

C9930, 2. přednáška, 10. 3. 2021

Obyčejná Hückelova metoda:

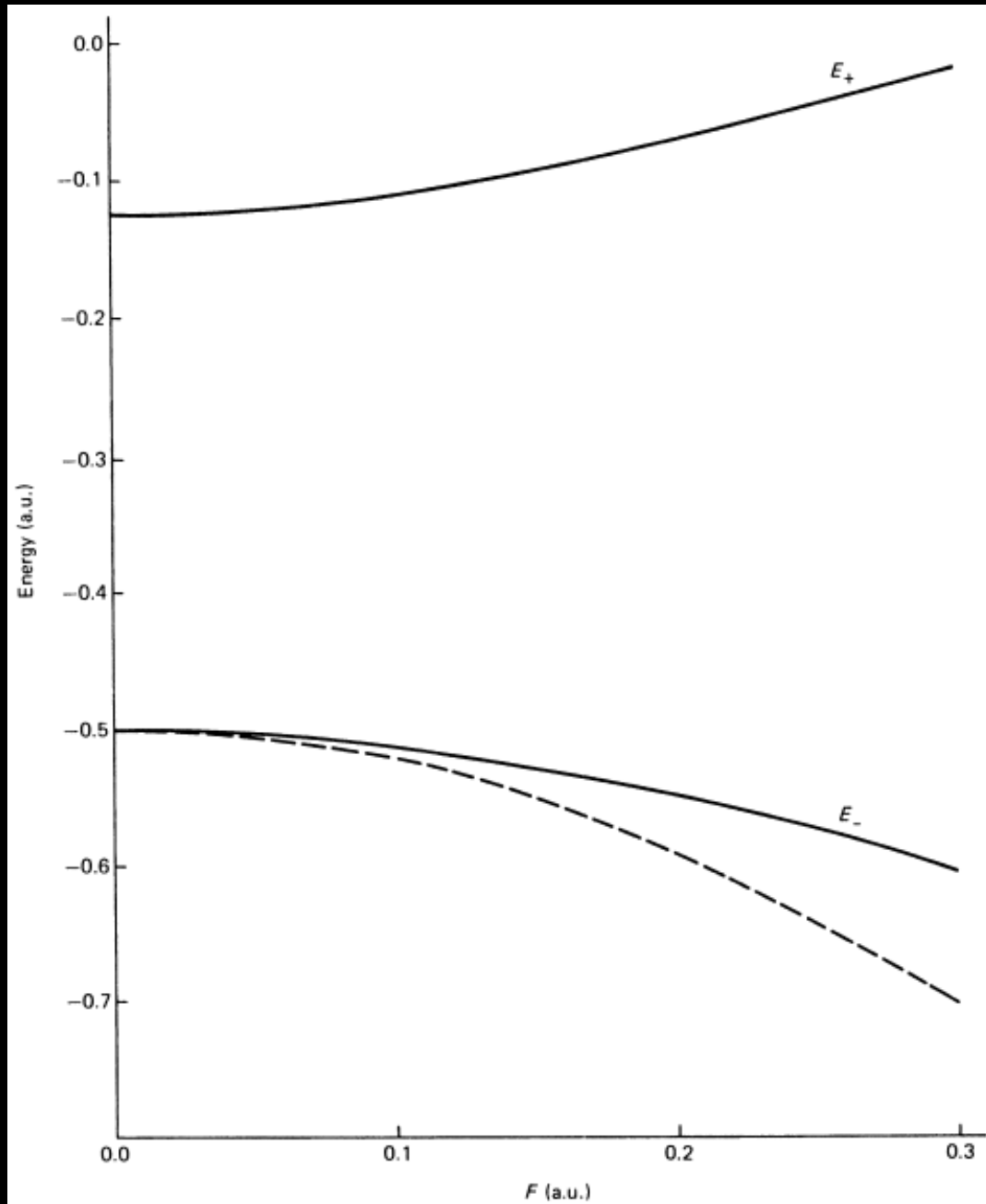
Vztah k měřitelným veličinám

John P. Löwe, Quantum Chemistry, Kapitola 8

Fig. 7-3

Průměrné energie pro atom H v uniformním elektrickém poli síly F tak, jak vycházejí z variačního výpočtu v bázi $1s, 2p_z$ (plné čáry).

Nižší z hodnot průměrné energie získaná z přesných výpočtů (---).



2.1 Distribuce náboje z HMO (Lowe 8-8)

$$E_3 = \alpha - \sqrt{2}\beta$$
$$x = \sqrt{2}$$

$$E_2 = \alpha$$
$$x = 0$$

$$E_1 = \alpha + \sqrt{2}\beta$$
$$x = -\sqrt{2}$$

Fig. 8-5 Hladiny energie a znázornění molekulových orbitalů ALLYLOVÉHO SYSTÉMU.

TABLE 8-1 ► HMO π Electron
Densities in the Allyl Radical

Electron	Carbon atom		
	1	2	3
1 in ϕ_1	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$
2 in ϕ_1	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$
3 in ϕ_2	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$
	—	—	—
Sum	1	1	1

Distribuce náboje v cyklopropenylu

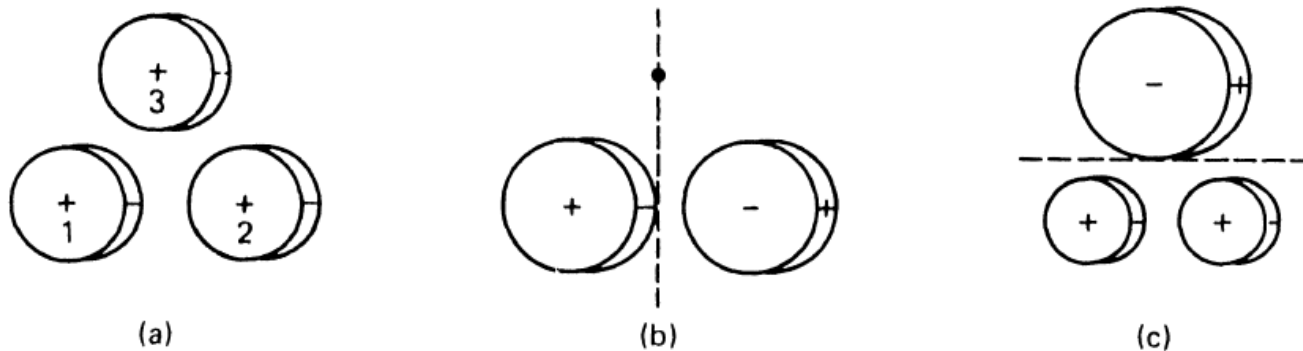


Figure 8-7 ► The HMOs for the cyclopropenyl system: (a) $\phi_1 = (1/\sqrt{3})(\chi_1 + \chi_2 + \chi_3)$; (b) $\phi_2 = (1/\sqrt{2})(\chi_1 - \chi_2)$ (c) $\phi_3'' = (1/\sqrt{6})(\chi_1 + \chi_2 - 2\chi_3)$. The nodal planes intersect the molecular plane at the dashed lines.