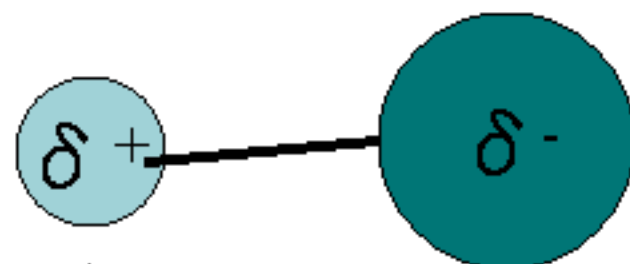


異核二原子分子

極性結合 $\psi = c_A A + c_B B$

部分電荷

非極性結合 $|c_A|^2 = |c_B|^2$



電気陰性度 χ 電子を引きつける能力

変分原理

永年方程式

$$(\alpha_A - E)c_A + (\beta - ES)c_B = 0$$

$$(\beta - ES)c_A + (\alpha_B - E)c_B = 0$$

クーロン積分

共鳴積分

永年行列式

多原子分子の分子オービタル

$$\psi = \sum_i c_i \psi_i$$

ウォルシュ図

分子の幾何学構造
分子オービタル

ヒュッケル近似

共役分子 σ オービタルと π オービタルの分離

最高被占分子オービタル HOMO

最低空分子オービタル LUMO

フロンティアオービタル

非局在化エネルギー