Domácí úkol č. 3

Zadáno: 20.11.2020 **Odevzdat do: 4.12.2020**

Domácí úkoly odevzdávejte ve formátu pdf prostřednictvím určeného webového rozhraní, po termínu e-mailem. Pozdní odevzdání je penalizováno srážkou 10% za každý započatý den.

Hückelova aproximace pro molekulu benzenu

Hückelova aproximace je jednoduchý model pro určení energií molekulových vazebních orbitalů u některých organických molekul, která se často používá pro odhad stability těchto molekul. Je založena na metodě LCAO-MO (tj. na konstrukci molekulových orbitalů pomocí lineární kombinace atomových orbitalů), ovšem s dodatečnými podmínkami na maticové elementy hamiltoniánu v bázi atomových orbitalů a na překryvové integrály těchto orbitalů.

V případě molekuly benzenu (bodová grupa symetrie D_{6h}) stačí pro vysvětlení vazby v této aproximaci uvažovat pouze orbitaly p_z na jednotlivých atomech uhlíku (osu z ztotožníme s rotační osou C_6 molekuly benzenu), ostatní orbitaly nejsou pro kvalitativní popis vazby důležité. Máme tedy bázi o šesti orbitalech, o které budeme předpokládat, že pro maticové elementy hamiltoniánu vyjádřeného v této bázi platí

$$H_{ij} = \langle \phi_i | H | \phi_j \rangle = \begin{cases} \alpha & \text{pro } i = j, \\ \beta & \text{pro } i \text{ sousedící s } j, \\ 0 & \text{v ostatních případech (Hückelova aproximace)} \end{cases}$$

a pro překryvové integrály

$$S_{ij} = \langle \phi_i | \phi_j \rangle = \begin{cases} 1 & \text{pro } i = j, \\ 0 & \text{pro } i \neq j \text{ (Hückelova aproximace).} \end{cases}$$

Zadání úlohy:

1. *(až 4 body)* Určete rozklad reprezentace, jejíž bázi tvoří šest p_z orbitalů, na ireducibilní reprezentace,
2. *(až 6 bodů)* Pomocí symetrizačních operátorů odpovídajících ireducibilním reprezentacím zkonstruujte z těchto orbitalů symetricky adaptovanou bázi (dle vlastního uvážení použijte úplné nebo neúplné projekční operátory).
3. *(až 6 bodů)* Určete vlastní stavy a energie uvedeného aproximativního hamiltoniánu a klasifikujte je podle ireducibilních reprezentací grupy D_{6h}.
4. *(až 4 body)* Pokuste se na základě získaných výsledků odhadnout, zda bude molekula benzenu stabilní, tj. zda je výsledná energie 6 elektronů umístěných do molekulových orbitalů nižší, než kdyby byly umístěny přímo v atomových orbitalech p_z.