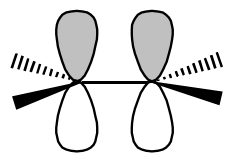
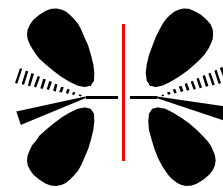
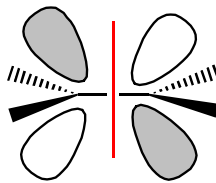
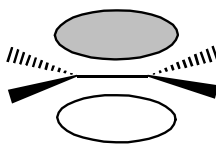


1 csomósík

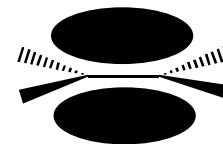
Etén



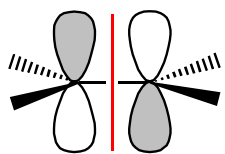
nincs csomósík



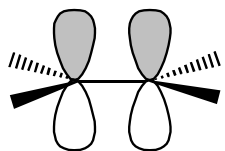
molekulapálya



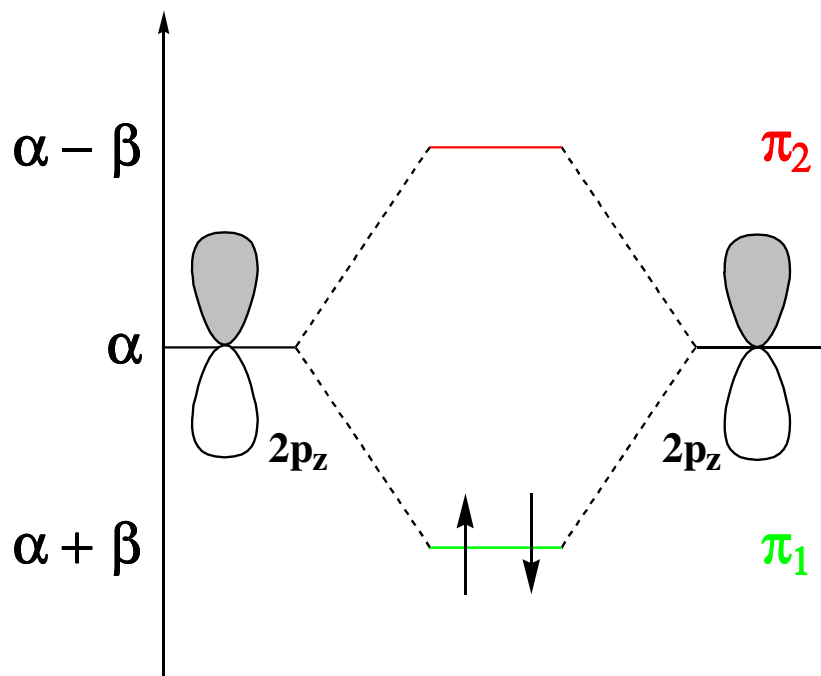
elektronsűrűség



1 csomósík



nincs csomósík



α : Coulomb-integrál (elektron a saját atommagjának erőterében)

β : kötési vagy rezonancia integrál (elektron mindkét mag erőterében), nem szomszédos atomok esetében nulla. A Hückel-módszer legegyszerűbb változata a molekulapályák átfedési integráljait 0-nak tekinti.

Energiaszintek számolása: lineáris egyenletrendszer szekuláris determinánsának kiszámolása.
 $\beta_{ij} = \beta_{ji} = \beta$, ha i és j szomszédos, egyébként 0.

$$\begin{vmatrix} \alpha - \epsilon & \beta_{12} & \beta_{13} & \dots & \beta_{1n} \\ \beta_{21} & \alpha - \epsilon & \beta_{23} & \dots & \beta_{2n} \\ \beta_{31} & \beta_{32} & \alpha - \epsilon & \dots & \beta_{3n} \\ \vdots & & & & \vdots \\ \beta_{n1} & \beta_{n2} & \beta_{n3} & \dots & \alpha - \epsilon \end{vmatrix} = 0$$

Etén: $\begin{vmatrix} \alpha - \epsilon & \beta \\ \beta & \alpha - \epsilon \end{vmatrix} = 0$ osztás β -val, alkalmazva a $\frac{\alpha - \epsilon}{\beta} = x$ helyettesítést,

$$\begin{vmatrix} x & 1 \\ 1 & x \end{vmatrix} = 0 \quad \text{azaz} \quad x^2 - 1 = 0$$

Ebből következik, hogy $\epsilon_1 = \alpha + \beta$ és $\epsilon_2 = \alpha - \beta$. (α és β egyaránt negatív). Viszonyítás: atomi szint (α , lásd a fenti ábrát). A π -kötési energia (szénatomok esetén igaz):
 $(2\alpha + 2\beta) - (2\alpha) = 2\beta$

Koefficiensek:

$$\begin{vmatrix} c_1(\alpha - \epsilon) & c_2\beta \\ c_1\beta & c_2(\alpha - \epsilon) \end{vmatrix} = 0 \quad \text{osztás } \beta\text{-val} \quad \frac{\alpha - \epsilon}{\beta} = x \quad \begin{vmatrix} c_1x & c_2 \\ c_1 & c_2x \end{vmatrix} = 0$$

$$\text{Normálási feltétel: } \sum_{i=1}^n c_i^2 = 1$$

$$\begin{vmatrix} c_1(\alpha - \epsilon) & c_2\beta \\ c_1\beta & c_2(\alpha - \epsilon) \end{vmatrix} = 0 \quad \text{osztás } \beta\text{-val} \quad \frac{\alpha - \epsilon}{\beta} = x \quad \begin{vmatrix} c_1x & c_2 \\ c_1 & c_2x \end{vmatrix} = 0$$

$$\text{Normálási feltétel: } \sum_{i=1}^n c_i^2 = 1$$

Ebből: $c_1 = 1/\sqrt{2}$ és $c_2 = 1/\sqrt{2}$
 $c_1 = 1/\sqrt{2}$ és $c_2 = -1/\sqrt{2}$

$\pi_1 = 1/\sqrt{2} (2p_1) + 1/\sqrt{2} (2p_2)$,
 $\pi_2 = 1/\sqrt{2} (2p_1) - 1/\sqrt{2} (2p_2)$.

π_1 az etén kötő molekulapályája, π_2 az etén lazító molekulapályája, $2p_1$ az egyik szénatom atomi p-pályája, $2p_2$ a másik szénatom atomi p-pályája. Egyelektron-sűrűség egy adott atomon: koefficiens négyzete, ami 2 elektron esetén 2-vel szorzandó. Az etén mindkét szénatomján az így számított elektronsűrűség $2 \times 0,5 = 1$.

Allilrendszer

$$\begin{vmatrix} \alpha - \epsilon & \beta_{12} & \beta_{13} \\ \beta_{21} & \alpha - \epsilon & \beta_{23} \\ \beta_{31} & \beta_{32} & \alpha - \epsilon \end{vmatrix} = 0 \quad \begin{vmatrix} \alpha - \epsilon & \beta_{12} & 0 \\ \beta & \alpha - \epsilon & \beta \\ 0 & \beta & \alpha - \epsilon \end{vmatrix} = 0 \quad \begin{vmatrix} x & 1 & 0 \\ 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix} = 0$$

$$x^3 - 2x = 0$$

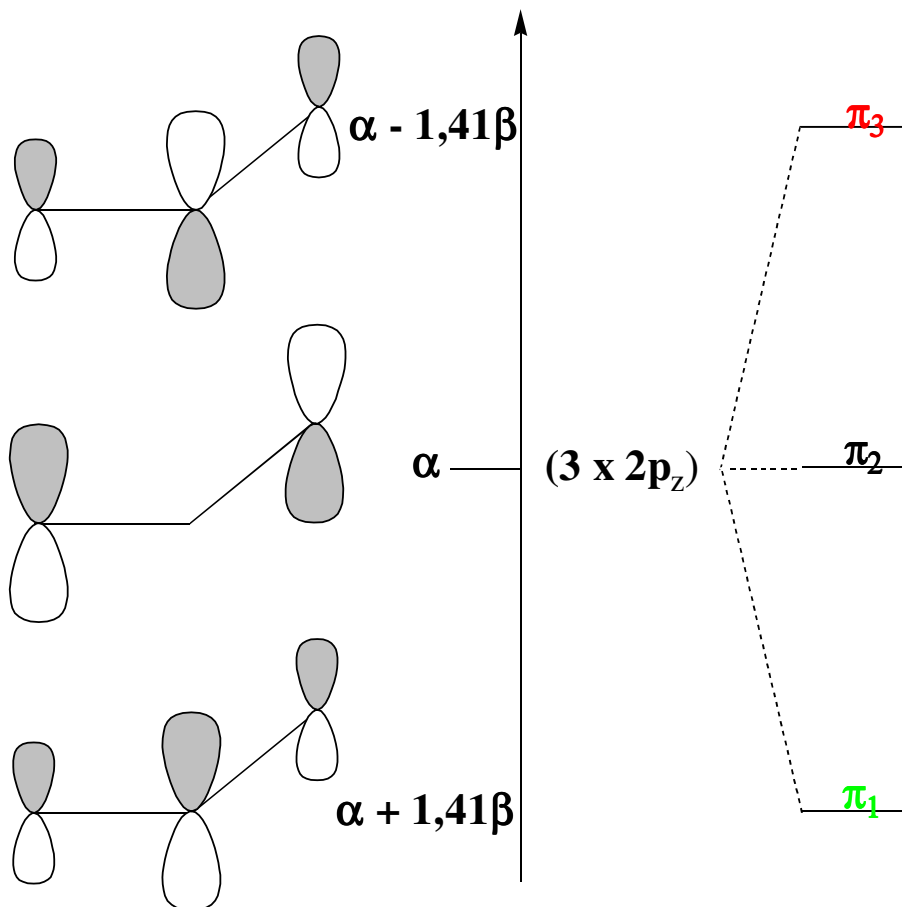
Alkalmazva az eténnél használt helyettesítéseket, elvégezve a számolást:

$$\epsilon_1 = \alpha + 1,41\beta \quad \epsilon_2 = \alpha \quad \epsilon_3 = \alpha - 1,41\beta.$$

A koefficiensek: felülről lefelé, a π_1 , π_2 és π_3 MO-kra vonatkozóan.

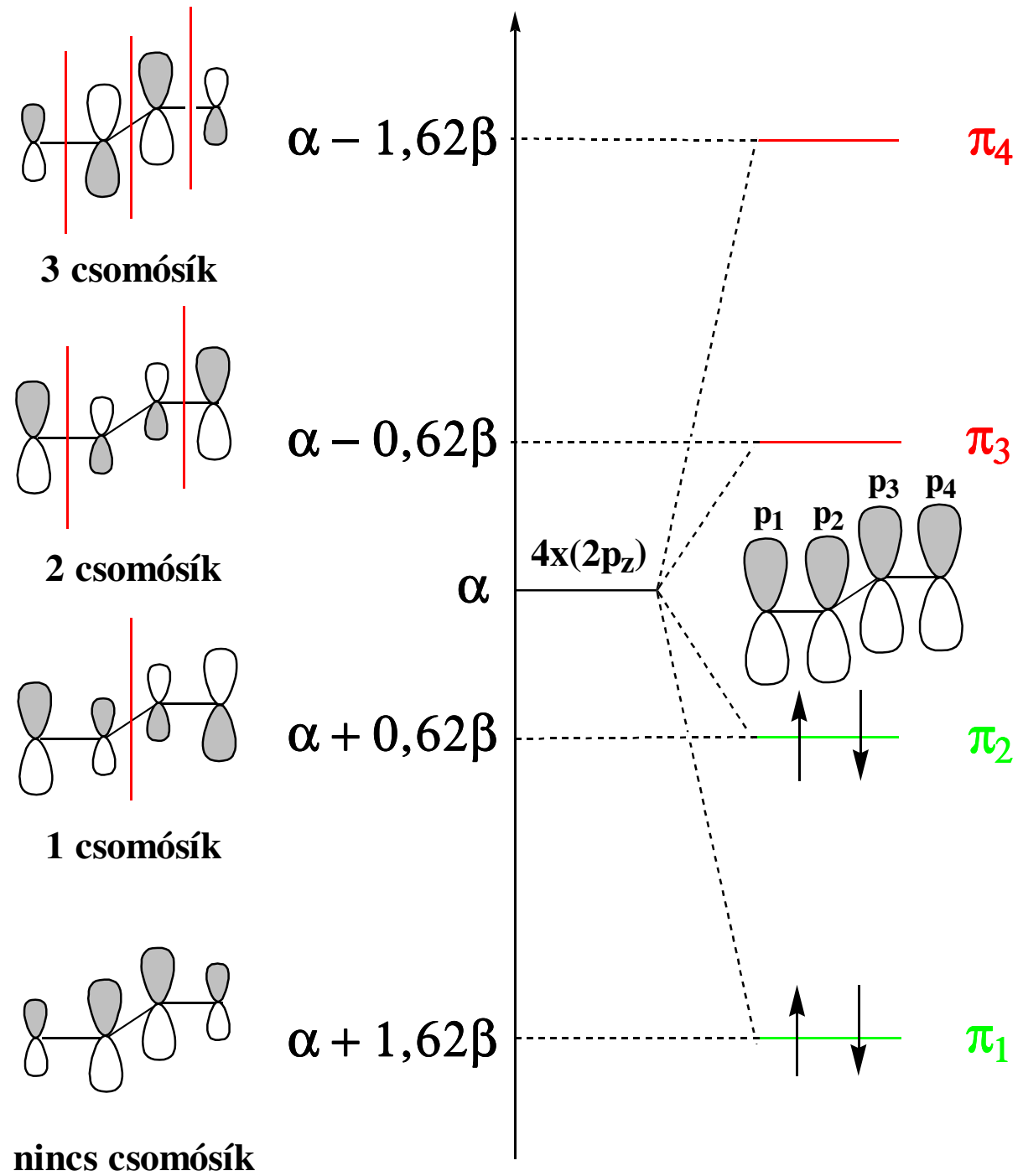
$$\begin{array}{lll} c_1 = 1 / 2 & c_2 = 1 / \sqrt{2} & c_3 = 1 / 2 \\ c_1 = 1 / \sqrt{2} & c_2 = 0 & c_3 = -1 / \sqrt{2} \\ c_1 = 1 / 2 & c_2 = -1 / \sqrt{2} & c_3 = 1 / 2 \end{array}$$

:



Butadién

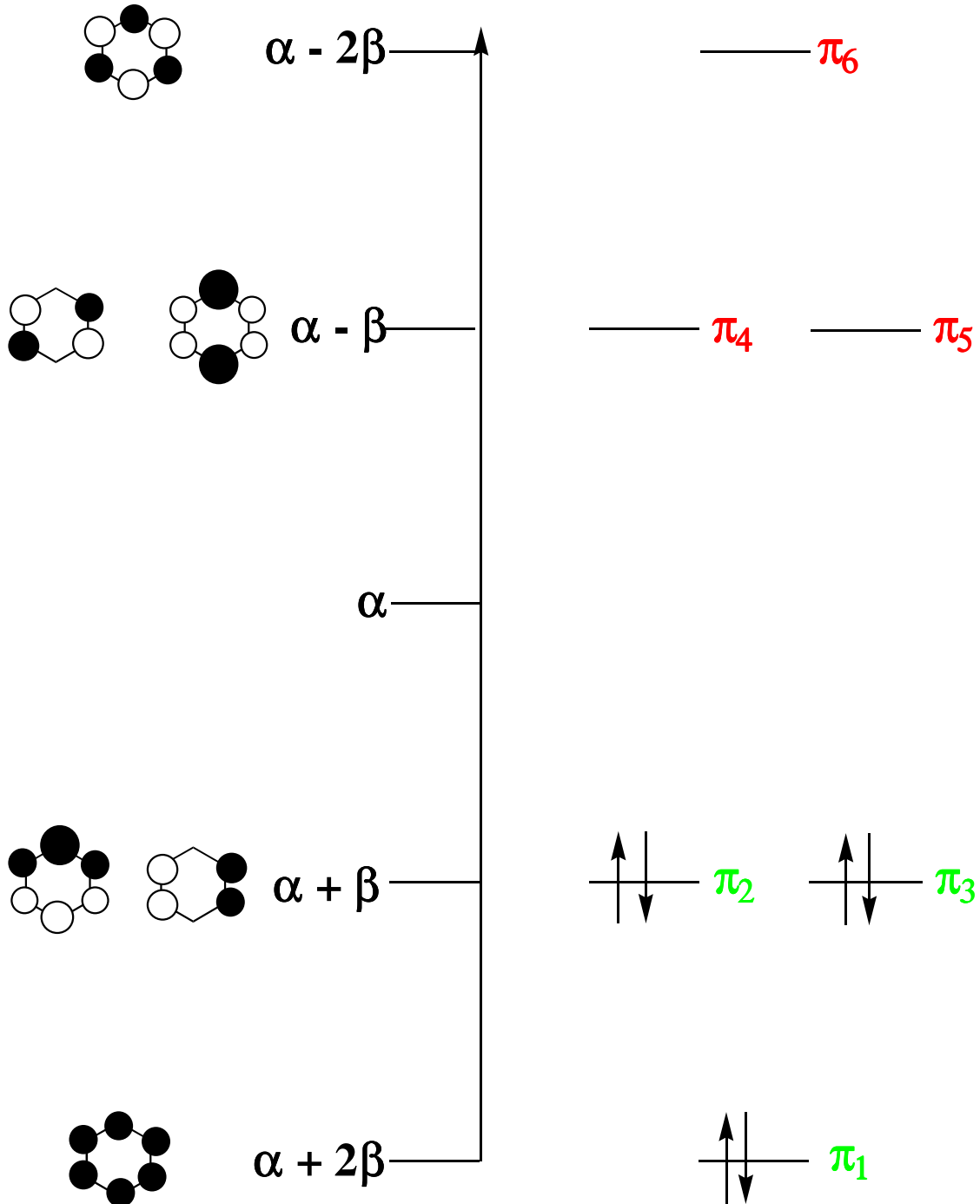
A butadiénre hasonlóképpen lehet felírni a fenti determinánsokat és elvégezni a számolást.



Benzol

A benzolra vonatkozó szekuláris determináns már hatodrendű, a megoldás megkönnyítéséhez olyan módszerekre van szükség, amelyek már csoportelméletben való jártasságot feltételeznek, ezért ennek ismertetésétől eltekintünk.

A benzol molekulapályáinak relatív energiaszintjei és szimmetriaviszonyai:



A delokalizációs energia $2 \times (\alpha + 2\beta) + 4 \times (\alpha + \beta) - 6(\alpha + \beta) = 2\beta$ (a lokalizált kettőskötéseket tartalmazó hipotetikus ciklohexa-1,3,5-tiénre vonatkoztatva).

Frost-Musulin körök

Rajzoljunk egy 2β sugarú kört α középponttal. Ha ebbe az ábrán látható módon berajzoljuk a gyűrűs konjugált poliéneket jelképező sokszögeket, a csúcsok és a kör kerületének érintkezési pontjai a π -molekulapályák elhelyezkedését és energiaszintjeit mutatják.

