



作业：

思考题1. 运用休克尔分子轨道理论推导苯分子 π 分子轨道的能量和组成，画出能级图，并推算其离域能。

思考题2. 运用休克尔分子轨道理论推导线式共轭[n]烯烃 π 分子轨道的正弦波规律：

k 为分子轨道能级 ($k = 1, 2, 3, \dots, n$)

第 k 个能级的能量为： $E_k = \alpha + 2\beta \cos(k\theta)$ 其中 $\theta = 2\pi/(n+1)$

第 k 个能级的 π 分子轨道为： $\psi_k^\pi = \sum_{m=1}^n \phi_m \sin(mk\theta)$

思考题3. 运用休克尔分子轨道理论推导[n]环共轭体系 π 分子轨道的能量和组成为：

$\theta = 2\pi/n$ k 与能级有关， $k = 0, 1, 2, \dots, (n-1)/2$ (for $n=odd$) or $n/2$ ($n=even$)

$E_k = \alpha + 2\beta \cos(k\theta)$ $\psi_k^{cos} = \sum_{m=1}^n \phi_m \cos[(m-1)k\theta]$ $\psi_k^{sin} = \sum_{m=1}^n \phi_m \sin[(m-1)k\theta]$
(when $k\theta = 0$ or π , no ψ_k^{sin})