

C9930, 5. cvičení, 2. 4. 2020

Rozšířená Hückelova metoda procvičování 2

Výchozí soubor dat se zadáním úloh:

https://is.muni.cz/auth/el/sci/jaro2020/C9930/um/zadani_uloh/

[cviceni_EHT2_2020.docx](#) nebo [cviceni_EHT2_2020.pdf](#)

C9930, 6. přednáška, 2. 4. 2020

Rozšířená Hückelova metoda – závěr
Hartreeho metoda SCF- úvod

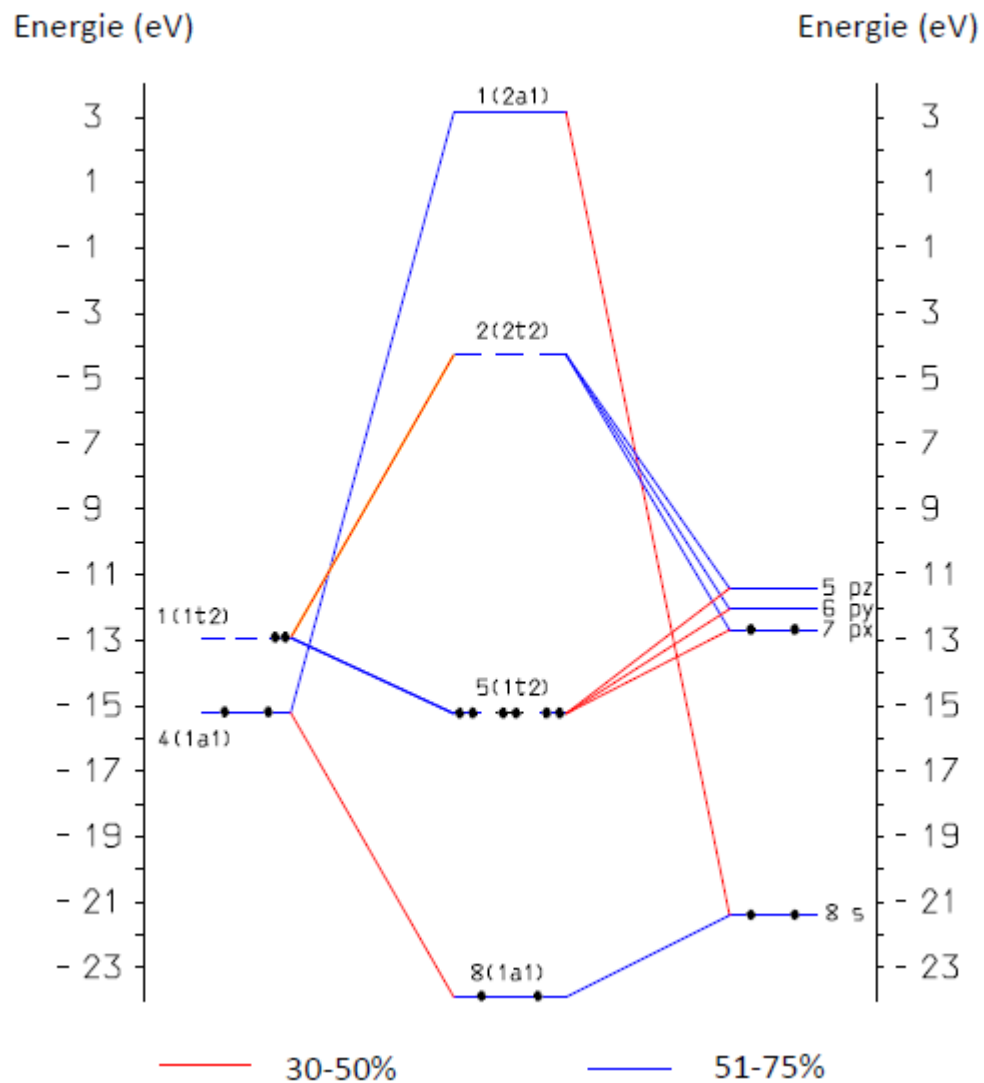
John P. Löwe, Quantum Chemistry

Kapitola 10: Část 10-2

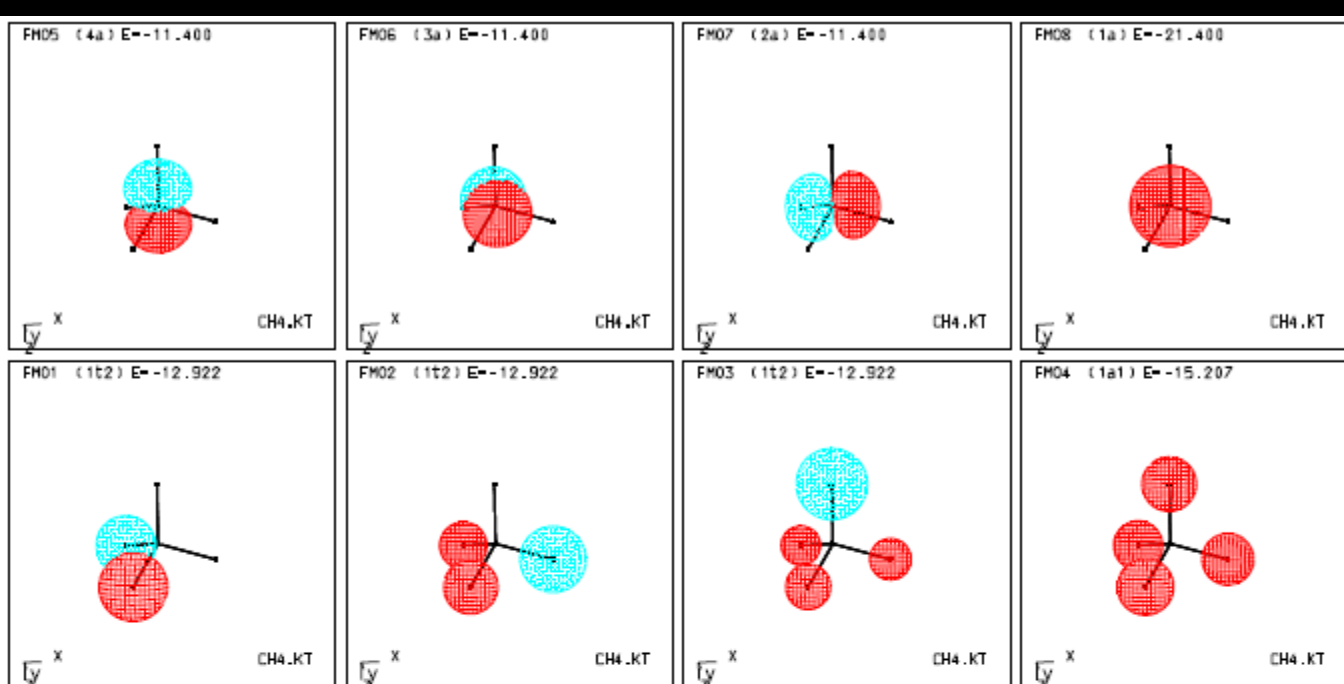
Ira N Levine, Quantum Chemistry (6th Edition)

Kapitola 11: Část 11.1

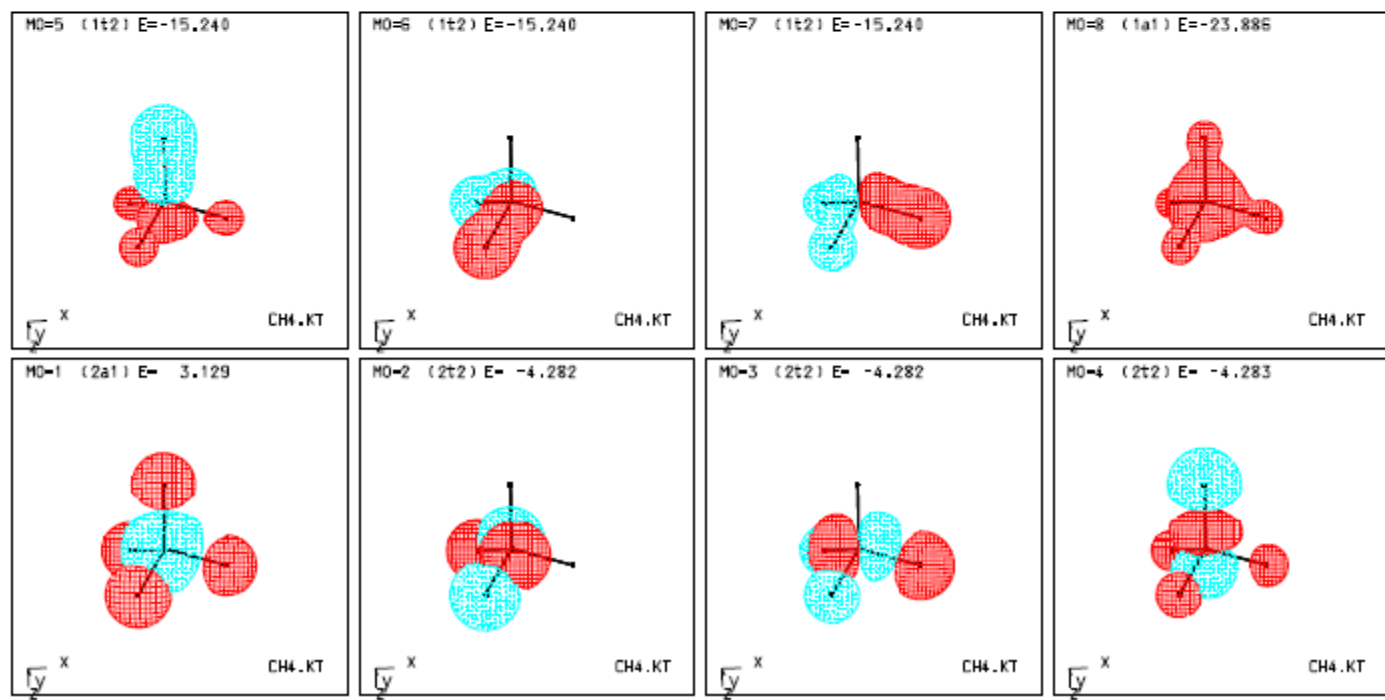
Interakční diagram molekuly CH₄ vypočtený programem C.A.C.A.O.*



Fragmentové orbitály



Molekulové orbitály



Low 10-2:
Mullikenovy
populace



A.H. Compton Yelen P.S. Mulliken
Heisenberg Dirac Eckardt Gale Mülliken Höyt
Chicago 1929