

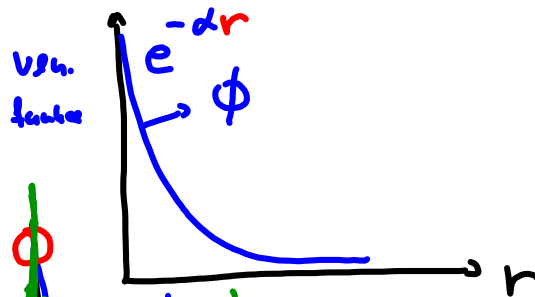
Ad DÜ / Pr. 3 (Variací výpočet atomu H)

$\dots \frac{2\alpha}{2} - 1 = 0 \Rightarrow \alpha = 1 \Rightarrow \phi = \sqrt{\frac{1}{\pi}} e^{-r}$

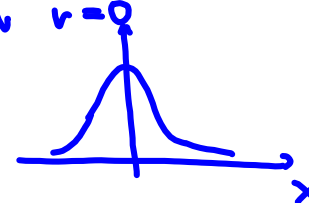
smysl?

Souvislostí úloha:

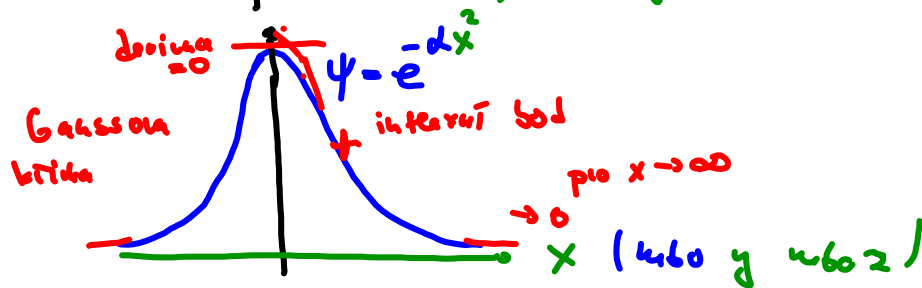
Zbývá VF: $\psi = [\text{const.}] \cdot e^{-\alpha r^2}$



Gaussova křivka s vrcholem v $r=0$



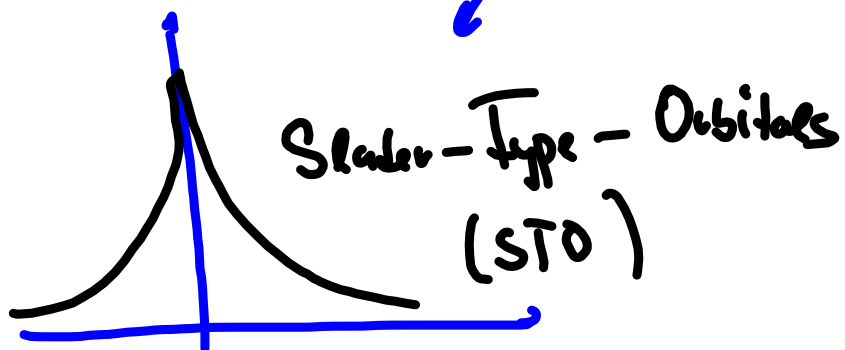
funkce nemá derivaci



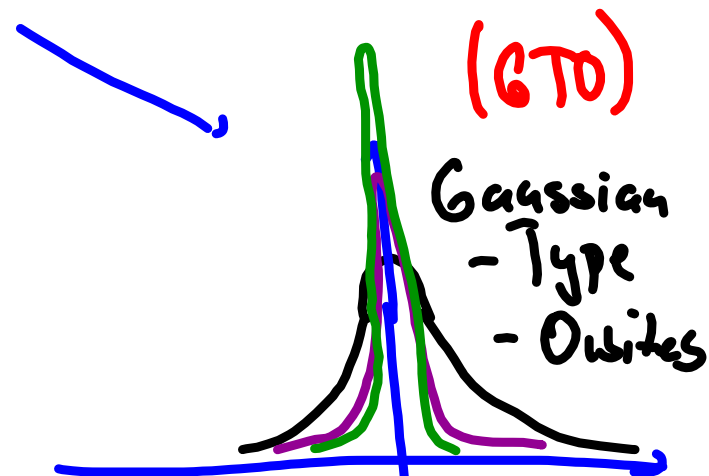
V QEH \rightarrow VF vyjadrujeme jako

lineární kombinace

buť



obklopený výř. ř.



Jednoduchý výř. ř.

několik GTO

Standardní DÜ: $12b | 60b$ $\left. \vphantom{12b | 60b} \right\} \rightarrow ZK$
(2 stupně)

Neustandardní DÜ: $6b | 60b$ $\left. \vphantom{6b | 60b} \right\} \times ZK$
(1 stupeň)

Löve Problems | 7-5

Mějme zkušební funkci $\psi = e^{-\alpha r^2}$ pro ZS at. H.

Jaká je nejmenší možná E pro ψ v tomto tvaru

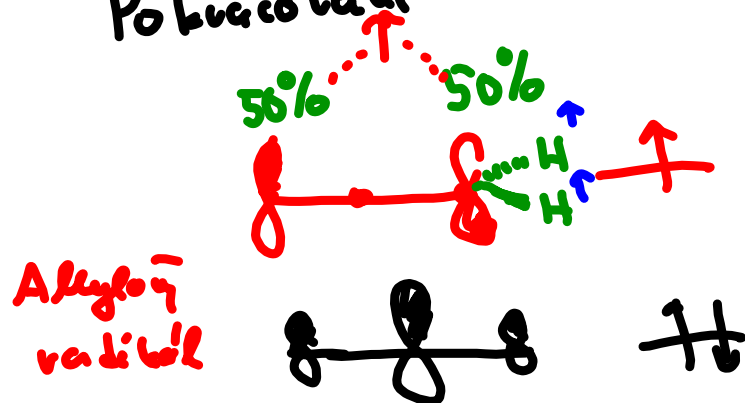
$$\bar{E} = \frac{\int \psi^* \hat{H} \psi d\tau}{\int \psi^* \psi d\tau}$$

ψ není normalizováno

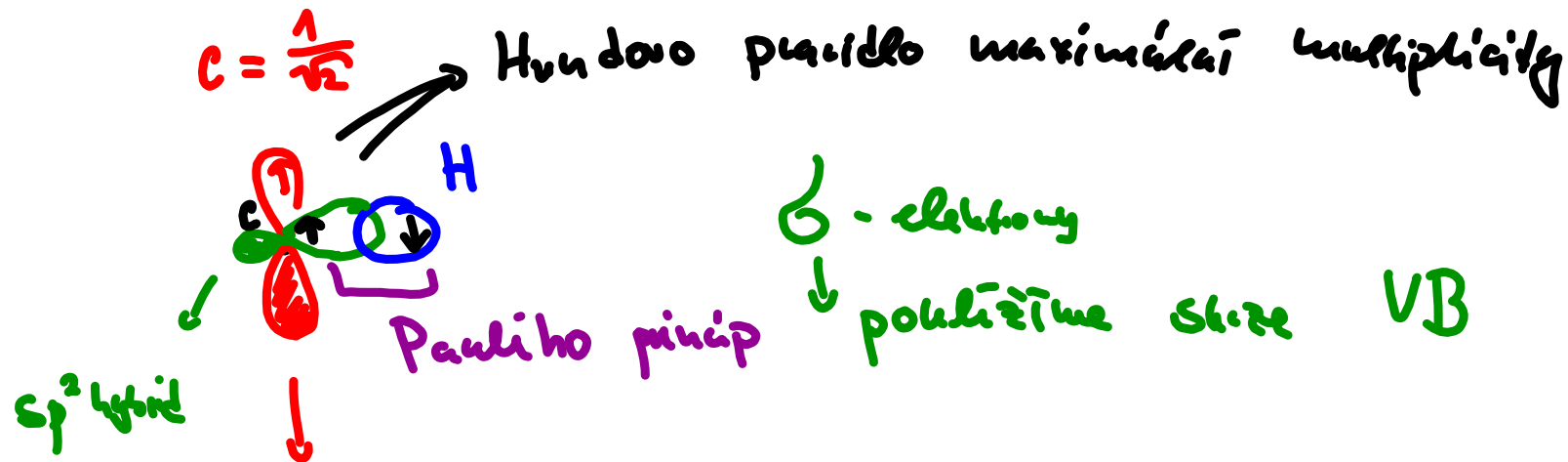
Standardní DŮ : do konce tohoto týdne :

zadáni do 27/3 včetně
 učení do středy velikonoční

Pobuřování 2 minuta :

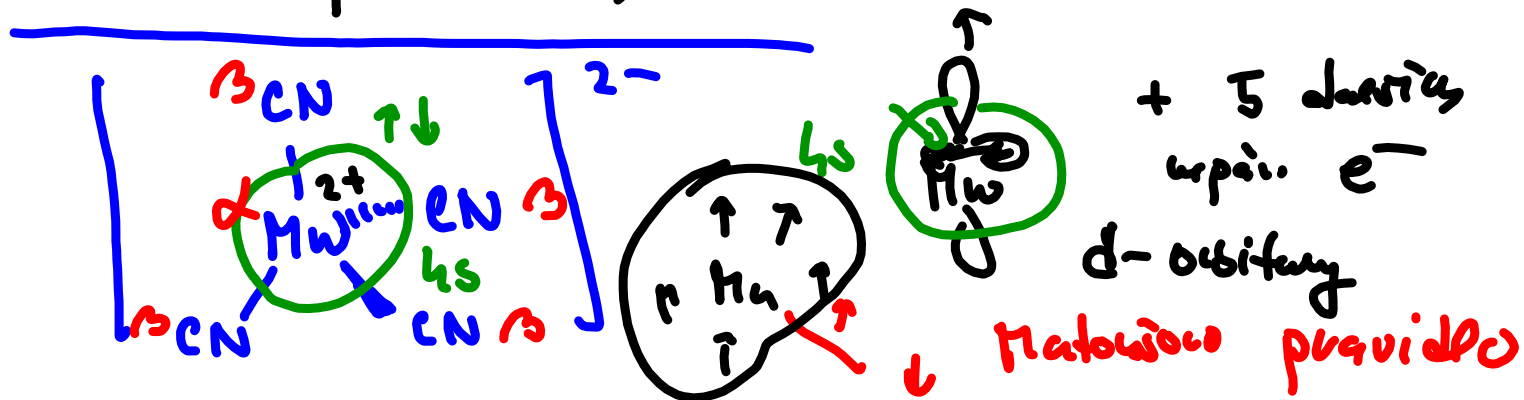


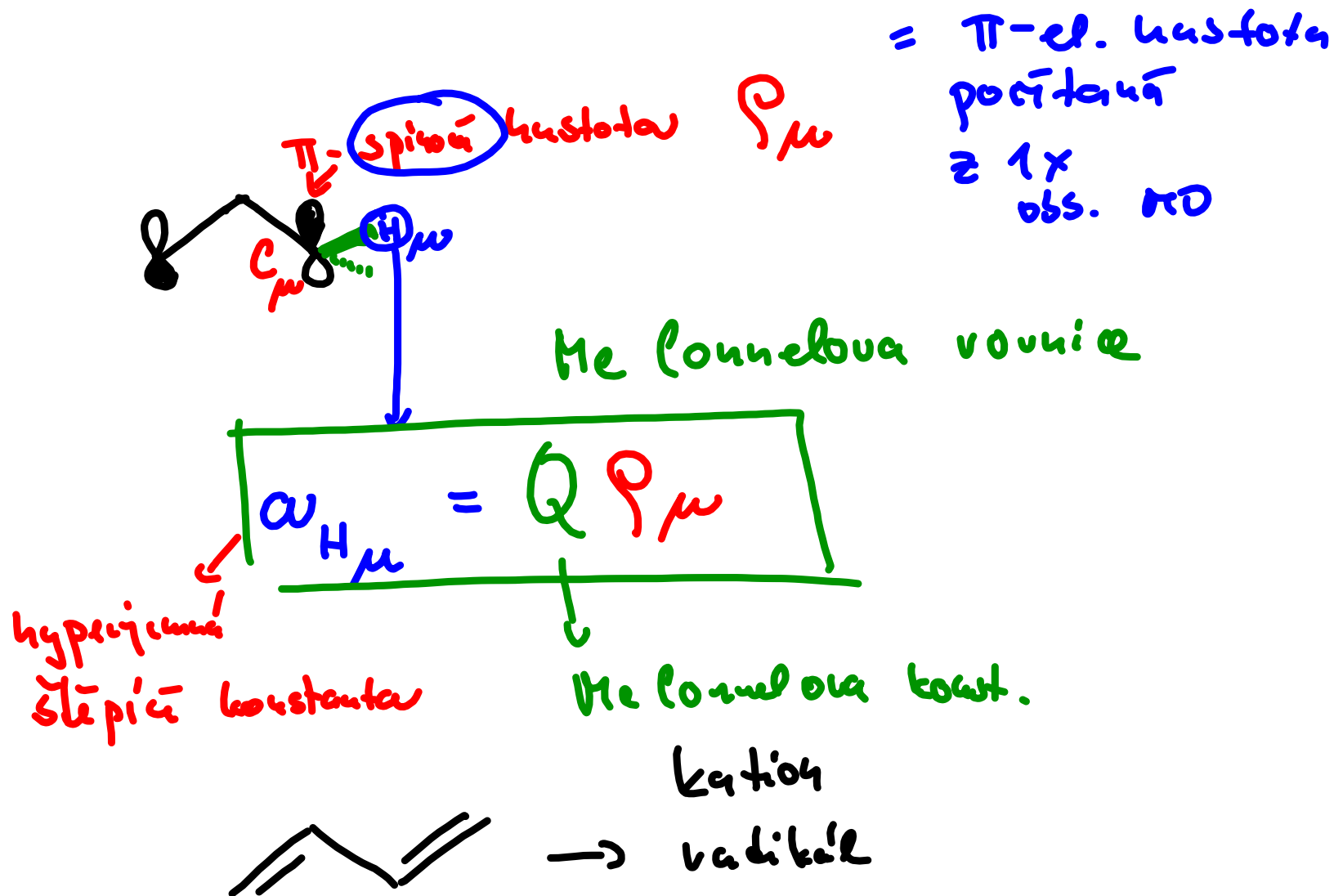
Fermiho kontakty
 interakce je přímo
 úměrná proud. veličině
 ↑ na mag. jádře.

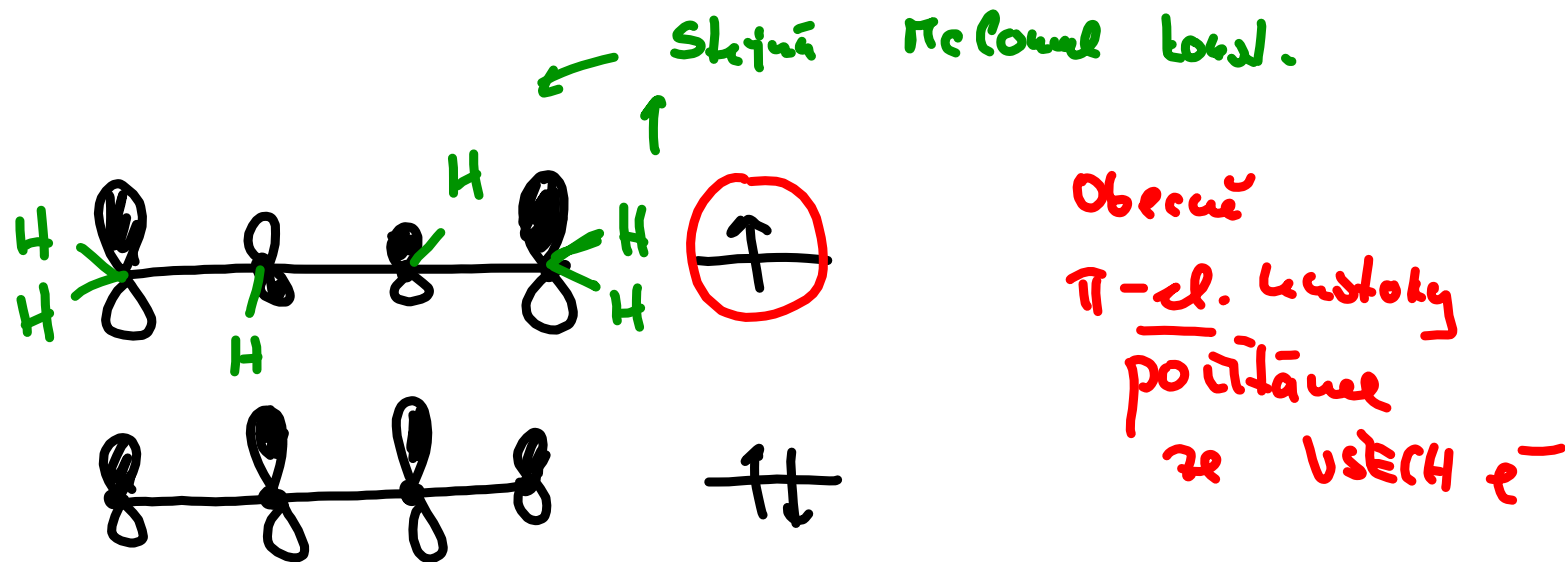


π -elektrony
 polárnítná slize MO

Tento obrázek popisuje mechanismus tzv. spinové polarizace.







v kontextu EPR počítáme π-SPINOVÉ
hustoty, počítáme jen z uzlů e⁻

→ Bude následovat standardní DÜ na toto.

[2 = Org. Chemie 1 = Variční metoda]

3. Rozšířená Hückelova metoda



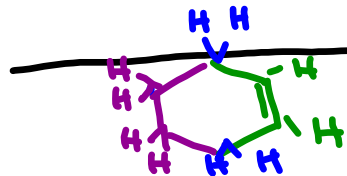
Kapitola 10 / Löwe

Historická pozn.

HMO	EHT
Hückel Molecular Orbital [Theory]	Extended Hückel Theory
1930s	1960s

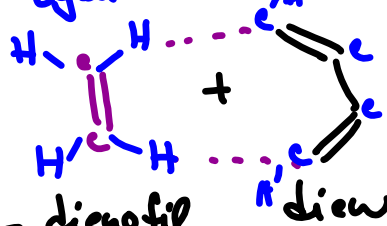
Erich Hückel

- Hückelovo pravidlo $4n+2$
- Debye-Hückelova teorie středního aktivního kv. iontu u roztoku



Roald Hoffmann

- Woodward-Hoffmannova pravidla pro elektrocykizující reakce



Diels-Alder. reakce

STEREODELEKIVNÁ REAKCE

Ronald Hoffmann † 1937 Złoczów /

Złociw

Polko / SSSR / Ukraina

Raul Šatran (Satran)

Hillel a Clara Satran

1962 PhD Harvard W. Lipscomb

NP 1976 "Za studia sturky
bovany, osvetyly-

Robert Woodward (1917...†) proslym dnu. vsply"

2017 ... Meeting ACS Washington D,C
100. vjrozi k. RW + 80. nar. RH