

Viceatomové molekuly - Hybridizace orbitalů

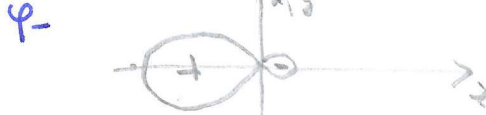
• je výhodné používat bazi orbitalů respektujících symetrii

• pro $n=2$: $2s \rightarrow \frac{1}{2} (1 - \frac{r}{a_0}) e^{-r/2a_0} \cdot Y_{00} \dots Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

$2p \rightarrow \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{6}} r e^{-r/2a_0} \cdot Y_{1,0,1,2} \quad Y_x = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot \frac{x}{r}$

standardní $Y_{10} = Y_z \quad Y_{1\pm 1} = \frac{1}{\sqrt{2}} [Y_x \pm i Y_y]$

Lineární molekula: sp hybridizace $\psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{2s} \pm \psi_{2p_z})$
(např. CO_2)



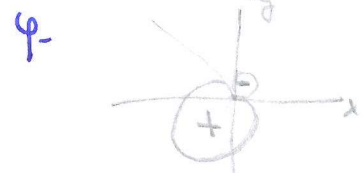
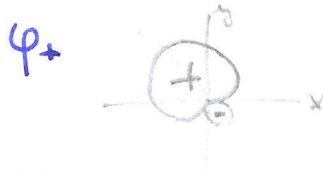
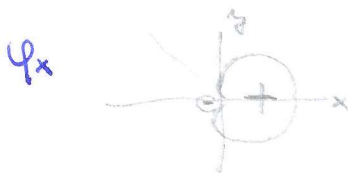
-- mějdou na sebe při rotaci o π

-- maximální výhyb ve směru z_+ a z_-

trojčetná osa symetrie: např. $\begin{matrix} H & & H \\ & \backslash & / \\ & C = C & \\ & / & \backslash \\ H & & H \end{matrix}$ nebo  benzene

funkce: $\psi_x = \frac{1}{\sqrt{3}} \psi_{2s} + \sqrt{\frac{2}{3}} \psi_{2p_x}$

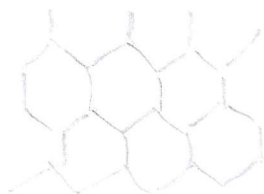
$\psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{3}} \psi_{2s} - \frac{1}{\sqrt{6}} \psi_{2p_x} \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_{2p_z}$



vlastnosti: • ortonormální a stejný obal jako $\psi_{2s}, \psi_{2p_x}, \psi_{2p_z}$
• přirozená rotací je rovný na sebe: $e^{\pm \frac{i}{\hbar} L_z \cdot \frac{2}{3}\pi} \psi_x = \psi_{\mp}$

pozn: lze přeměnit libovol. nodál. částí
.. úhlová část respektuje symetrii

př: METODA LCAO pro graphene:



... na 1 uhlíku sedí 4 elektrony

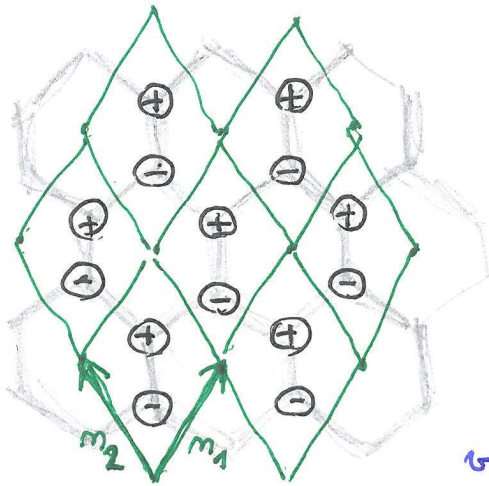
3 jsou v $\psi_{2s}, \psi_{2p_x}, \psi_{2p_y}$ a tvoří kostru molekuly
poslední elektron v ψ_{2p_z}

-- "téměř π -elektron"

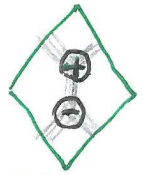
-- delokalizování přes celý list graphene

-- vodivostní vlastnosti lze vysvětlit s poměrně přesně pomocí jednoho π elektronu na jedem uhlíku ... model
téměř volný

Aktualita - model vodivosti graphenu



použítí transformační symetrie:
rozklad krystalu na
elementární buňky



buňky číslujeme řádky ve dvou
směrech ... (n_1, n_2)

každá buňka dva atomy uhlíku:
 $d = \pm$

t_j atom uhlíku je identifikován pomocí (n_1, n_2, d)

$$n_1, n_2 \in \mathbb{Z}; d = \pm$$

\mathcal{R} -prostor ... lineární kombinace $|n_1, n_2, d\rangle$ (na \mathcal{V} jeden π -orbital)

$$\text{obn. fce } |\psi\rangle = \sum_{n_1, n_2, d} c_{n_1, n_2, d} |n_1, n_2, d\rangle = \sum_{n_1, n_2, d} b_d e^{i(x_1 n_1 + x_2 n_2)} |n_1, n_2, d\rangle$$

řádky jsme přešli Blochův teorém; $x_{1,2} \in (-\pi, \pi)$ jsou
vlnové vektory

Model Hamiltoniánu resp. její symetrie

$$\langle n_1, n_2, d | H | n'_1, n'_2, d' \rangle = \epsilon_0 \text{ když } n_1 = n'_1, n_2 = n'_2, d = d'$$

$$= \beta \text{ když } \sigma \text{ grafu molekuly vede } \text{hrana } r \text{ od } (n_1, n_2, d) \text{ do } (n'_1, n'_2, d')$$

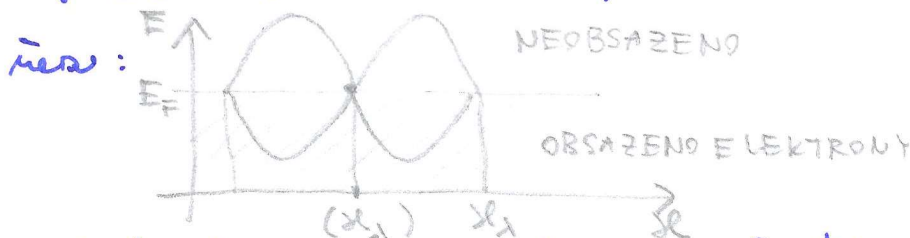
$$= 0 \text{ jinak}$$

\Rightarrow dosazení obn. fce. (*) do Schrödinger. rovnice $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

$$\begin{aligned} + \text{projekce na } \langle n_1, n_2, d = + | : & \epsilon_0 b_+ + \beta (e^{ix_1} + e^{ix_2} + 1) b_- = E b_+ \\ & \epsilon_0 b_- + \beta (e^{-ix_1} + e^{-ix_2} + 1) b_+ = E b_- \end{aligned}$$

$$\rightarrow \text{rovnice pro energii } \begin{vmatrix} \epsilon_0 - E & \beta (e^{ix_1} + e^{ix_2} + 1) \\ \beta (e^{-ix_1} + e^{-ix_2} + 1) & \epsilon_0 - E \end{vmatrix} = 0$$

$$t_j E_{\pm}(x_1, x_2) = \epsilon_0 \pm \beta \sqrt{1 + e^{ix_1} + e^{ix_2}} \dots \text{viz obr na další str.}$$



λ body: ... (x_1, x_2) pro určit
energie $E_{\pm}(k^2)$ je lineární
závislá na k ... $k = k_1 + k_2$

• lineární relaci $E \leftrightarrow p$ má mělo $E = \hbar\omega = \hbar ck$
• ZDE: elektron v graphenu se chová jako částice $m=0$ a $s=1/2$
• Diracova rovnice s $m=0$ ve 2D

