

C9930, 3.+4. lekce, 17. a 24. 3. 2021 - Doplnění

Obyčejná Hückelova metoda: Cvičení

- *Distribuce náboje* (Lowe 8.8)
- *Vztah mezi vazebným řádem a vazebnou délkou* (Lowe 8.12)
- *π -elektronové hustoty a EPR hyperjemné štěpící konstanty* (Lowe 8.13)

C9930, 5. lekce, 31. 3. 2021

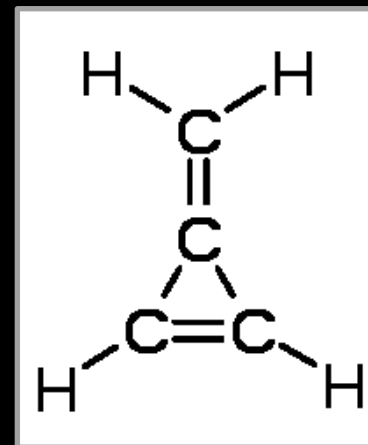
Rozšířená Hückelova metoda: Přednáška

Postup výpočtu na příkladu CH₄ (Lowe 10.1)

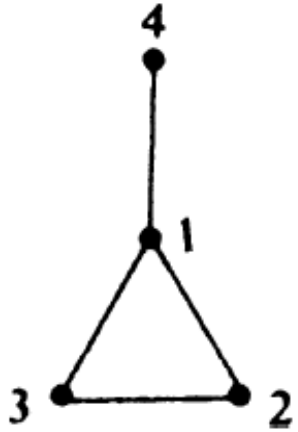
- *Distribuce náboje v 3-methylidencykloprop-1-enu*, též zvaném *methylencyklopropen* nebo *triafulven* →

Na základě výsledků výpočtu HMO

na následujícím snímku vypočtete/odvodte



- nábojové hustoty q_i na všech atomech a
- π -vazebné řády, p_{ij} , pro všechny nejbližší sousední atomy.
- Triafulven je stabilizován elektronakceptorními skupinami vázanými na uhlíky s nejvyšší elektronovou hustotou. Které to jsou?



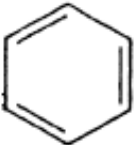
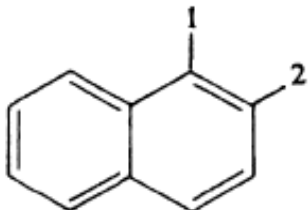
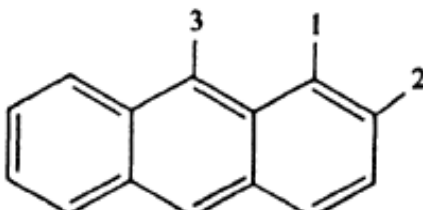
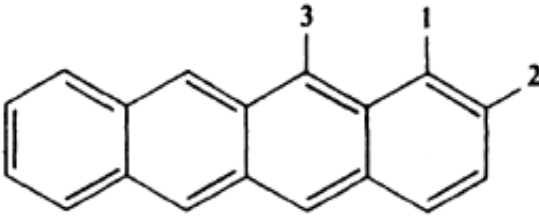
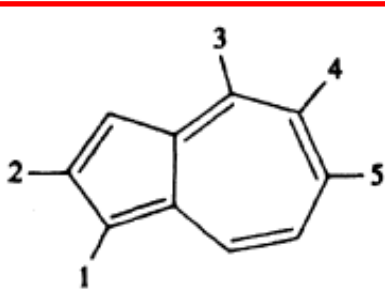
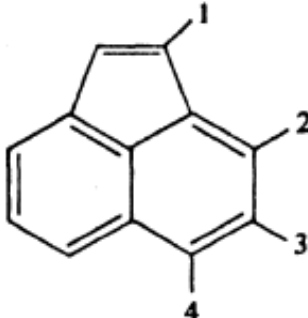
n	x	c_1	c_2	c_3	c_4
2	-2.1701	0.6116	0.5227	0.5227	0.2818
2	-0.3111	0.2536	-0.3682	-0.3682	0.8152
0	1.0000	0.0000	0.7071	-0.7071	0.0000
0	1.4812	0.7494	-0.3020	-0.3020	-0.5059

Kontrola: Appendix 6, str. 608

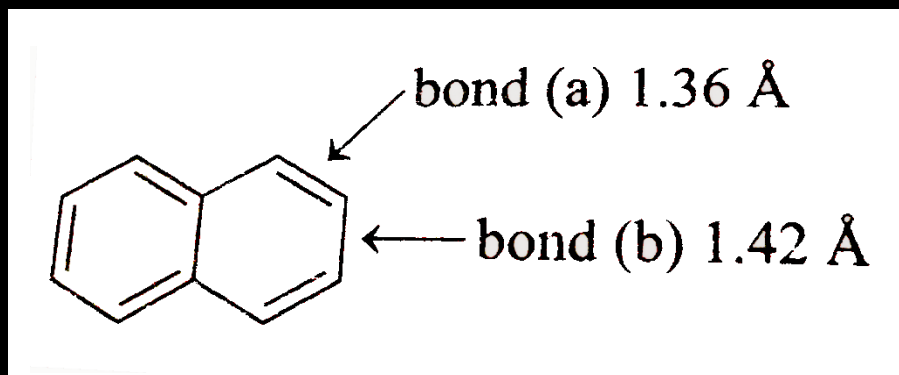
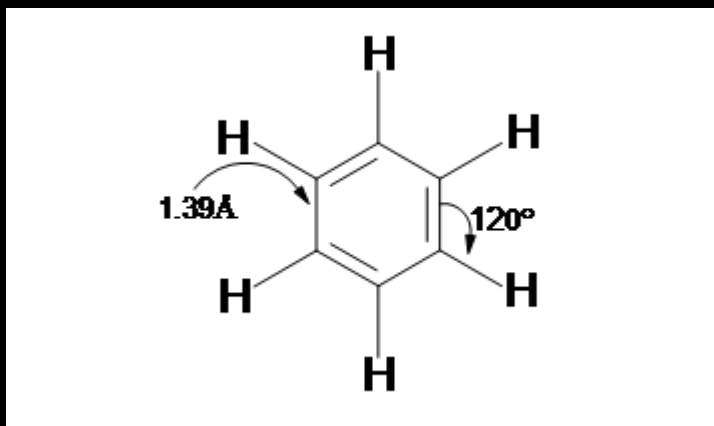
• π -elektronové hustoty a EPR hyperjemné štěpící konstanty (Lowe 8.13)

8-13. ESR coupling constants are shown in Table P8-13 for six hydrocarbon anion radicals. Use HMO tabulations in Appendix 6 to obtain π -electron MO coefficients for these systems. Construct a plot of coupling constant a_{H_μ} versus $c_{\mu i}^2$, where i is the MO containing the unpaired electron (a_{H_μ} values are in gauss). The numbered positions in Table P8-13 refer to hydrogen atoms.

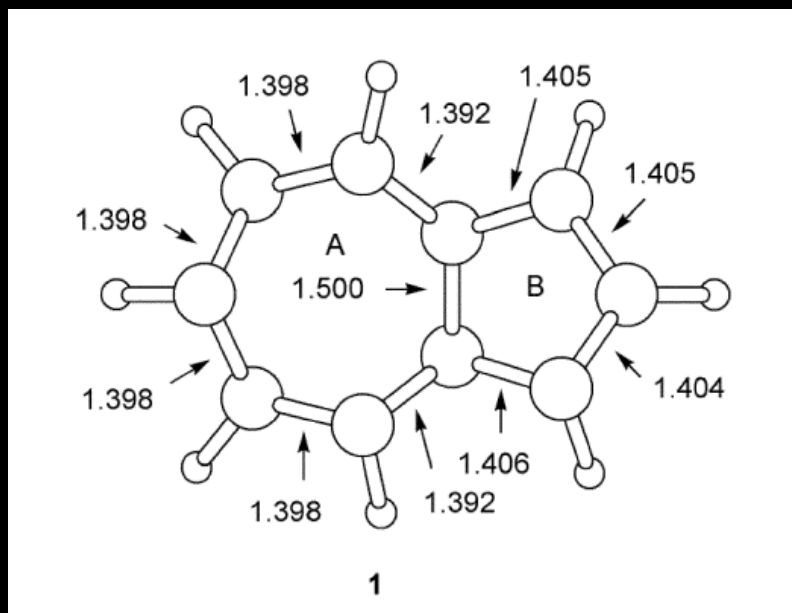
TABLE P8-13 ►

	3.75		5.01 1.79		2.74 1.57 5.56
	1.49 1.17 4.25		0.27 3.95 6.22 1.34 8.83		3.07 4.50 0.46 5.60

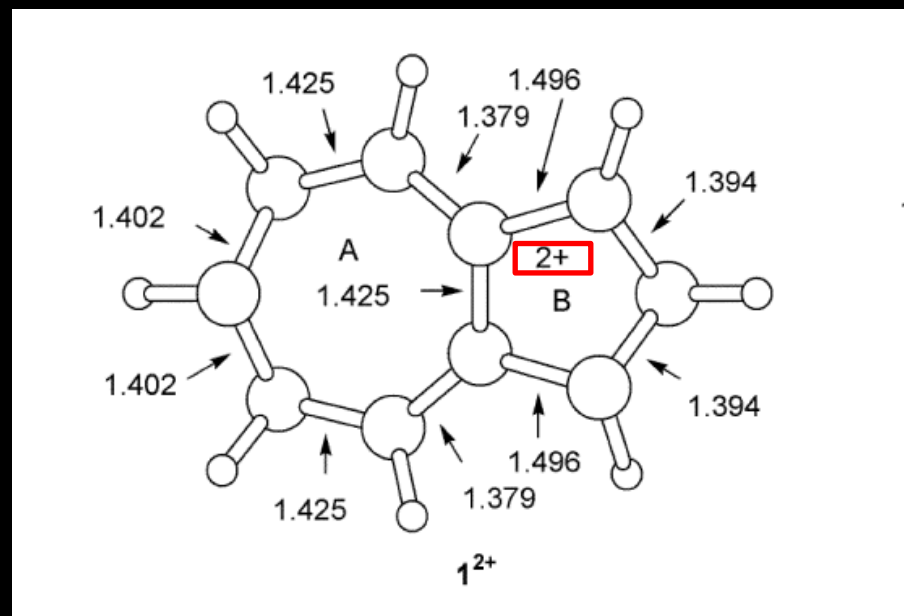
- *Vztah mezi vazebným řádem a vazebnou délkou* (Lowe 8.12)
- Pro molekuly z předchozího snímku vypočtete π -vazebné řády, p_{ij} , a korelujte jejich trendy s experimentálně určenými vazebnými délkami (stačí úvahou, není třeba kreslit žádný graf)



Azulen (neutrální)



Dikation azulenu



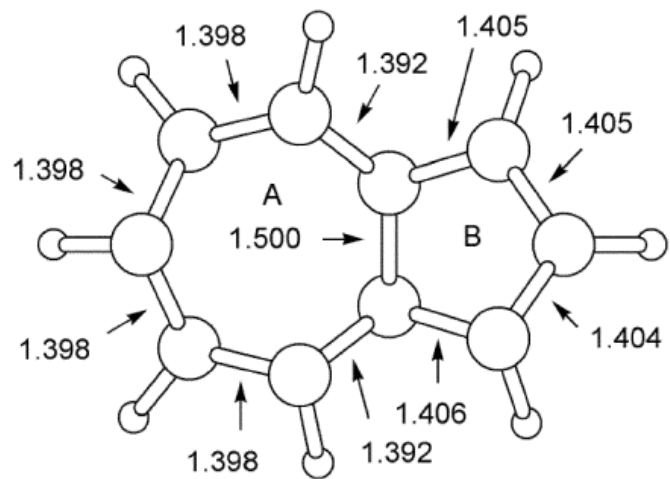
A theoretical (DFT, GIAO-NMR, NICS) study of the carbocations and oxidation dications from azulenes, homoazulene, benzazulenes, benzohomoazulenes, and the isomeric azulenoazulenes †

Org. Biomol. Chem., 2003, 1, 3078–3093

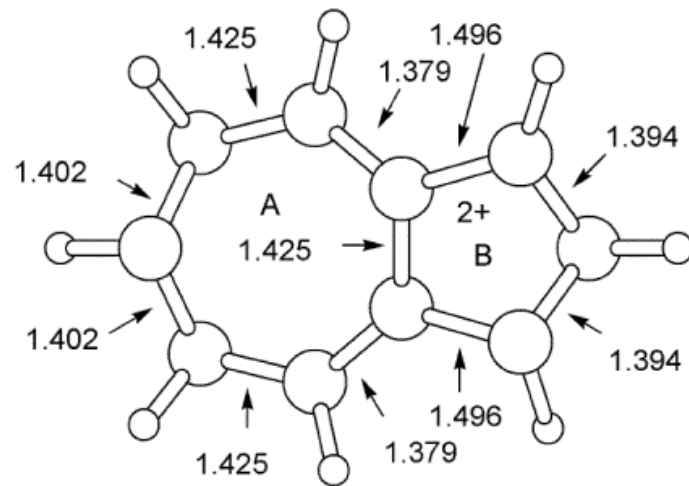
Takao Okazaki^{a,b} and Kenneth K. Laali^{*b}

^a Department of Energy and Hydrocarbon Chemistry, Kyoto University, Kyoto, Japan

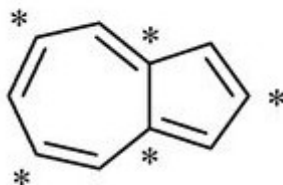
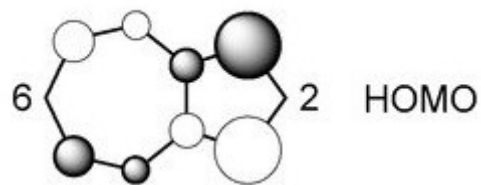
^b Department of Chemistry, Kent State University, Kent, OH 44242, USA



1



1²⁺



1