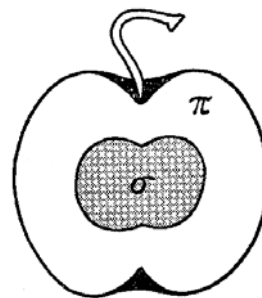


6月27日-2 第11回 11章 分子構造

多原子分子系の分子オービタル

11・6 ヒュッケル近似



担当教員: 福井大学大学院工学研究科生物応用化学専攻 教授

前田史郎

E-mail: smaeda@u-fukui.ac.jp

URL: <http://acbio2.acbio.u-fukui.ac.jp/phychem/maeda/kougi>

1

6月27日-1

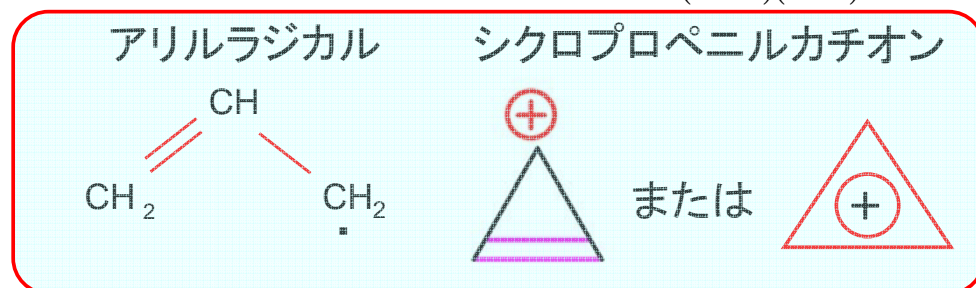
分子イオン $H_3^+$ の分子オービタルを、共役 $\pi$ 結合を含む系と同じように1sオービタルのLCAO-MOを用いて書くことができる。

(1)Hückel近似を適用してMOエネルギーを計算し、エネルギー準位図を描け。

(2) $H_3^+$ には直線形と正三角形の2つの構造が考えられるが、どちらの構造が安定か、その根拠とともに答えよ。

(3)次のスライドに示したMO係数を用いて、結合次数と電子密度を計算せよ。

ヒント：直線形 $H_3^+$ の永年方程式はアリルラジカルと同じであり、正三角形 $H_3^+$ の永年方程式はシクロプロペニルカチオンと同じである。また、 $x^3 - 3x + 2 = (x + 2)(x - 1)^2$  である。



2

## 分子軌道係数

### 直線型H<sub>3</sub><sup>+</sup>

	C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>
	χ[1]	χ[2]	χ[3]
φ[1]	0.500	0.707	0.500
φ[2]	0.707	0.000	-0.707
φ[3]	-0.500	0.707	-0.500

### 結合次数

$$p_{ab} = \sum_{\mu=1}^{\text{HOMO}} n_{\mu} c_{a\mu} c_{b\mu}$$

### 三角形型H<sub>3</sub><sup>+</sup>

	C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>
	χ[1]	χ[2]	χ[3]
φ[1]	0.577	0.577	0.577
φ[2]	0.000	0.707	-0.707
φ[3]	0.816	-0.408	-0.408

### 電子密度

$$q_a = \sum_{\mu=1}^{\text{HOMO}} n_{\mu} c_{a\mu}^2$$

$$\begin{aligned}\phi[1] &= c_{11}\chi[1] + c_{21}\chi[2] + c_{31}\chi[3] \\ \phi[2] &= c_{12}\chi[1] + c_{22}\chi[2] + c_{32}\chi[3] \\ \phi[3] &= c_{13}\chi[1] + c_{23}\chi[2] + c_{33}\chi[3]\end{aligned}$$

### [解答例]

(1) 直線型H<sub>3</sub><sup>+</sup>にヒュッケル近似を適用する。永年方程式はアリルラジカルの場合と同じである。ここで、電子数は2個である。

$$\begin{vmatrix} \alpha - E & \beta & 0 \\ \beta & \alpha - E & \beta \\ 0 & \beta & \alpha - E \end{vmatrix} = 0$$

各要素をβで割って、(α-E)/β=xとおくと、

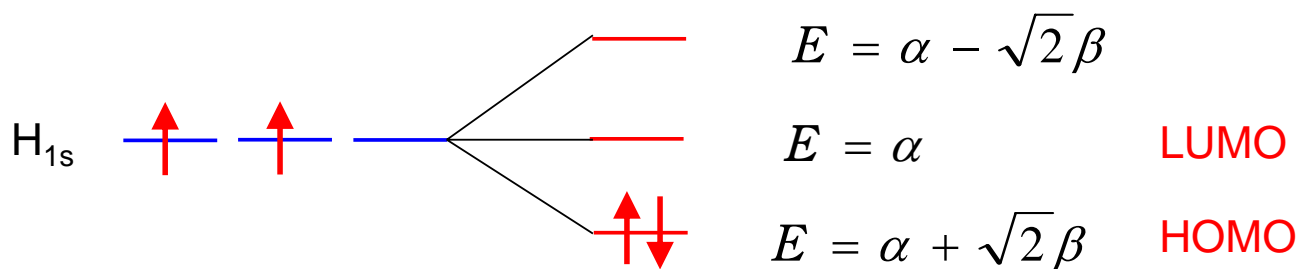
$$\begin{vmatrix} x & 1 & 0 \\ 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix} = 0$$

$$\begin{vmatrix} x & 1 & 0 \\ 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix} = (x^3 - 2x) = x(x^2 - 2)$$

$$x(x^2 - 2) = 0$$

$$\therefore x = 0, x = \pm\sqrt{2}$$

$$(\alpha - E)/\beta = x \text{ であるから } \begin{cases} E = \alpha \\ \frac{(\alpha - E)}{\beta} = \pm\sqrt{2}, \quad \therefore E = \alpha \pm \sqrt{2}\beta \end{cases}$$



全電子エネルギー  $E(\text{linear})$  は、 $E_{total}(\text{linear}) = 2\alpha + 2\sqrt{2}\beta$

5

(2) 正三角形型  $H_3^+$  にヒュッケル近似を適用する。永年方程式はシクロプロペニルカチオンの場合と同じである。ここで、電子数は2個である。

$$\begin{vmatrix} \alpha - E & \beta & \beta \\ \beta & \alpha - E & \beta \\ \beta & \beta & \alpha - E \end{vmatrix} = 0$$

各要素を  $\beta$  で割って、 $(\alpha - E)/\beta = x$  とおくと、

$$\begin{vmatrix} x & 1 & 1 \\ 1 & x & 1 \\ 1 & 1 & x \end{vmatrix} = 0$$

$$\begin{vmatrix} x & 1 & 1 \\ 1 & x & 1 \\ 1 & 1 & x \end{vmatrix} = (x^3 + 2) - (x + 2x) = x^3 - 3x + 2$$

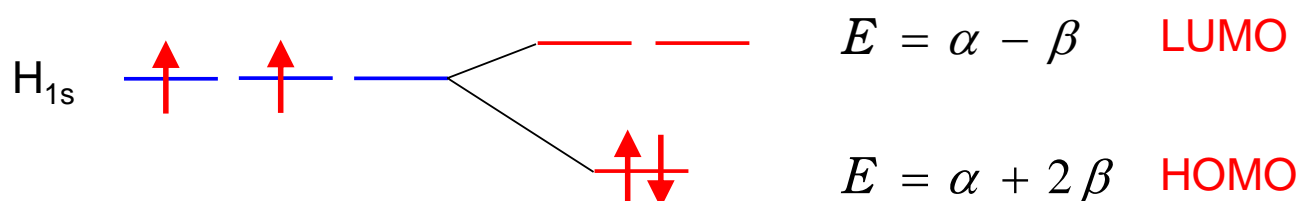
$$= (x + 2)(x - 1)^2 = 0$$

6

$$(x+2)(x-1)^2 = 0$$

$\therefore x = -2, x = 1$  (重根)

$$(\alpha - E)/\beta = x \text{ であるから } \begin{cases} \frac{(\alpha - E)}{\beta} = 1, & \therefore E = \alpha - \beta \\ \frac{(\alpha - E)}{\beta} = -2, & \therefore E = \alpha + 2\beta \end{cases}$$



全電子エネルギー  $E(\text{triangle})$  は、  $E_{total}(\text{triangle}) = 2\alpha + 4\beta$

7

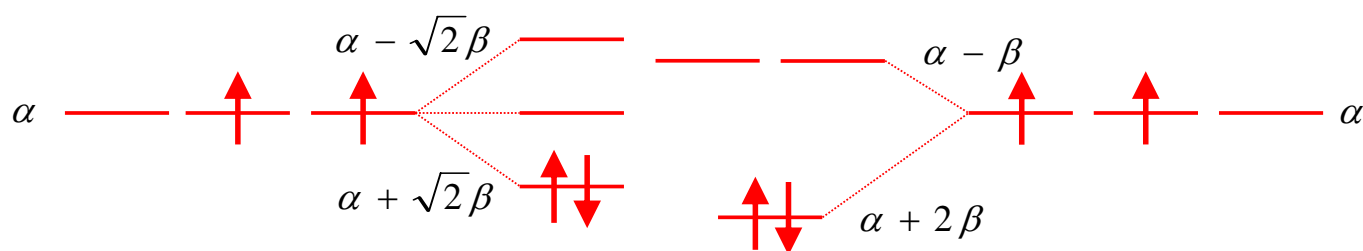
永年方程式      エネルギー固有値      全電子エネルギー

直線型 H <sub>3</sub> <sup>+</sup>	$\begin{vmatrix} x & 1 & 0 \\ 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix} = 0$	$E = \alpha - \sqrt{2}\beta$ $E = \alpha$ $E = \alpha + \sqrt{2}\beta$	$E_{total} = 2\alpha + 2\sqrt{2}\beta$
正三角形型 H <sub>3</sub> <sup>+</sup>	$\begin{vmatrix} x & 1 & 1 \\ 1 & x & 1 \\ 1 & 1 & x \end{vmatrix} = 0$	$E = \alpha - \beta$ $E = \alpha + 2\beta$	$E_{total} = 2\alpha + 4\beta$

8

直線型  $H_3^+$

正三角形型  $H_3^+$



全エネルギー  $2\alpha + 2\sqrt{2}\beta$      $2\alpha + 4\beta$

安定化エネルギー  $2\sqrt{2}\beta$      $4\beta$

$\beta < 0$ であるから,

$$E_{total}(\text{triangle}) < E_{total}(\text{linear})$$

したがって、正三角形型 $H_3^+$ の方が全エネルギーが低くて、安定であると考えられる。

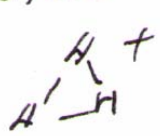
UCSC (University of California, Santa Cruz)

Department of Chemistry and Biochemistry

Chemistry 163A Quantum Mechanics and Spectroscopy

Fall 2006

Problem Set #9

3) use Hückel MO theory to determine whether the linear state  $H-H-H^+$  or the triangular state  of  $H_3^+$  is more stable.

ヒュッケルMO理論を用いて、直線型と三角形型の $H_3^+$ のどちらがより安定化決定しなさい。

3) For  $\begin{array}{c} \text{H} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{H} - \text{H} \end{array}$  :  $\begin{vmatrix} \alpha - E & \beta & \beta \\ \beta & \alpha - E & \beta \\ \beta & \beta & \alpha - E \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{vmatrix} x & 1 & 1 \\ 1 & x & 1 \\ 1 & 1 & x \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow x^3 - 3x + 2 = 0$   
 $x = 1, 1, -2.$   
 $E = \alpha + 2\beta, \alpha - \beta, \alpha - \beta$   
 $E_{H_3^+} = 2\alpha + 4\beta$

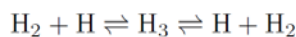
For  $\text{H}-\text{H}-\text{H}$  :  $\begin{vmatrix} \alpha - E & \beta & 0 \\ \beta & \alpha - E & \beta \\ 0 & \beta & \alpha - E \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{vmatrix} x & 1 & 0 \\ 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow x^3 - 2x = 0$   
 $x = 0, \pm\sqrt{2}$   
 $E = \alpha + \sqrt{2}\beta, \alpha, \alpha - \sqrt{2}\beta$   
 $E_{H_3^+} = 2\alpha + 2\sqrt{2}\beta$

The triangular geometry is more stable ~~for~~ since  $2\alpha + 4\beta < 2\alpha + 2\sqrt{2}\beta$   
 ( $\beta$  is negative!)

$2\alpha + 4\beta < 2\alpha + 2\sqrt{2}\beta$  であるから、三角形型がより安定である  
 ( $\beta$  は負である)。

## ミシガン大学CHEM461 量子化学

9. The species  $\text{H}_3$  occurs as an intermediate in the hydrogen exchange reaction



Is  $\text{H}_3$  a linear or a triangular molecule? For both the linear and equilateral triangular configurations, apply a variant of the Hückel theory based on hydrogen 1s orbitals (rather than carbon 2p) to predict which has the lower energy. Also predict the shapes of the ions  $\text{H}_3^+$  and  $\text{H}_3^-$ .

9. For linear  $\text{H}_3$ , the secular equation is

$$\begin{vmatrix} x & 1 & 0 \\ 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix} = x^3 - 2x = 0$$

with roots  $x = 0, \pm\sqrt{2}$ . Thus the three MO energies are  $\alpha - \sqrt{2}\beta, \alpha, \alpha + \sqrt{2}\beta$ . The energy of the three-electron ground state is  $3\alpha + 2\sqrt{2}\beta \approx 3\alpha + 2.828\beta$ .

For triangular  $\text{H}_3$ ,

$$\begin{vmatrix} x & 1 & 1 \\ 1 & x & 1 \\ 1 & 1 & x \end{vmatrix} = x^3 - 3x + 2 = 0$$

One obvious root is  $x = 1$ . Division of  $x^3 - 3x + 2$  by  $x - 1$  gives  $x^2 + x - 2$ , with roots  $x = 1$  and  $-2$ . The three MO's are  $\alpha + 2\beta, \alpha - \beta, \alpha - \beta$ . The energy of the ground state is  $3\alpha + 3\beta$ .

Apparently the triangular form of  $\text{H}_3$  has a slightly lower energy.

<http://www.umich.edu/~chem461/Ex11.pdf>



Quantum Chemistry

Spring Term 2002

Professor S. M. Blinder [sblinder@umich.edu](mailto:sblinder@umich.edu)

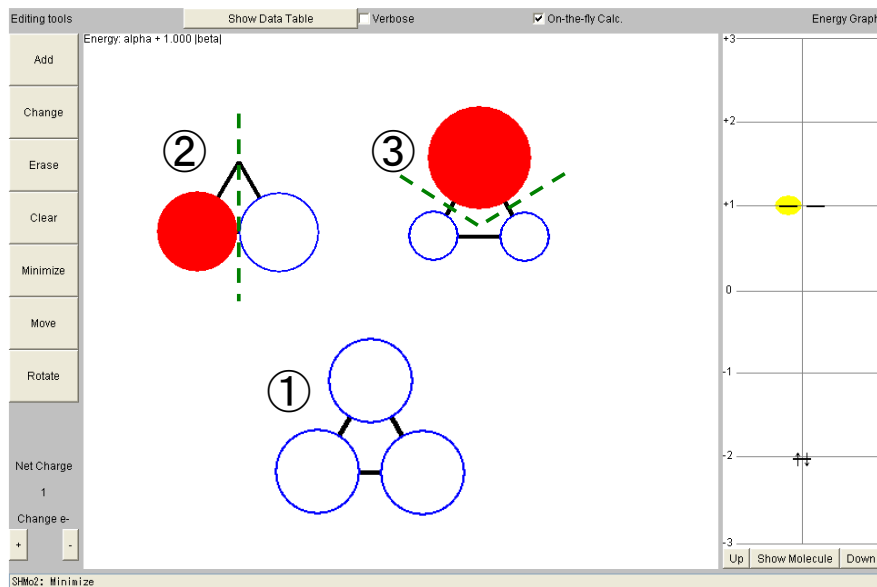
$H_3^+$  as the benchmark for rigorous *ab initio* theoryChristopher P. Morong <sup>\*,1</sup>, Jennifer L. Gottfried <sup>2</sup>, Takeshi Oka

Departments of Chemistry, Astronomy &amp; Astrophysics, The Enrico Fermi Institute, University of Chicago, Chicago, IL 60637, USA

$H_3^+$  is the simplest polyatomic molecule and hence serves as the benchmark for rigorous *ab initio* theory. With two electrons like  $H_2$ , but with three protons instead of two, namely, with three inter-nuclear coordinates rather than one, the rigorous treatment for  $H_3^+$  is much more demanding than for  $H_2$ . After its discovery by J.J. Thomson in 1911 [8], the divalent nature of bonding was a mystery to authors of early theoretical papers including illustrious names such as Bohr [9], Massey [10], Hirschfelder [11–15], and Eyring [12,13]. With Lennard–Jones’s suggestion, Coulson [16] applied the molecular orbital method to  $H_3^+$  and concluded that its equilibrium structure is an equilateral triangle although the calculation was severely criticized [12]. These pioneering papers were followed by a great many theoretical works especially after the advent of modern computers (see Oka [17], McNab [18] and Anderson [19] for review).

13

正三角形型 $H_3^+$ のMO係数を計算する。分子が正三角形であるので、対称性から係数の予測が付く。結合性オービタルはノードがないので、係数は全て同じ値と符号を持つ①。反結合性オービタル(1)は、どれかの係数がゼロとすると、他の2つは同じ値で反対符号の②。反結合性オービタル(2)は、1つが他の2倍の値で、他と符号が異なる③である。



SHMOによる計算結果を下に示す。対称性からの予測と一致する。

	$C_1$	$C_2$	$C_3$
	$\chi[1]$	$\chi[2]$	$\chi[3]$
① $\phi[1]$	0.577	0.577	0.577
② $\phi[2]$	0.000	0.707	-0.707
③ $\phi[3]$	0.816	-0.408	-0.408

# 結合次数と電子密度

SHMo2 Data Table  
triangular H3+

Number of Electrons = 2 Net Charge = 1

LUMO = (2) alpha + 1.000 |beta| HOMO = (1) alpha - 2.000 |beta|

Lowest Ionization Energy (Koopmans' Theorem) = 14.60 eV

Lowest Excitation Energy = -5.310 eV

Orbital Energies / Coefficients Table

Orbital energies in units of |beta| relative to alpha

Energy -->	1	2	3
# Symbol	-2.000	1.000	1.000
1 C	-0.577	0.000	0.816
2 C	-0.577	0.707	-0.408
3 C	-0.577	-0.707	-0.408

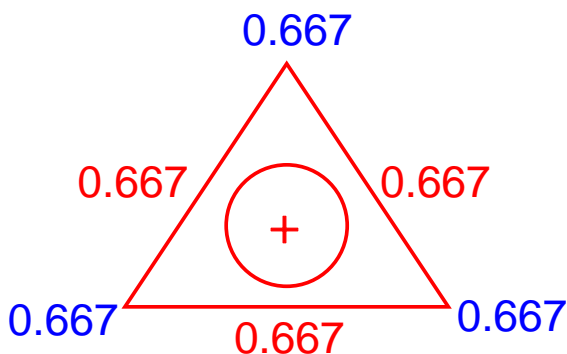
Population Tables

Atoms

#	Symbol	hX	Electron Pop.	Net Charge
1	C	0.00	0.667	0.333
2	C	0.00	0.667	0.333
3	C	0.00	0.667	0.333

Bonds

i	j	X--Y	kXY	Bond Order
1	2	C--C	-1.000	0.667
2	3	C--C	-1.000	0.667
3	1	C--C	-1.000	0.667



## 正三角形型H<sub>3</sub><sup>+</sup>の各結合の結合次数

	C <sub>1</sub> χ[1]	C <sub>2</sub> χ[2]	C <sub>3</sub> χ[3]
φ[1]	0.577	0.577	0.577
φ[2]	0.000	0.707	-0.707
φ[3]	0.816	-0.408	-0.408

$$\begin{aligned} \phi[1] &= c_{11}\chi[1] + c_{21}\chi[2] + c_{31}\chi[3] \\ \phi[2] &= c_{12}\chi[1] + c_{22}\chi[2] + c_{32}\chi[3] \\ \phi[3] &= c_{13}\chi[1] + c_{23}\chi[2] + c_{33}\chi[3] \end{aligned}$$

## 結合次数

$$p_{ab} = \sum_{\mu=1}^{\text{HOMO}} n_{\mu} c_{a\mu} c_{b\mu}$$

EX

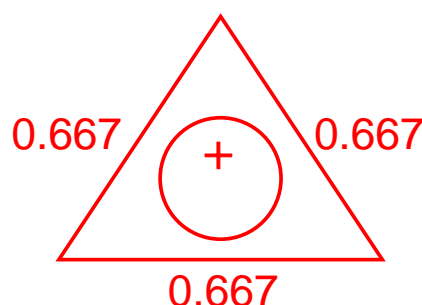
$$\begin{aligned} p_{12} &= 2c_{11}c_{21} \quad \mu=1, a=1, b=2, n_1=2 \\ &= 2 \times 0.5774 \times 0.5774 \\ &= 0.6668 \end{aligned}$$

$$\mu=2,3, n_2=n_3=0 \quad \text{---} \quad E = \alpha - \beta \quad \text{LUMO}$$

$$\begin{aligned} p_{23} &= 2c_{21}c_{31} \quad \mu=1, a=2, b=3, n_1=2 \\ &= 2 \times 0.5774 \times 0.5774 \\ &= 0.6668 \end{aligned}$$

$$\mu=1, n_1=2 \quad \uparrow\downarrow \quad E = \alpha + 2\beta \quad \text{HOMO}$$

$$\begin{aligned} p_{31} &= 2c_{31}c_{11} \quad \mu=1, a=3, b=1, n_1=2 \\ &= 2 \times 0.5774 \times 0.5774 \\ &= 0.6668 \end{aligned}$$





正三角形型H<sub>3</sub><sup>+</sup>の各炭素原子の電子密度

## 電子密度

$$q_a = \sum_{\mu=1}^{\text{HOMO}} n_{\mu} c_{a\mu}^2$$

	C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	
	χ[1]	χ[2]	χ[3]	
φ[1]	0.577	0.577	0.577	φ[1] = c <sub>11</sub> χ[1] + c <sub>21</sub> χ[2] + c <sub>31</sub> χ[3]
φ[2]	0.000	0.707	-0.707	φ[2] = c <sub>12</sub> χ[1] + c <sub>22</sub> χ[2] + c <sub>32</sub> χ[3]
φ[3]	0.816	-0.408	-0.408	φ[3] = c <sub>13</sub> χ[1] + c <sub>23</sub> χ[2] + c <sub>33</sub> χ[3]

$$q_1 = 2c_{11}^2 \quad \mu=1, a=1, n_1=2$$

$$= 2 \times 0.5774^2$$

$$= 0.6668$$

$$q_2 = 2c_{21}^2 \quad \mu=1, a=2, n_1=2$$

$$= 2 \times 0.5774^2$$

$$= 0.6668$$

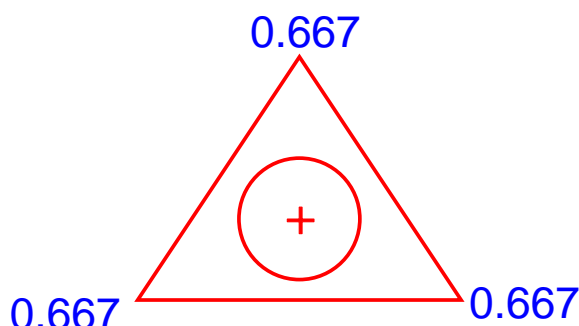
$$q_3 = 2c_{31}^2 \quad \mu=1, a=3, n_1=2$$

$$= 2 \times 0.5774^2$$

$$= 0.6668$$

$$\mu=2,3, n_2=n_3=0 \quad \text{---} \quad E = \alpha - \beta \quad \text{LUMO}$$

$$\mu=1, n_1=2 \quad \uparrow\downarrow \quad E = \alpha + 2\beta \quad \text{HOMO}$$



## ヘテロ原子を含むπ電子系

窒素原子Nや酸素原子Oにも2pオービタルがあり、炭素原子Cとπ結合を作る。

ホルムアルデヒドH<sub>2</sub>C=Oの分子軌道ダイアグラムを図に示す。

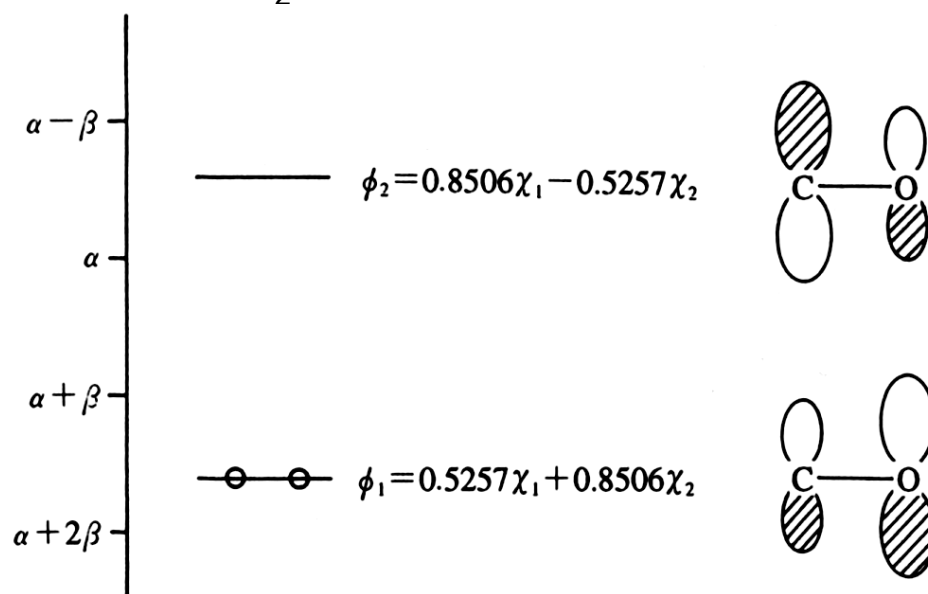


図 6.27 ホルムアルデヒドの分子軌道ダイアグラム

## ○Huckel MO法におけるヘテロ原子の取り扱い

ピリジンやフェノールなど多くの共役化合物は、炭素以外の原子(ヘテロ原子)を含んでいる。このような系に対しては、クーロン積分および共鳴積分と呼ばれる経験的なパラメータ $\alpha$ および $\beta$ の値を、結果が実測値に合うよう適当に定めることによって対応することができる。

クーロン積分は、

$$\alpha_x = \alpha_c + a_x \beta_{c-c}$$

の形で与えられ、原子の電気陰性度などから決められる。

ヘテロ原子との間の共鳴積分は次のような形で与えられ、結合の強さなどに対応させて選ばれる。

$$\beta_{xy} = b_{xy} \beta_{cc}$$

パラメータの値は必ずしも一義的ではない。

ヘテロ原子に対してさまざまなパラメータセットが提案されている。ストライトウィーザーがまとめた値を表に示す。ここで、 $a_x$ はクーロン積分、 $b_{xy}$ は共鳴積分である。N原子とO原子については2種類ある。

表 6.2 ヘテロ原子のパラメータ

原子X	$a_x$	結合XY	$b_{xy}$
$\dot{N}$	0.5	CN	1.0
$\ddot{N}$	1.5	C-N	0.8
$\dot{O}$	1.0	C=O	1.0
$\ddot{O}$	2.0	C-O	0.8
F	3.0	N-O	0.7
Cl	2.0	C-F	0.7
Br	1.5	C-Cl	0.4
		C-Br	0.3

Streitwieser Jr., A. : Molecular Orbital Theory for Organic Chemists, John Wiley & Sons, New York (1961)

## クーロン積分

ピリジンとピロールを例にとる.

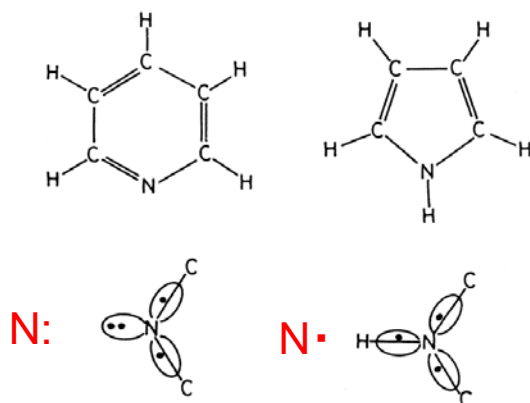


図 6.25 ピリジンとピロールの  $\sigma$ 系への電子供給状況

表 6.2 ヘテロ原子のパラメータ

原子X	$a_x$	結合XY	$b_{xy}$
$\dot{N}$	0.5	CN	1.0
$\ddot{N}$	1.5	C-N	0.8
$\dot{O}$	1.0	C=O	1.0
$\ddot{O}$	2.0	C-O	0.8
F	3.0	N-O	0.7
Cl	2.0	C-F	0.7
Br	1.5	C-Cl	0.4
		C-Br	0.3

Streitwieser Jr., A.: Molecular Orbital Theory for Organic Chemists, John Wiley & Sons, New York (1961)

ピリジンのN原子は $sp^2$ 混成をしていて、2個の $sp^2$ 混成軌道が隣接する炭素原子と $\sigma$ 結合を形成する。残りの $sp^2$ 混成軌道には孤立電子対が入る。残りの1個の2p電子が $\pi$ 電子系に供給される。したがって、 $N\cdot$ と表す。ピリジンは6 $\pi$ 電子系である。一方、ピロールでは2個の2p電子が $\pi$ 電子系に供給される。したがって、 $N:$ と表す。ピロールも6 $\pi$ 電子系である。

**共鳴積分  $\beta$**   $b_{X-Y}$ は単結合,  $b_{X=Y}$ は二重結合,  $b_{XY}$ は共役している分子内の結合の場合の値である。

例:  $b_{C-N}$ はピロール,  $b_{CN}$ はピリジンの場合に用いる。

表 6.2 ヘテロ原子のパラメータ

原子X	$a_x$	結合XY	$b_{xy}$
$\dot{N}$	0.5	CN	1.0
$\ddot{N}$	1.5	C-N	0.8
$\dot{O}$	1.0	C=O	1.0
$\ddot{O}$	2.0	C-O	0.8
F	3.0	N-O	0.7
Cl	2.0	C-F	0.7
Br	1.5	C-Cl	0.4
		C-Br	0.3

Streitwieser Jr., A.: Molecular Orbital Theory for Organic Chemists, John Wiley & Sons, New York (1961)

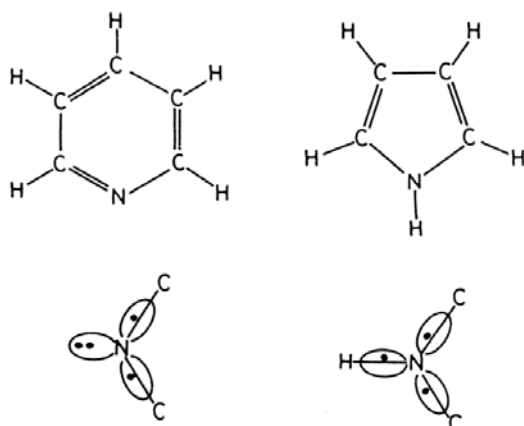
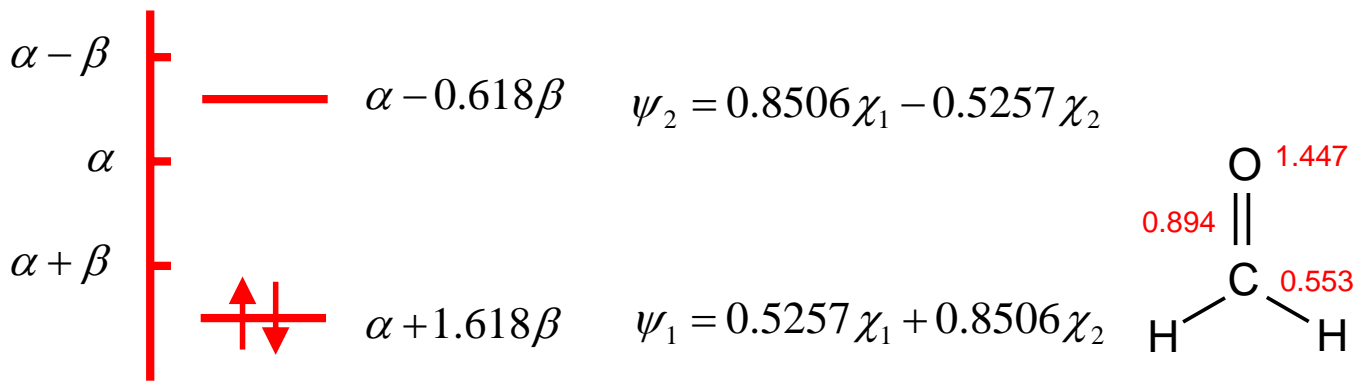


図 6.25 ピリジンとピロールの  $\sigma$ 系への電子供給状況

## ホルムアルデヒド



### 結合次数

### 電子密度

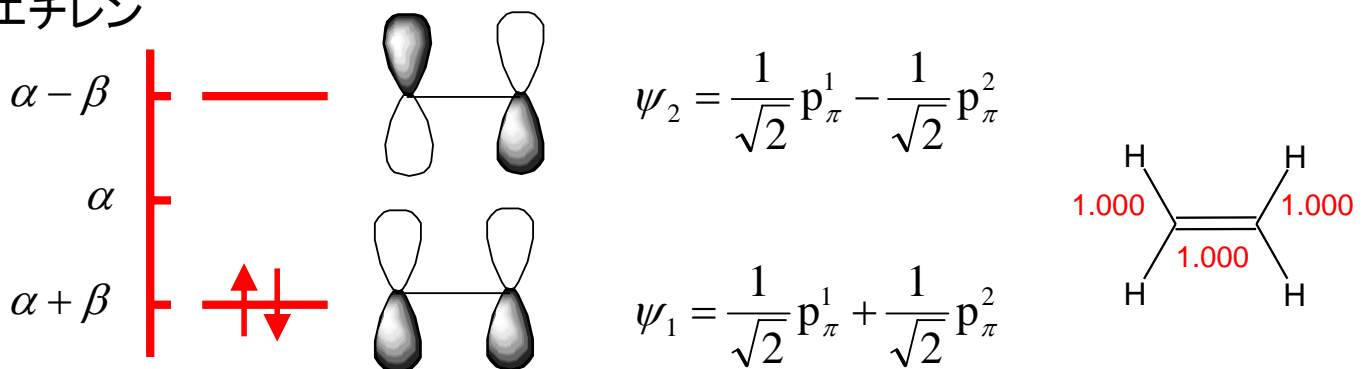
$$\begin{aligned}
 p_{12} &= 2c_{11}c_{21} \\
 &= 2 \times 0.5257 \times 0.8506 \\
 &= 0.8943
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 q_1 &= \sum_{\mu=1}^1 2c_{1\mu}^2 = 2c_{11}^2 \\
 &= 2 \times (0.5257)^2 \\
 &= 0.5527
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 q_2 &= \sum_{\mu=1}^1 2c_{2\mu}^2 = 2c_{21}^2 \\
 &= 2 \times (0.8506)^2 \\
 &= 1.447
 \end{aligned}$$

$$\text{全 } \pi \text{ 電子エネルギー} = 2\alpha + 3.236\beta$$

## エチレン



### 結合次数

### 電子密度

$$\begin{aligned}
 p_{12} &= 2c_{11}c_{21} \\
 &= 2 \times \frac{1}{\sqrt{2}} \times \frac{1}{\sqrt{2}} \\
 &= 1.000
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 q_1 &= \sum_{\mu=1}^1 2c_{1\mu}^2 = 2c_{11}^2 \\
 &= 2 \times \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \right)^2 \\
 &= 1.000
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 q_2 &= \sum_{\mu=1}^1 2c_{2\mu}^2 = 2c_{21}^2 \\
 &= 2 \times \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \right)^2 \\
 &= 1.000
 \end{aligned}$$

$$\text{全 } \pi \text{ 電子エネルギー} = 2\alpha + 2\beta$$

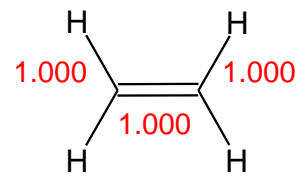
### 孤立したC=C二重結合

各炭素原子上の電子密度: 1.000

結合次数: 1.000

全  $\pi$  電子エネルギー:  $2\alpha + 2\beta$

$$(E(C=C))$$



### 孤立したC=O二重結合

酸素原子上の電子密度: 1.447

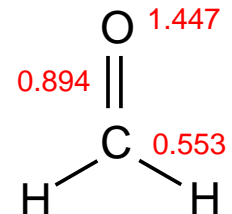
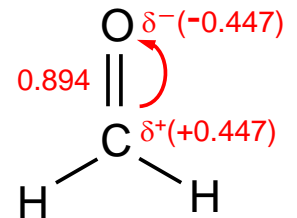
炭素原子上の電子密度: 0.553

結合次数: 0.894

全  $\pi$  電子エネルギー:  $2\alpha + 3.236\beta$

$$(E(C=O))$$

$\pi$  電子の45%  
が酸素原子上に  
移動している。



6月27日-2

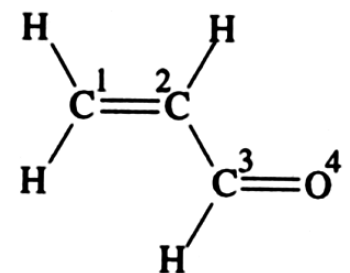
問題. アクリルアルデヒドのヒュッケル分子軌道について次の問に答えよ.

(1) 永年方程式を書け. ただし, 原子には図のように番号を付け, 酸素原子に対するパラメータはストライトウィーザーがまとめた値を用いる.

(2) アクリルアルデヒドの分子軌道ダイヤグラムを描け.

(3) 4個の分子軌道  $\phi[n]$  とその軌道エネルギー  $E$  は次の通りである. 各原子の電子密度と各結合の結合次数を求めよ.

	$\chi[1]$	$\chi[2]$	$\chi[3]$	$\chi[4]$	$E$
	C	C	C	O	
$\phi[1]$	0.228	0.429	0.577	0.657	$\alpha + 1.879\beta$
$\phi[2]$	0.577	0.577	0.000	-0.577	$\alpha + 1.000\beta$
$\phi[3]$	0.657	-0.228	-0.577	0.429	$\alpha - 0.347\beta$
$\phi[4]$	0.429	-0.657	0.577	-0.228	$\alpha - 1.532\beta$



アクリルアルデヒド

(4) C=C結合とC=O結合との共役による安定化エネルギーを計算して, エチレン, ホルムアルデヒドの結果と比較して議論せよ.