

Obsah

| | | |
|------|---------------------------------------------------------------------------------|-----|
| | Úvodní poznámka | 7 |
| | Použité symboly | 8 |
| I. | PŘÍKLADY | 11 |
| | 1. Základní pojmy | 11 |
| | 2. Hückelova verze metody MO-LCAO (HMO) | 13 |
| | 3. Poruchový počet. | 21 |
| | 4. Metoda FEMO (metoda volného elektronu) | 21 |
| | 5. Metoda valenčních struktur (metoda VB) | 21 |
| | 6. Rozšířená Hückelova metoda (EHT) | 22 |
| | 7. Metoda SCF-MO (π -elektronová verze Poplova, CNDO, ab initio) | 22 |
| | 8. Metoda konfigurační interakce. | 26 |
| | 9. Elektronová spinová rezonance. | 26 |
| | 10. Elektronická spektra | 28 |
| | 11. Chemická reaktivita | 34 |
| | 12. Dipólový moment | 45 |
| II. | POZNÁMKY K ŘEŠENÍ A VÝSLEDKY | 47 |
| III. | TABULKY KVANTOVĚ CHEMICKÝCH DAT | |
| | HMO | 133 |
| | 1. Orbitální energie | 133 |
| | 2. Rozvojové koeficienty | 135 |
| | 3. Energetické charakteristiky | 142 |
| | 4. Molekulové diagramy | 146 |
| IV. | DODATEK | 149 |
| | 1. Vzorce, některé základní vztahy a definice v rámci metody HMO | 149 |
| | 1.A. Základní veličiny HMO. | 149 |

| | |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 1.B. Vztahy mezi E , p , q , α , β a některé způsoby kontroly správnosti výpočtů | 151 |
| 1.C. Poruchový počet v rámci HMO | 152 |
| 1.D. Tranzitní moment | 153 |
| 1.E. McLachlanova rovnice | 154 |
| 1.F. ω -Technika | 154 |
| 1.G. Metoda Coulsona a Gołbiewského | 154 |
| 2. Metoda valenčních struktur (VB) | 155 |
| 3. Metoda volného elektronu (FEMO) | 157 |
| 4. Metoda SCF-MO | 157 |
| 4.A. Maticové elementy | 157 |
| 4.B. Celková energie SCF. | 159 |
| 5. Metoda konfigurační interakce (CI). | 160 |
| V. LITERATURA. | 161 |