

Oprava chyby ve výkladu

ve videu 2020-04-02 v čase 1:31:20

(výpočet překryvových populací)

Chybný výklad:

Příspěvky jednotlivých obsazených MO k překryvové populaci mezi dvěma AO počítáme jako součiny koeficientů dvou příslušných AO v MO krát 2. Konkrétně jsem ukazovala výpočet překryvové populace AO1 a AO5 takto:

$p = 2 \times (\text{koeficient AO1}) \times (\text{koeficient AO5})$. To vychází 0,2171; což se tolik neliší od 0,2229 v tabulce. Při řešení příkladu 10-5 se pro 2pz(C) a 2pz(O) stejným postupem dostalo číslo 0,4510; ačkoliv podle řešení i podle tabulky má vycházet 0,1936.

Správný výklad:

Správného výsledku se člověk dobere, když počítá

$p = 2 \times 2 \times (\text{koeficient 2pzC}) \times (\text{koeficient 2pzO}) \times (\text{překryv 2pzC a 2pzO})$:

koeficienty se musí násobit překryvem a celé se to ještě vynásobí počtem elektronů v daném MO. To je předpis pro výpočet jednotlivých sumačních příspěvků v rovnici (10-16) z Loweho.

V konkrétním případě, který jsem ukazovala ve videu, to bohužel náhodou vyšlo skoro stejně, protože překryv byl 0,5133 a to dá vynásobením dvěma elektrony skoro 1. Proto jsem si nevšimla, že jsem se v textu přehlédla.