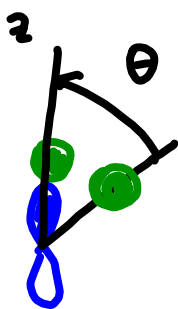


3.3 Matice přebývá =
$$\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \dots & S_{18} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{81} & \dots & \dots & S_{88} \end{pmatrix}$$

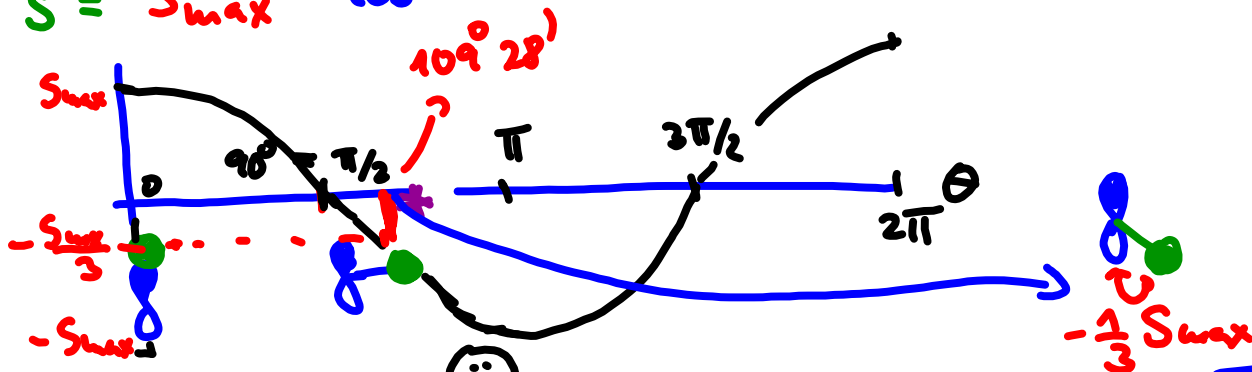
MO-LEAO : Sekulární rovnice

$$\begin{vmatrix} H_{11} - E S_{11} & H_{12} - E S_{12} & \dots & H_{18} - E S_{18} \\ H_{21} - E S_{21} & H_{22} - E S_{22} & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ H_{81} - E S_{81} & \dots & \dots & H_{88} - E S_{88} \end{vmatrix} = 0$$

Proč nastává toto:

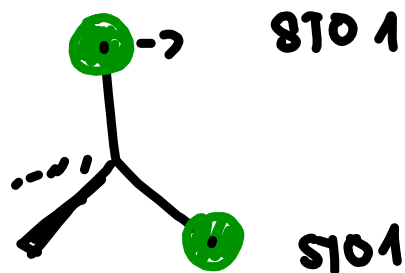


$$S = S_{max} \cdot \cos \theta$$

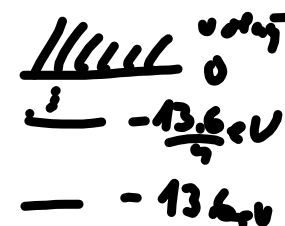


$$\cos \theta = \cos \left[2 \arccos \left[\frac{1}{3} \right] \right] = \cos \left[2 \arcsin \left[\frac{2}{3} \right] \right]$$

$$\cos 2\alpha = \cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha = \left(\frac{1}{3} \right)^2 - \left(\frac{2}{3} \right)^2 = \frac{1}{3} - \frac{2}{3} = -\frac{1}{3}$$



3.4 Matice Hamiltoniánu (L 10-1 D)



HMO ... $\alpha, \beta, 0$

$H_{ii} \equiv$ energie elektronu

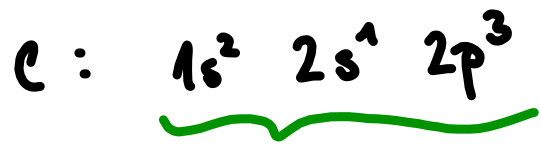
pomocí ionizační energie

v c-tém AO izolovaného atomu v daném stavu ?
 [bez atrakce ost. jádry jako u H_2^+]

al ? C ... 2s $1s^2 2s^2 2p^2$

... molekuly $1s^2 2s^1 2p^3$ (valencií stav C v molekule)

$$H_{ii} = -E_{ion}$$



spiw
- orbitální
indukce

větší F_A stavů atomu
váženy 101

[Pople + Segal]

C-2s ... $H_{11} = -19,44 \text{ eV} = -0,7144 \text{ a.u.}$

C-2p ... $H_{22} = H_{33} = H_{44} = -10,67 \text{ eV} = -0,3921 \text{ a.u.}$

H-1s ... $H_{55} = \dots = H_{88} = -13,6 \text{ eV} = -0,5 \text{ a.u.}$

$i \neq j$

$$H_{ij} = k \cdot S_{ij} \cdot \frac{H_{ii} + H_{jj}}{2}$$

WOLFSBERG - HELMHOLTZŮV

EFT parametrizace

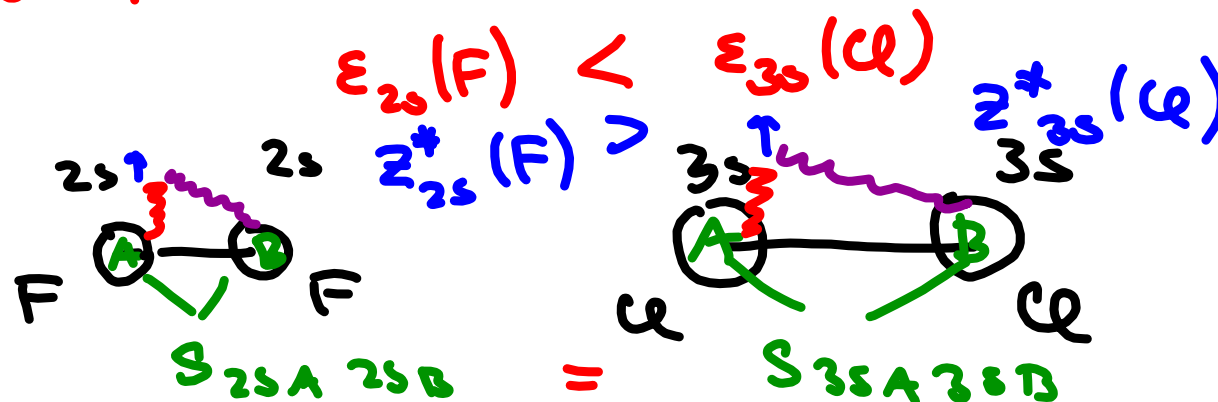
H_{ij}
vztaH

lab inito : $\int \chi_i \hat{H} \chi_j d\tau$

Proč $\frac{H_{ii} + H_{jj}}{2}$ figuruje v H_{ij} ?

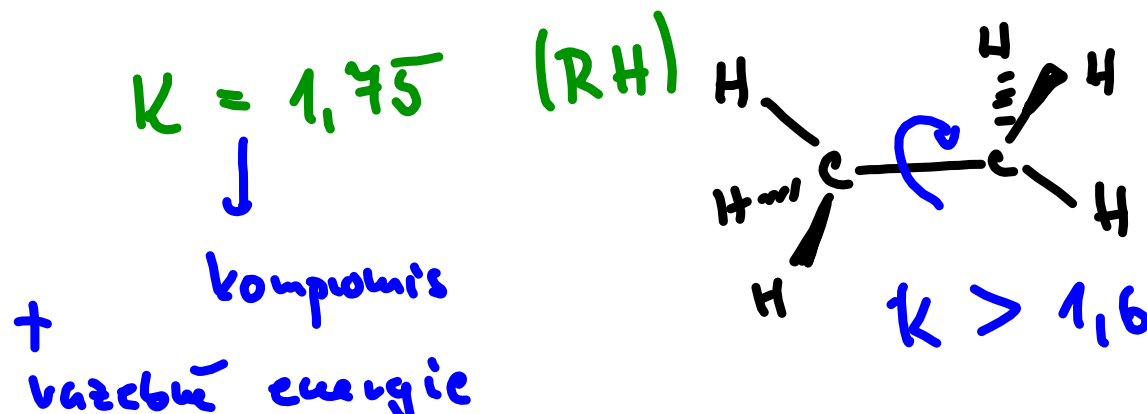
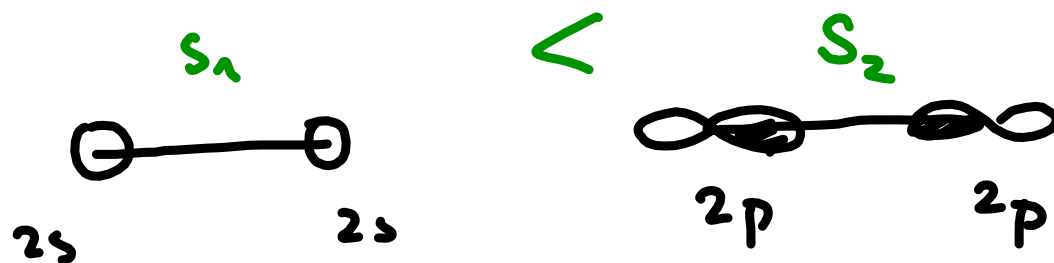
Pro stejný S_{ij} očekáváme silnější interakce
(větší stabilizaci / destabilizaci)

PRO AO ležící v energii nižší.



Jaký je význam H_{ij} ?

změna v energii díky tomu, že el. v AO χ_i je přitahován i jádrem j .



distribuce nāboje na K nezāvisā pro sīvoke vort. hodnot.

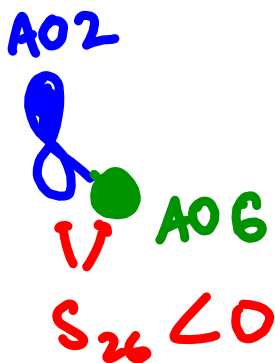
BRĒĀK : 10.25 - 10.40

ZĪMĪTĒK : 10.40 - 11.00



Vazubūn MO \rightarrow $2p_z (e)$ a $1s (H_a)$
 se skujīgi zīmīti

Antivazubūn MO \rightarrow —||—
 S Rūzvēni zīmīti



$H_{26} > 0$

Ve vazubūn MO
 būs ar
 AO2 a AO6
 opraicē zīmīti!

3.5 Vlastní hodnoty a vlastní vektory [funkce]

