



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 $n=\text{odd}$) or $n/2$ ($n=\text{even}$)

$$E_k = \alpha + 2\beta \cos(k\theta) \quad \psi_k^{\cos} = \sum_{m=1}^n \phi_m \cos[(m-1)k\theta] \quad \psi_k^{\sin} = \sum_{m=1}^n \phi_m \sin[(m-1)k\theta]$$

(when $k\theta = 0$ or π , no ψ_k^{\sin})