ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων του Χαμιλτονιανού πίνακα.

2. Βρείτε τη σταθερότερη διαμόρφωση (γραμμική ή τριγωνική) των μορίων

$$H_3^+,\ H_3,\ H_3^-$$

   χρησιμοποιώντας τη θεωρία Hückel.

3. Υπολογίστε τις ενέργειες των π - μοριακών τροχιακών του τριμεθυλομεθανίου με τη θεωρία Hückel.

4. Υπολογίστε τις ενέργειες των μοριακών τροχιακών, πυκνότητες π-ηλεκτρονίων, φορτία και την ενέργεια συντονισμού του πυρολίου.

   Δίδονται:

$$\alpha_N = \alpha + \frac{3}{2}\beta$$
$$\beta_{C-N} = 1$$

5. Επαναλάβατε τους παραπάνω υπολογισμούς με το πρόγραμμα Hückel.