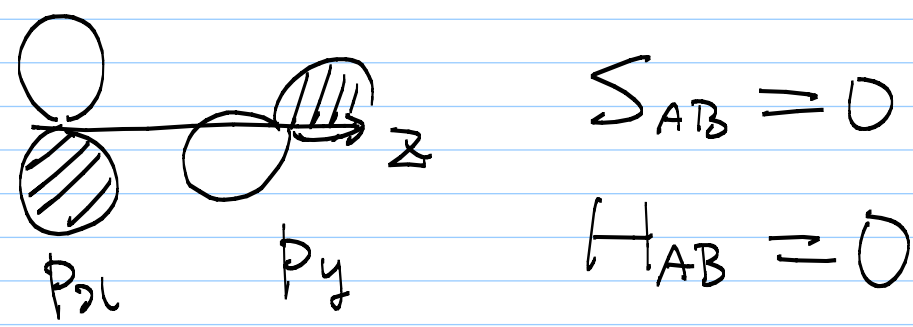


$$S \quad p \quad H_{AB} = \int \psi_s^* \hat{H} \psi_p d\tau = 0$$

対称性 ↗

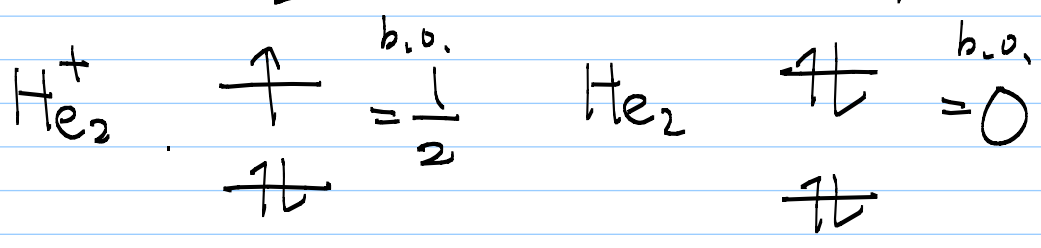
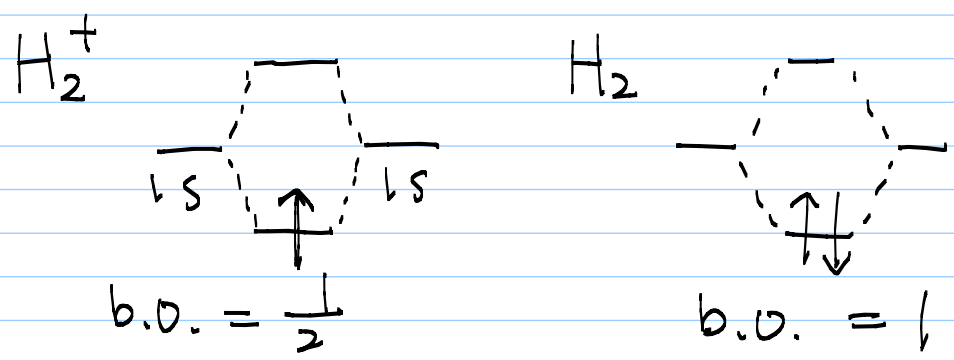


▷  $\beta$  (共鳴積分) の大きさは対称性に依存

### 結合次数 (Bond order)

$$b.o. = \frac{1}{2} (n - n^*)$$

結合性 MO を占める電子数      反結合性



## 練習問題

$\text{Li}_2, \text{Be}_2, \text{B}_2, \text{C}_2, \text{N}_2, \text{O}_2, \text{F}_2$

の b.o. を求めよ。

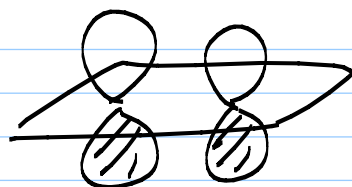
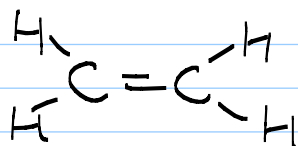
結合エネルギーの実測値との相関を調べよ。

(eV) 1.05, (0.10), 2.89, 6.36, 9.90,  
計算値 5.21, 1.69

---

## Hückel 法 (有機分子の $\pi$ 電子)

炭素の  $2p_\pi$  AO を使う。



- 重なり積分は無視  $S = \begin{bmatrix} 1 & & 0 \\ & 1 & \\ 0 & & 1 \end{bmatrix}$   
単位行列
- H の対角項は全て  $\alpha$  とする  
( $1 \times 5 \times -A$ )
- 非対角項は隣接炭素間の  $2\beta$   
他はゼロとする

$$\det(H - E \mathbb{1}) = 0$$

$\mathbb{1}$  (単位行列)

$$(H - E \mathbb{1})C = 0$$

が  $C \neq 0$  の解を持つ

$$HC = EC$$

行列の固有値問題

(例)  $2 \times 2$  の  $C = C =$

$$H = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta & \alpha \end{pmatrix}$$

$$H C = C \begin{matrix} H \\ H \end{matrix} = C \begin{matrix} H \\ H \end{matrix}$$

フ"ラ"グ"エ"ン  $C = C' - C = C'$

$$H = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & 0 & 0 \\ \beta & \alpha & \beta & 0 \\ 0 & \beta & \alpha & \beta \\ 0 & 0 & \beta & \alpha \end{pmatrix}$$

フ"ラ"グ"エ"ン

$$\begin{pmatrix} \alpha & \beta & 0 & 0 & \beta \\ \beta & \alpha & \beta & 0 & 0 \\ 0 & \beta & \alpha & \beta & 0 \\ 0 & 0 & \beta & \alpha & \beta \\ \beta & 0 & 0 & \beta & \alpha \end{pmatrix}$$

