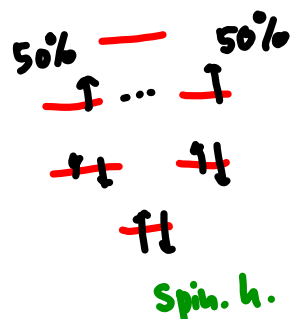


↗ Jo A4/4

A4 Dů π-el. hustoty a ESR hyperjemné št. konstanty

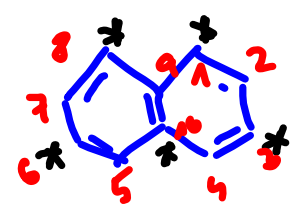
	w	x	c ₁	c ₂	c ₃	c ₄	c ₅	c ₆
Benzen	2	-2
	2	-1	*	.	*	.	*	.
	2	-1



0	1	-*	.	-*	.	-*	.	↑ 1/2
0	1	↑ 1/2
0	2	

: výpočet vs. úvaha (dvojit)

Naphthalen



koefficienty u „dýchacího“ MO (LUMO naphthalen)
 odpovídá 2 HOMO naphthalen „kvězličkovou metodou“

LUMO	-0,42	0,26	+0,26	-0,42	+0,42	-0,26	-0,26
HOMO	0,42	0,26	-0,26	-0,42	+0,42	0,26	-0,26
	1	2	3	4	5	6	7

3. Rozšířená Hückelova metoda [Löwe 10]



Důvody pro výběr

A. logická molekula na cestě
od planárních C_xH_y
k obecným molekulám U_xV_y...

B. CH₄ je nejmenší molekula
která ukazuje vazbu (= hybridizace)
↓
Valence Bond (VB)

-> ukazuje, v čem je výhoda MO popisu.

C. V 1920 ... AH₂, AH₃ ... teď AH₄

3.1 Současně
Symetrie CH_4 jader

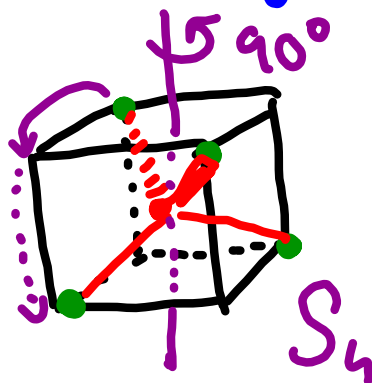
Vlastní rotace



$$h = \frac{360^\circ}{120^\circ} = 3$$

Nevlastní
rotace =
otáčení

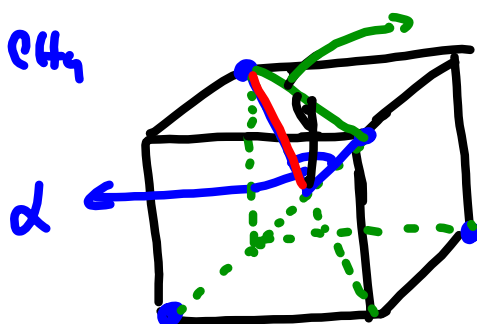
+ zrcadlení
v rovině



kolmo ke ose rotace

$$h = \frac{360^\circ}{90^\circ} = 4$$

Tetraedický σ v CH_4

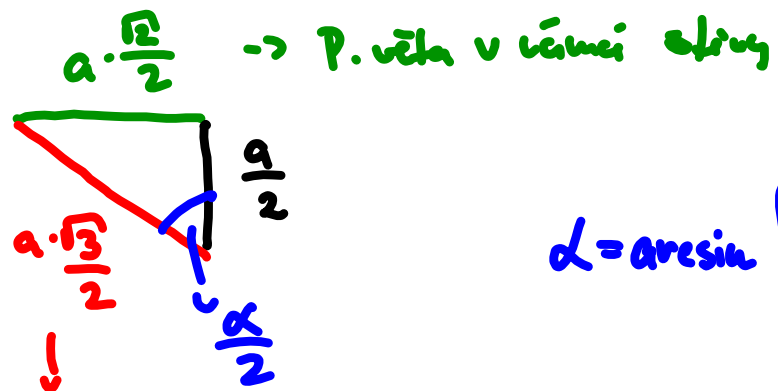


stěnová úhlopříčka

$1/2$ stěnové úhlopříčky

$1/2$ strany

$1/2$ tělesové úhlopříčky



$$\alpha = \arcsin\left(\frac{\sqrt{2}}{3}\right) = \arccos\left(\frac{\sqrt{1}}{3}\right)$$

P. věta v rámci pravoúhlého
trojúhelníku

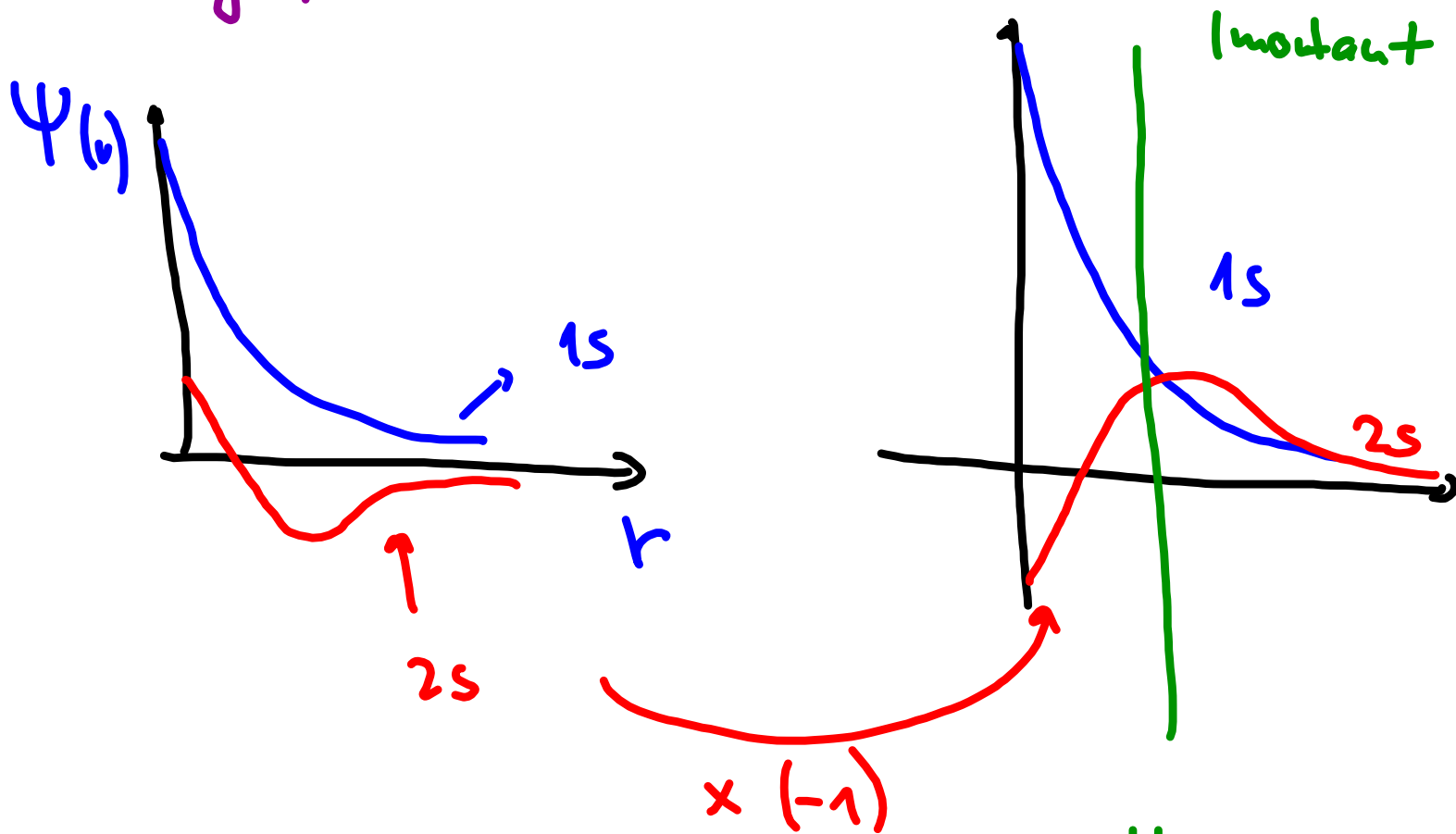
3.2 Bázis pro MO-LEAO



1s pro každý H

2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z pro každý C

Orbitály pro ionty typu H:



Nahradíme tzv. Slaterovými orbitály (STO), (Slater-type-orbitals)

$$R(n, z, \sigma) = r^{(n-1)} e^{-\frac{(z-\sigma)r}{w}}$$

$$C4020: z - \sigma = z^*$$

$$z_{eff}$$

$$z_{eff}$$

efektīvi kāboj jādūa

$$z - \sigma$$

stāvīā konstanta

vīce ef. at.

... stāvīā

... at. H

... ion. H

pusy ko mg
p10 2s atd.

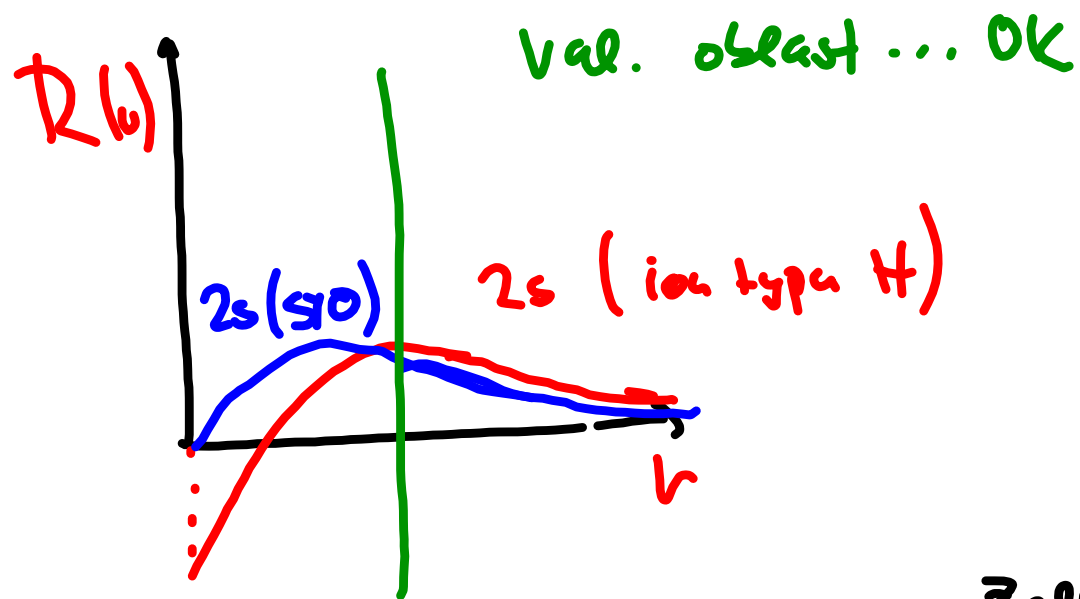
1s

konst. r

$$n-1$$

$$e$$

$$-(z-\sigma)r$$



$$2s(\text{STO}) = \underbrace{r^{-1}}_{r^1 = r} \cdot e^{-\frac{Z_{\text{eff}} \cdot r}{2}}$$

Buti pro EHT uypomy tsoy STO
se Zeff uchebni ze sl. pravitel.