ビニルモノマーの電子状態

米 沢 貞 次 郎*

Electronic Structure of some Vinyl Compounds.

Teijiro YONEZAWA*

I. はじめに

ビニルモノマーの π 電子だけに注目して、その極性や、イオン化ポテンシャル、電子親和力、付加重合反応性を論じる取り扱いが従来行なわれ、ある程度の成果がえられたことはよく知られている¹⁾。この π 電子近似では塩化ビニルを例にとると4個の π 電子だけに注目すればよく、 σ 電子は単に π 電子の動く骨格を定めるものとみなされる。

しかしながらこの方法では σ 電子について知見がえがたいこと、たとえばブタジエンのシス、トランス幾何異性体の安定性の相違、化学反応性の差を論じがたいことなどもあって、よりすすんだ近似が要求されるようになった。

近年になって Hoffmann は拡張ヒュッケル法とよばれる分子軌道法を提唱した²⁾。この方法についてはすでに多くの解説³⁾がなされているので、ここでは主な特長だけを述べると

(1) Hückel 近似のわく内で、分子を構成するそれぞれの原子の全価電子を考慮に入れ、分子の σ 、 π 、 n 電子(孤立電子対)の電子状態を比較的簡単に計算しうる。

(2) 分子軌道を作るにあたって、原子価軌道の一次結合をとっているため、従来の混成概念の一次結合をとるのとことなり、従来の混成概念にとらわれないで、分子の電子状態を論じられる。

(3) クーロン積分、共鳴積分を評価するにあたって、原子価状態のイオン化ポテンシャル、スレーター軌道から計算される重なり積分を用いるため、これらの積分の評価には任意性が比較的少なく、かつ非隣接原子間

の共鳴積分も自然な形で導入される。

(4) この方法は、立体配置の相異によるエネルギー差、束縛回転の回転障壁、混成不明な中間体などの電子状態が計算され、水素結合などの分子間相互作用が論議できるなど広い応用をもっている。

このように拡張 Hückel 法は、有機化合物の分子軌道法による取り扱いに新しい道を拓いたものともいえるが、反面 Hückel 法のわく内にとどまり、電子間相互作用があらわに考慮されていない点、核間反発エネルギーの寄与を考慮する際に不明な点が残ること、励起エネルギーの定量的な議論が不可能で一重項、三重項励起状態の差が論じられない、また分子軌道が厳密な意味のSCF (Self Consistent Field) になっていないなどの問題点があげられる。一方コンピュータの発達にともない、一般にはかならずしも容易ではない、重なり積分、クーロン積分、透過積分などの原子積分の計算が短時間に可能になり、根拠を必要とする SCF、すなわちくり返し計算も行なえるようになったこともあって、より定量的になった実験結果を説明しうるより近似の高い分子軌道法の計算法が提唱され、その有用性が認められ、広く有機化学者の間にも用いられるようになった。

この方法はすべての原子価電子を考慮した半経験的 SCF MO 法とも総称されるものが主流をしめており、Pople ら^{4,5,6)}、Dewar ら⁷⁾、筆者ら⁸⁾によって若干積分評価を異にする手続が提唱されている*。

ここではこれらの方法のうち、Pople らの提唱した CNDO/2 とよばれる方法⁹⁾を用いて、塩化ビニル、塩化ビニリデン、メチルビニルエーテル、アクリロニトリル、イソプレン、アクリルアミド、アクリル酸、シクロペンタジエンなどのモノマー計算し、その結果を紹介することにする。

* 京都大学工学部石油化学科()

* Department of Hydrocarbon Chemistry, Faculty of Engineering, Kyoto University ()

* もっとも最近では、計算の基礎となるスレーター軌道をいくつかのガウス関数で展開して、積分計算の迅速化をはかった非経験的計算(abinitio calculation)が行なわれている。

II. CNDO/2 法⁵⁾

ここでは CNDO/2 法の概略とその特長を示そう。分子の全ハミルトニアンを $\mathfrak{H}$ とすると、 $\mathfrak{H}$ はつぎのようにかけられる。

$$\mathfrak{H} = \sum_{\mu} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mu}^2 + V(\mu) \right\} + \sum_{\mu > \nu} \frac{e^2}{r_{\mu\nu}} \dots \dots \dots [1]$$

ただし

$$V(\mu) = \sum_A V_A(\mu)$$

$V_A(\mu)$ は A 番目の原子殻による電子 μ のポテンシャルエネルギーであり、 $\frac{e^2}{r_{\mu\nu}}$ は電子 μ, ν 間の反発エネルギーをあらわしている。なおこの全ハミルトニアンでは、殻荷電間の反発エネルギーの項が除かれていることを注意しておこう。ついでであるが、Hückel 法では [1] 式の全ハミルトニアンのかわりに、近似的な全ハミルトニアンとして一電子ハミルトニアン $h(\mu)$ の和で与えら

$$\mathfrak{H} = \sum_{\mu} h(\mu) \dots \dots \dots [2]$$

れるという仮定から出発している。一電子ハミルトニアン $h(\mu)$ の中には μ 電子以外の電子との反発相互作用が implicit に考慮されているが、[1] 式のようなあらわな形で考慮されていないことも注意されたい。

さて $2n$ 個の価電子からなる閉殻分子* を考えることにして、反対称化全波動関数を Φ とかくことにすると、 Φ は行列式を用いて

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{2n}} \begin{vmatrix} \varphi_1(1)\alpha(1) & \varphi_1(1)\beta(1) & \varphi_2(1)\alpha(1) & \dots & \varphi_n(1)\beta(1) \\ \varphi_1(2)\alpha(2) & \varphi_1(2)\beta(2) & \varphi_2(2)\alpha(2) & \dots & \varphi_n(2)\beta(2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_1(2n)\alpha(2n) & \varphi_1(2n)\beta(2n) & \varphi_2(2n)\alpha(2n) & \dots & \varphi_n(2n)\beta(2n) \end{vmatrix} \dots [3]$$

とかかれる。 α, β はスピン関数、 $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ は分子軌道で規格直交化の条件

$$\int \varphi_i^*(\mu) \varphi_j(\mu) d\tau_{\mu} = \delta_{ij} \dots \dots \dots [4]$$

を満足しなければならない。いま φ_i を原子価軌道 χ_r (水素 1S, 炭素 2S, 2P_x, 2P_y, 2P_z など) の一次結合をとると次のごとくかけられる*。

$$\varphi_i = \sum_r C_{ir} \chi_r \dots \dots \dots [5]$$

いま変分法の常法にしたがって、[3] の反対称化全波動

* 原子核とそれに属するいくつかの電子をいっしょに考えたもの。この場合内殻電子は原子核の正荷電をしゃへいするはたらきをすると考えられる。

* 閉殻分子とは、それぞれの分子軌道を二つずつ電子がしめている状態をいう。

* 従来の Hückel 法では通常炭素原子の混成を考慮するので、SP³, SP², SP などの混成軌道をとることになるが、この点が異なることを注意する必要がある。

関数を用いて (1) の全ハミルトニアンの期待値 E ,

$$E = \int \Phi^* \mathfrak{H} \Phi d\tau d\sigma \dots \dots \dots [6]$$

が極小になるように、[4] の規格直交化の条件を保ったまま [5] 式の係数 $C_{i1}, C_{i2}, C_{i3}, \dots$ をいろいろ変化させると⁹⁾、その結果分子軌道の係数、軌道エネルギーは次式のような連立方程式、および永年方程式をとくことによって得られる。

すなわち連立方程式は重なり積分を無視しない場合には

$$\sum_s (F_{rs} - S_{rs} \epsilon) C_{is} = 0 \quad r=1, 2, \dots \dots \dots [7]$$

とかかれる。またこれからえられる永年方程式は

$$|F_{rs} - S_{rs} \epsilon| = 0 \dots \dots \dots [8]$$

で書わされる。この Fock の演算子を一般に書き下すと

$$F_{rs} = H_{rs} + \sum_{t,u} P_{tu} [(rs|tu) - 1/2(rt|su)]$$

$$H_{rr} = \int \chi_r(\mu) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mu}^2 + V(\mu) \right\} \chi_s(\mu) d\tau_{\mu} \dots [9]$$

$$(rs|tu) = \int \int \chi_r(\mu) \chi_s(\mu) \frac{e^2}{r_{\mu\nu}} \chi_t(\nu) \chi_u(\nu) d\tau_{\mu} d\tau_{\nu}$$

$$P_{tu} = 2 \sum_i^{\text{occ}} C_{it} C_{iu}$$

$$V(\mu) = \sum_A V_A(\mu)$$

この一般的にかかれた Fock の演算子におけるいろいろの積分をどのように評価することによって、CNDO⁴⁾, INDO⁵⁾, MINDO⁷⁾ などの計算の手続きが定まることになる。ここでは前述のように CNDO/2 法の手続きを紹介することにしよう。

(1) 永年方程式 [9] 式の重なり積分 S_{rs} を無視して $S_{rs} = \delta_{rs}$ とおく、すなわち $r=s$ ならば 1, $r \neq s$ ならば 0 となる

$$|F_{rs} - \delta_{rs} \epsilon| = 0 \dots \dots \dots [10]$$

(2) 分子軌道 φ_i の規格化条件も (1) に応じて、重なり積分を無視して

$$\int \varphi_i^*(\mu) \varphi_i(\mu) d\tau_{\mu} = \sum_r (C_{ir})^2 = 1 \dots \dots \dots [11]$$

(3) 原子積分 $(rs|tu)$ 中で $(rr|tt)$, $(rr|rr)$ だけが有限で、後はすべてゼロとする Differential Overlap を完全に無視 (Complete Neglect of Differential Overlap) の近似を採用する。すなわち

$$(rs|tu) = \delta_{rs} \delta_{tu} (rr|tt) \dots \dots \dots [12]$$

(4) さらにこのクーロン型積分 $(rr|tt)$ はつぎのように簡単化する。

$$(rr|tt) \begin{cases} r \text{ と } t \text{ が A 原子に属するとき} \\ \text{原子軌道の性質に無関係に } r_{AA} \text{ ととる} \\ r \text{ が A, } t \text{ が B 原子に属するときは, 原子軌道の性質に } r_{AB} \text{ ととる。} \end{cases}$$

なお r_{AA}, r_{AB} はそれぞれスレーター型の S 軌道 χ_{SA}, χ_{SB} を用いて

$$r_{AA} = e^2 \iint \frac{\chi_{SA}^2(1) \chi_{SA}^2(2) d\tau_1 d\tau_2}{r_{12}} \quad \dots [13]$$

$$r_{AB} = e^2 \iint \frac{\chi_{SA}^2(1) \chi_{SB}^2(2) d\tau_1 d\tau_2}{r_{12}} \quad \dots [13]$$

を用いて計算する

(5) r, s が A 原子に属するとき monoatomic differential overlap を無視し, 他の原子殻のつくるポテンシャル V_B に関する積分をつぎのようにとる*。

$$\int \chi_r(\mu) V_B(\mu) \chi_s(\mu) d\tau_\mu \\ \equiv (r|V_B|s) = -\delta_{rs} Z_B r_{AB} \quad \dots [14]$$

ただし Z_B は B 原子の価電子数である

(6) H_{rs} は r, s がともに同一の原子に属することになった原子軌道の場合はゼロ, r が A 原子, s が B 原子に属するときは, それぞれ A, B 原子の性質によって定まるパラメーター β_A^0, β_B^0 を用いて

$$H_{rs} \equiv \beta_{rs} = \frac{1}{2} S_{rs} (\beta_A^0 + \beta_B^0) \quad \dots [15]$$

とおく, β_A^0, β_B^0 の値は表 1 に示す通りであり, S_{rs} はスレーター軌道を用いて計算される重なり積分である

表 1 β_A^0 の値 (eV 単位)

原子	H	Li	Be	B	C	N	O	F	Cl
$-\beta_A^0$	9	9	13	17	21	25	31	39	22.33

(7) 以上の近似をおくと F_{rr}, F_{rs} は簡単になって, 次式のようにかけられる。

$$F_{rr} = -\frac{1}{2} (I_r + A_r) + \left\{ (P_{AA} - Z_A) - \frac{1}{2} (P_{rr} - 1) \right\} r_{AA} + \sum_{B \neq A} (P_{BB} - Z_B) r_{AB} \quad \dots [16]$$

(r が A に属するとき)

$$F_{rs} = -\frac{1}{2} P_{rs} r_{AA} \quad (r, s \text{ がともに原子 A に属するとき})$$

$$F_{rs} = -\frac{1}{2} S_{rs} (\beta_A^0 + \beta_B^0) - P_{rs} r_{AB} \quad (r \text{ が A, } s \text{ が B 原子に属するとき})$$

ただし, [16] 式は

$$U_{rr} = \int \chi_r(\mu) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta(\mu) + V_A(\mu) \right\} \chi_r(\mu) d\tau_\mu \\ = -\frac{1}{2} (I_r + A_r) - \left(Z_A - \frac{1}{2} \right) r_{AA}$$

とおくことによってえられたものであり, P_{AA}, P_{rs} は次式で与えられる。

$$P_{AA} = \sum_r^A P_{rr}$$

* この積分の評価の相異で CNDO/1 法と CNDO/2 法の区別が生じる。ここでは CNDO/2 法の積分評価を紹介してある。

$$Prs = 2 \sum_i^{\text{occ}} C_{ir} C_{is}$$

なお I_r, A_r の値は表 2 に記載した通りである。

表 2 $\frac{1}{2} (I_r + A_r)$ の値 (単位 eV)

	H	Li	Be	B	C	N	O	F	Cl
$\frac{1}{2} (I_s + A_s)^a$	7.176	3.106	5.946	9.594	14.051	19.316	25.390	32.272	21.591
$\frac{1}{2} (I_p + A_p)^a$		1.258	2.536	4.001	5.572	7.275	9.111	11.080	8.708

a) I_s, A_s, I_p, A_p は原子価 S 軌道, p 軌道のイオン化ポテンシャル, 電子親和力である

また全電子エネルギー E_e と核間反応エネルギー E_N^* から, 全エネルギー W が求められ, 次式のごとくかけられる。

$$W = E_e + E_N$$

$$E_e = \frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu} P_{\mu\nu} (H_{\mu\nu} + F_{\mu\nu}) \quad \dots [17]$$

$$E_N = \sum_{A < B} \frac{Z_A Z_B e^2}{R_{AB}}$$

この全エネルギー W は, 原子のみに関係する部分と原子間の部分にわけて

$$W = \sum_A E_A + \sum_{A < B} E_{AB}$$

$$E_A = \sum_r^A P_{rr} U_{rr} + \frac{1}{2} \sum_r^A \sum_s^A \left(P_{rr} P_{ss} - \frac{1}{2} P_{rs}^2 \right) r_{AA} \quad \dots [18]$$

$$E_{AB} = \sum_s^A \sum_r^B \left(2 P_{rs} \beta_{rs} - \frac{1}{2} P_{rs}^2 r_{AB} \right) + (Z_A Z_B e^2 / R_{AB} - P_{AA} V_{AB} - P_{BB} V_{BA} + P_{AA} P_{BB} r_{AB})$$

と与えられる。

以上 CNDO/2 法の概要を説明した。次章で計算結果の実際を示す前に SCF 法とよばれる繰返し計算の手続きを示しておこう。

(1) 分子の三次元的座標を計算する。この数値は CNDO/2 法のプログラムが完成している場合にも入力データとして必要である。

(2) 座標がきまれば重なり積分 r_{AA}, r_{AB} , などが計算される。次に出発関数として必要な分子軌道を定めるために永年方程式

$$|F_{rs} - \delta_{rs} \epsilon| = 0$$

$$\text{において} \quad F_{rr} = -\frac{1}{2} (I_r + A_r)$$

$$F_{rs} = -\frac{1}{2} S_{rs} (\beta_A^0 + \beta_B^0)$$

において, 永年方程式をととき**, 軌道エネルギー ϵ を求

* CNDO 法では核間反応エネルギーは $Z_A Z_B e^2 / R_{AB}$ 型で与えられるが, このエネルギーの表式には種々の形が採用されている。

** 電子計算機では永年方程式を対角化するのに Jacobi の方法を用いる。

め、分子軌道の係数を定める。

(3) これから軌道エネルギーの低い方から順に電子をつめて行き、被占軌道をきめる。

(4) 被占軌道がきまると、 P_{rr} , P_{rs} , P_{AA} などが計算され、(16) 式から新しい Fock の演算子 F_{rs} が定まり、永年方程式を再びといて、新しい分子軌道を求め、SCF に到達するまでのこの手続きを繰り返す。

(5) SCF になったと判断する方法にはいろいろあるが、二回の計算の軌道エネルギー ϵ の差が 10^{-4} a.u 以下になった場合をもって SCF になった判断する方法もその一つである。Pople は前後の結合次数を

$$\left[\sum_{r,s} (P_{rs} - p'_{rs})^2 \right]^{1/2} < 10^{-4}$$

SCF の判断の基準とすることを推奨している¹⁰⁾。

以上で CNDO/2 法の計算手続きの説明が終ったのでこの計算結果を示そう。

III. いくつかのビニル化合物の計算結果

計算に用いた (1) 塩化ビニル, (2) 塩化ビニリデン, (3) メチルビニルエーテル, (4) アクリロニトリル, (5) イソプレン, (6) アクリルアミド, (7) アクリル酸, (8) シクロペンタジエンの分子構造は 図 1 に示したごとくである、図中の数字は結合距離をあらわす。なお図中に計算にあたって採用した座標系が示されており、軸はいずれも分子面と直角な方向となる。これらの原子配置から CNDO/2 法の計算に必要なそれぞれの原子の三次元的な座標が計算され、電子計算機の入力データとして提供される。

前章で述べた CNDO/2 法によって計算された計算結果を示す。表には固有値ベクトルの形で分子軌道のエネルギーと係数、全エネルギー、双極子能率の値が記載されている。

図 1 ビニル化合物の分子構造

図 1 文献と決定方法

- D. Kivelson, E.B. Wilson, Jr., D.R. Lide, Jr., *J. Chem. Phys.* **32** 205 (1960) (マイクロ波)
- R.L. Livingsson, C.N.R. Rao, L.M. Kaplan, L. Rocks, *J. Am. Chem. Soc.* **80** 5368 (1958) (電子回折)
- P. Cahill, L.P. Gold, N.L. Owen, *J. Chem. Phys.*

48 1620 (1968) (仮定)

- C.C. Costain, B.P. Stoicheff, *J. Chem. Phys.* **30** 777 (1959) (マイクロ波)
- A. Almennigen, O. Bastiansen, M. Traettenberg, *Acta Chem. Scand.* **12** 1221 (1958) (マイクロ波)
- アミド類から仮定
- T. Ukaji, *Bull. Chem. Soc. Japan* **32** 1266 (1959)

VINYL CHLORIDE

**EIGEN VALUES AND VECTORS **

A0	-1.467074	-1.125192	-0.997750	-0.843079	-0.717135	-0.673050	-0.556595	-0.521966	-0.500362	0.151033
S1	0.591365	0.172208	0.300827	-0.229913	-0.056615	0.0	-0.045889	-0.001627	0.0	0.449452
X1	-0.196771	0.312093	0.191828	-0.143055	-0.507781	0.0	-0.134617	0.145517	0.0	0.289865
Y1	0.005215	0.181081	-0.418617	-0.223524	0.022668	0.0	-0.396637	-0.117595	0.0	0.443975
Z1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.632776	0.0	0.0	-0.311436	0.0
S2	0.579731	-0.350245	-0.218776	0.118554	-0.021753	0.0	0.020636	-0.061887	0.0	-0.106051
X2	0.199828	0.125889	0.231221	-0.400631	0.459514	0.0	0.087101	-0.144120	0.0	-0.065460
Y2	0.004973	0.124849	-0.360343	-0.407151	-0.268873	0.0	0.313083	0.015557	0.0	0.124616
Z2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.553189	0.0	0.0	-0.458825	0.0
S3	0.258090	0.747129	-0.286521	0.442389	0.196290	0.0	0.083967	0.001264	0.0	-0.216192
X3	-0.100082	-0.026983	0.091193	0.265745	-0.052968	0.0	0.453052	-0.773865	0.0	0.307615
Y3	-0.099075	-0.116000	-0.108669	0.183483	0.382885	0.0	0.484927	0.532990	0.0	0.497568
Z3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.541827	0.0	0.0	0.832158	0.0
S4	0.223622	-0.151385	-0.392994	-0.038200	-0.411266	0.0	0.279568	0.069094	0.0	-0.130020
S5	0.220275	-0.280710	-0.007890	0.481932	-0.001458	0.0	-0.351261	0.013660	0.0	0.253716
S6	0.224784	0.109289	0.457785	0.051666	-0.312158	0.0	0.259644	0.228570	0.0	-0.124822
A0	0.177465	0.258681	0.287323	0.398753	0.472409					
S1	0.0	0.353153	-0.154605	-0.106275	-0.331724					
X1	0.0	0.098440	-0.233051	-0.013397	0.601061					
Y1	0.0	-0.350788	0.111811	0.484999	-0.049224					
Z1	-0.708944	0.0	0.0	0.0	0.0					
S2	0.0	-0.320144	-0.507350	0.008354	0.321527					
X2	0.0	0.050433	0.321289	0.065193	0.613545					
Y2	0.0	-0.285691	0.160439	-0.628335	0.022810					
Z2	0.695314	0.0	0.0	0.0	0.0					
S3	0.0	0.017601	0.017360	-0.061372	-0.026225					
X3	0.0	-0.045523	0.005347	0.081525	-0.004035					
Y3	0.0	-0.010436	0.061607	0.100519	0.061951					
Z3	0.118050	0.0	-0.0	0.0	0.0					
S4	0.0	0.495593	0.325748	0.374537	0.100960					
S5	0.0	-0.032548	0.574238	-0.328959	0.115732					
S6	0.0	-0.553825	0.287967	0.291835	-0.133398					

**ENERGIES IN CNDO / 2, IAU A.U.=27.21 E.V.

TOTAL ENERGY = -32.365172A.U.

DIPOLE MOMENT IN CNDO/2 METHOD

TOTAL MOMENT= 2.298316 DEBYES

** * VINYLIDENE CHLORIDE * *

EIGEN VALUES AND VECTORS											
AO	-1.490107	-1.164704	-1.122831	-0.874398	-0.849416	-0.729056	-0.709500	-0.572384	-0.553937	-0.539070	
S1	0.582538	0.178245	0.000000	0.373617	0.000001	0.0	-0.150473	0.000000	0.0	-0.023497	
X1	-0.200853	0.368568	0.000000	-0.123975	0.000000	0.0	-0.460929	0.000000	0.0	-0.245995	
Y1	0.000000	0.000000	-0.391831	-0.000000	0.272447	0.0	-0.000001	-0.307040	0.0	0.000000	
Z1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.622898	0.0	0.0	0.000001	0.0	
S2	0.572124	-0.390253	-0.000000	-0.193341	-0.000000	0.0	-0.028312	0.000000	0.0	0.080084	
X2	0.196418	0.119534	0.000000	0.547209	0.000000	0.0	0.325643	-0.000000	0.0	0.216274	
Y2	-0.000000	0.000000	-0.277471	0.000001	0.556160	0.0	0.000000	0.301293	0.0	-0.000000	
Z2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.506990	0.0	0.0	0.000001	0.0	
S3	0.244794	0.512489	-0.595552	-0.331901	-0.342477	0.0	0.204555	0.051736	0.0	0.013405	
X3	-0.095790	0.018146	0.094977	-0.151337	-0.208689	0.0	-0.065421	0.560496	0.0	0.650284	
Y3	-0.095897	-0.128799	0.013303	-0.160110	-0.137286	0.0	0.509412	0.081463	0.0	-0.123719	
Z3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.421465	0.0	0.0	-0.707107	0.0	
S4	0.244794	0.512488	0.595553	-0.331902	0.342477	0.0	0.204554	-0.051736	0.0	0.013405	
X4	-0.095791	0.018147	-0.094977	-0.151337	0.208689	0.0	-0.065421	-0.560495	0.0	0.650285	
Y4	0.095896	0.128799	0.013303	0.160110	-0.137285	0.073473	-0.509412	0.081464	0.0	0.123718	
Z4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.421463	0.0	0.0	0.707107	0.0	
S5	0.221145	-0.230948	-0.144426	-0.308893	0.358525	0.0	-0.152988	0.289838	0.0	-0.067213	
S6	0.221145	-0.230948	0.144425	-0.308892	-0.358525	0.0	-0.152989	-0.289838	0.0	-0.067213	
AO	-0.511364	-0.501224	0.098654	0.159407	0.162658	0.273473	0.376071	0.452983			
S1	0.000000	0.0	0.579358	-0.000001	0.0	0.010249	-0.000000	-0.361017			
X1	-0.000000	0.0	0.405427	0.000001	0.0	-0.175541	0.000000	0.583345			
Y1	-0.274409	0.0	-0.000000	-0.663587	0.0	0.000000	0.402889	0.000001			
Z1	0.0	-0.325213	0.0	0.0	-0.711502	0.0	0.0	0.0			
S2	0.000001	0.0	-0.124411	0.000001	0.0	-0.508053	0.000000	0.320368			
X2	0.000000	0.0	-0.109869	0.000001	0.0	0.304080	0.000000	0.624772			
Y2	0.099947	0.0	-0.000000	-0.205161	0.0	-0.000000	-0.686176	0.000001			
Z2	0.0	-0.525232	0.0	0.0	0.683664	0.0	0.0	0.0			
S3	0.010171	0.0	-0.155244	0.148348	0.0	0.015240	-0.056916	-0.030289			
X3	-0.255642	0.0	-0.201007	-0.249327	0.0	0.015240	-0.056916	-0.030289			
Y3	0.613872	0.0	0.408923	-0.296720	0.0	-0.003411	0.075865	0.005194			
Z3	0.0	0.556042	0.0	0.0	0.114823	-0.045989	0.097250	0.066630			
S4	-0.010171	0.0	-0.155245	-0.148349	0.0	0.015240	0.056916	-0.030289			
X4	0.255643	0.0	0.201007	0.249327	0.0	-0.003411	-0.075865	0.005193			
Y4	0.613873	0.0	-0.408923	-0.296719	0.0	0.045989	0.097250	-0.066629			
Z4	0.0	0.556044	0.0	0.0	0.114823	0.0	0.0	0.0			
S5	-0.122717	0.0	0.067005	0.294223	0.0	0.507065	0.406164	0.113204			
S6	-0.122716	0.0	0.067004	-0.294221	0.0	0.507066	-0.406164	0.113205			

**ENERGIES IN CNDO/2, 1A.U. = 27.21E.V.
TOTAL ENERGY = -47.663085 A. U.
DIPOLE MOMENT IN CNDO/2 METHOD
TOTAL MOMENT = 2.304917 DEBYES

** METHYL VINYL ETHER **

EIGN VALUES AND VECTORS

A0	-1. 754294	-1. 345999	-1. 212572	-0. 991647	-0. 925890	-0. 882442	-0. 789833	-0. 694305	-0. 658660	-0. 604387
S1	0. 426507	0. 400197	-0. 215829	0. 207817	0. 228791	-0. 000000	0. 104165	-0. 113629	-0. 000000	-0. 007217
X1	0. 037748	-0. 301232	-0. 281383	0. 172068	0. 115334	0. 000000	-0. 372860	0. 100954	-0. 000000	-0. 042721
Y1	-0. 211411	0. 174093	-0. 000882	0. 431766	-0. 127379	-0. 000000	0. 045622	0. 134856	-0. 000000	0. 351036
Z1	-0. 000000	0. 000000	0. 000000	0. 000000	0. 000000	0. 347713	0. 000000	0. 000000	-0. 441865	-0. 000000
S2	0. 228945	0. 569392	0. 180382	-0. 144497	-0. 260378	0. 000000	-0. 134181	-0. 060013	0. 000000	-0. 015329
X2	0. 129147	0. 136603	-0. 072637	0. 122136	0. 256780	-0. 000000	0. 491331	-0. 152334	0. 000000	0. 057564
Y2	-0. 077364	0. 079571	-0. 062503	0. 334912	-0. 205062	-0. 000000	0. 092363	0. 374708	-0. 000000	-0. 378138
Z2	0. 000000	0. 000000	0. 000000	-0. 000000	-0. 000000	0. 205755	0. 000000	-0. 000000	-0. 342592	-0. 000000
S3	0. 340814	-0. 216560	0. 539433	0. 228190	0. 086319	0. 000000	0. 004795	0. 057935	-0. 000000	-0. 010121
X3	0. 031221	-0. 111094	-0. 071382	0. 121783	-0. 388077	0. 000000	0. 222795	-0. 407715	-0. 000000	0. 143017
Y3	0. 193416	-0. 035322	-0. 127926	-0. 294547	-0. 103145	-0. 000000	0. 292374	0. 352727	-0. 000000	0. 152781
Z3	0. 000000	-0. 000000	0. 000000	0. 000000	-0. 000000	0. 508599	0. 000000	0. 000000	0. 477834	0. 000000
S4	0. 673871	-0. 331639	-0. 301288	-0. 042298	-0. 291823	0. 000000	-0. 060609	0. 064804	0. 000000	0. 042629
X4	-0. 116518	-0. 093782	-0. 099208	0. 243777	-0. 360767	0. 000000	-0. 239158	-0. 097887	0. 000000	0. 445763
Y4	0. 019394	0. 120743	-0. 315928	0. 030284	0. 348150	0. 000000	-0. 437462	-0. 174589	0. 000000	-0. 293717
Z4	-0. 000000	0. 000000	-0. 000000	0. 000000	-0. 000000	0. 624220	0. 000000	-0. 000000	-0. 406971	-0. 000000
S5	0. 118502	0. 196177	-0. 184388	0. 413584	0. 101091	0. 000000	-0. 044727	0. 071989	0. 000000	0. 293755
S6	0. 045228	0. 273059	0. 079718	0. 067049	-0. 351599	-0. 000000	-0. 204291	0. 309751	0. 000000	-0. 374756
S7	0. 112230	0. 199107	0. 160438	-0. 299633	-0. 090775	-0. 000000	-0. 339053	-0. 219145	0. 000000	0. 314292
S8	0. 096844	-0. 127832	0. 282776	0. 312873	-0. 096820	-0. 000000	-0. 027497	-0. 466759	0. 000000	-0. 239706
S9	0. 134604	-0. 057947	0. 294608	0. 083098	0. 206971	0. 306950	-0. 128971	0. 207622	0. 383037	0. 085725
S10	0. 134604	-0. 057947	0. 294608	0. 083098	0. 206971	-0. 306950	-0. 128972	0. 207621	-0. 383037	0. 085725
AO	-0. 563380	-0. 479565	0. 205570	0. 251292	0. 283987	0. 298902	0. 311011	0. 311167	0. 321952	0. 375126
S1	-0. 031857	0. 000000	0. 000001	-0. 373628	0. 319324	-0. 007505	-0. 000002	0. 001794	-0. 047869	-0. 402567
X1	-0. 355096	0. 000000	0. 000000	-0. 207623	0. 090968	0. 093406	-0. 000000	-0. 102651	0. 137648	-0. 091117
Y1	-0. 127774	0. 000000	-0. 000000	-0. 040526	0. 167422	-0. 233800	0. 000015	-0. 317324	0. 004278	-0. 017755
Z1	-0. 000000	0. 393301	0. 725009	0. 000002	0. 000000	0. 000000	0. 059392	0. 000003	0. 000003	0. 000000
S2	0. 063358	-0. 000000	-0. 000001	0. 110701	-0. 270007	0. 303479	0. 000009	-0. 382390	0. 244635	-0. 007286
X2	0. 334070	0. 000000	0. 000000	0. 015870	0. 017064	-0. 139662	-0. 000005	0. 197002	-0. 116511	0. 289227
Y2	0. 117853	0. 000000	-0. 000000	-0. 007588	0. 105892	-0. 221411	0. 000020	-0. 361301	-0. 069193	0. 327319
Z2	-0. 000000	0. 642342	-0. 653003	0. 000001	0. 000000	-0. 000000	-0. 035758	-0. 000001	-0. 000002	-0. 000000
S3	-0. 071539	-0. 000000	0. 000001	0. 477987	-0. 464128	0. 134165	0. 000003	-0. 15502	-0. 041024	0. 092763
X3	-0. 249930	-0. 000000	0. 000001	-0. 227440	0. 164704	0. 501177	0. 000012	-0. 039955	-0. 302996	0. 284722
Y3	-0. 228400	-0. 000000	-0. 000001	-0. 172849	0. 133581	0. 033077	-0. 000028	0. 143952	0. 575365	0. 381213
Z3	-0. 000000	0. 077614	-0. 052972	0. 000000	0. 000001	0. 000001	0. 710051	0. 000033	0. 000026	-0. 000000
S3	0. 194215	0. 000000	-0. 000000	0. 297734	-0. 024520	-0. 165248	-0. 000013	-0. 144296	-0. 177715	-0. 066582
X4	0. 536696	0. 000000	0. 000000	-0. 261002	-0. 118225	0. 112565	0. 000018	0. 211870	0. 216340	0. 034735
Y4	0. 208742	0. 000000	-0. 000000	-0. 118721	-0. 116067	0. 008950	-0. 000002	-0. 033546	0. 108911	0. 463088
Z4	0. 000000	-0. 625337	-0. 198373	-0. 000000	0. 000000	-0. 000000	-0. 119690	-0. 000006	-0. 000005	-0. 000000

S5	-0.377537	-0.000000	-0.000001	0.395373	-0.358403	0.144785	-0.000010	0.289102	0.080518	0.190221
S6	-0.010770	-0.000000	0.000000	-0.067173	0.085655	-0.061505	-0.000024	0.622431	-0.138118	-0.091995
S7	-0.226158	-0.000000	0.000001	-0.082481	0.279947	-0.430615	0.000010	0.011355	-0.280259	0.338926
S8	-0.097385	-0.000000	-0.000001	0.338679	0.224706	-0.228900	-0.000024	0.111059	0.520386	0.009783
S9	0.131707	0.133494	0.053809	0.141086	0.344873	0.318612	-0.488207	-0.012007	-0.066524	0.109040
S10	0.131707	-0.133495	-0.053810	0.141086	0.3444874	0.318614	0.488211	-0.011961	-0.066489	0.109040
AO	0.466953	0.517534								
S1	0.263654	-0.124497								
X1	-0.200868	0.608627								
Y1	-0.544878	-0.283327								
Z1	-0.000000	-0.000000								
S2	-0.147058	0.267024								
X2	-0.322610	0.488712								
Y2	0.441623	0.161112								
Z2	0.000000	-0.000000								
X3	-0.024330	-0.069509								
Y3	-0.061157	-0.097701								
Z3	-0.018019	-0.126267								
Z3	0.000000	0.000000								
X4	-0.149611	-0.122499								
X4	0.208113	0.085706								
Y4	-0.188484	-0.347566								
Z4	-0.000000	0.000000								
S5	0.248791	-0.024563								
S6	-0.282806	0.010532								
S7	0.154391	0.149992								
S8	0.020886	-0.004887								
S9	-0.015583	-0.022263								
S10	-0.015583	-0.022263								
**ENERGIES IN CNDO /2.1 A.U. = 27.21 EV **										
TOTAL ENERGY = -44.186275 A.U.										
DIPOLE MOMENT IN CNDO /2 METHOD										
TOTAL MOMENT = 1.012757 DEBYES										

****ACRYLONITRILE****

EIGEN VALUES AND VECTORS

AO	-1.567591	-1.416765	-1.108893	-0.998147	-0.796780	-0.777323	-0.691869	-0.600448	-0.575584	-0.527280
S1	0.573194	0.227089	0.278589	-0.137477	-0.120735	0.0	-0.074081	0.008478	0.007025	0.0
X1	-0.078925	0.174631	0.408362	-0.088842	0.424292	0.0	-0.105313	0.280272	0.162862	0.0
Y1	-0.106994	-0.087773	-0.099601	-0.533207	-0.044074	0.0	-0.083124	-0.190372	0.360423	0.0
Z1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.523289	0.0	0.0	0.0	-0.475585
S2	0.440341	-0.318489	-0.457327	0.017707	0.121922	0.0	-0.013802	-0.063986	-0.049196	0.0
X2	0.192319	-0.088334	0.201533	-0.049661	-0.574452	0.0	0.044552	-0.257475	-0.155144	0.0
Y2	-0.044429	-0.035117	-0.062009	-0.480274	-0.014493	0.0	0.349918	0.248569	-0.236461	0.0
Z2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.373523	0.0	0.0	0.0	-0.594957
S3	0.477443	0.389753	0.221603	0.134819	0.169306	0.0	0.241359	0.052684	-0.065283	0.0
X3	-0.083481	0.236685	-0.078275	-0.283399	0.231263	0.0	-0.103751	-0.462482	-0.172525	0.0
Y3	0.054424	-0.307807	0.367560	0.020334	0.244950	0.0	-0.217378	0.074788	-0.355604	0.0
Z3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.597755	0.0	0.0	0.0	0.352585
S4	0.268331	0.646166	-0.258639	-0.165357	-0.186881	0.0	-0.396740	0.196475	-0.101603	0.0
X4	-0.087290	-0.092415	0.027383	-0.150011	0.121643	0.0	-0.489714	-0.157438	-0.518381	0.0
Y4	0.109444	0.169397	0.082170	-0.020802	0.296321	0.0	0.392699	-0.588622	-0.062433	0.0
Z4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.478892	0.0	0.0	0.0	0.543627
S5	0.201436	-0.098478	0.222694	-0.395535	0.069554	0.0	-0.172211	-0.015178	0.443204	0.0
S6	0.139093	-0.142713	-0.328013	-0.242348	0.287856	0.0	0.252591	0.316804	-0.195057	0.0
S7	0.177500	-0.110703	-0.264922	0.296760	0.301682	0.0	-0.301212	-0.142269	0.288480	0.0
AO	0.122761	0.215258	0.282551	0.303979	0.315980	0.316411	0.414434	0.477670	-0.590630	0.0
S1	0.0	0.185596	0.308561	0.067904	0.0	0.511559	0.007656	-0.293541	-0.144905	0.0
X1	0.0	0.144103	-0.011216	0.081135	0.0	0.234302	0.030667	0.605557	-0.220620	0.0
Y1	0.0	0.224220	0.103951	-0.281215	0.0	-0.002992	-0.539914	0.090935	0.207718	0.0
Z1	-0.530900	0.0	0.0	0.0	-0.467047	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
S2	0.0	0.097029	-0.581626	-0.092550	0.0	0.134296	0.009427	0.308514	-0.063715	0.0
X2	0.0	0.034800	0.171270	0.126477	0.0	-0.339195	0.044434	0.562504	-0.099028	0.0
Y2	0.0	0.142501	0.076960	-0.490155	0.0	-0.097070	0.489110	-0.036676	-0.073853	0.0
Z2	0.653812	0.0	0.0	0.0	0.281137	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
S3	0.0	0.000510	-0.097552	-0.309101	0.0	-0.389331	-0.399423	-0.140384	-0.151709	0.0
X3	0.0	0.450157	-0.098086	0.357415	0.0	-0.150675	0.092349	-0.187403	-0.365308	0.0
Y3	0.0	0.286689	-0.118538	0.074478	0.0	-0.268651	0.043885	-0.053202	0.590558	0.0
Z3	-0.301741	0.0	0.0	0.0	0.653701	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
S4	0.0	0.002301	0.022231	0.071289	0.0	0.100611	0.152015	0.079359	0.360143	0.0
X4	0.0	-0.459258	0.084622	-0.306705	0.0	0.074013	-0.182398	0.027483	-0.246606	0.0
Y4	0.0	-0.285390	0.109354	-0.030676	0.0	0.271854	0.166086	0.150973	0.375660	0.0
Z4	0.446798	0.0	0.0	0.0	-0.524885	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
S5	0.0	-0.480609	-0.245927	0.172488	0.0	-0.307382	0.273551	-0.145383	-0.029376	0.0
S6	0.0	-0.198183	0.377213	0.481261	0.0	-0.154358	-0.244906	0.108612	0.10297	0.0
S7	0.0	0.126948	0.514531	-0.246726	0.0	-0.294315	0.278277	0.074108	-0.038793	0.0

ENERGIES IN CNDO/2, 1A.U.=27.21E.V.

TOTAL ENERGY = -34.849040A.U.

DIPOLE MOMENT IN CNDO/2 METHOD

TOTAL MOMENT = 2.971697 DEBYES

ISOPRENE

EIGEN VALUES AND VECTORS

A0	-1.580127	-1.404697	-1.257731	-1.020665	-0.965465	-0.881922	-0.822674	-0.794141	-0.719805	-0.645742
S1	0.384466	-0.264057	-0.437827	-0.217567	0.048487	-0.208785	-0.000000	0.101985	-0.057078	0.028018
X1	0.177381	-0.068587	-0.027915	0.162174	0.038454	0.377576	0.000000	-0.363571	-0.160872	0.048172
Y1	0.029489	-0.080204	0.140907	-0.261514	-0.030900	0.311172	0.000000	0.316605	-0.060495	-0.256217
Z1	0.000000	-0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	-0.000000	0.285168	-0.000000	0.000000	0.000000
S2	0.544122	-0.158437	-0.093078	0.234044	0.141637	0.263056	0.000000	-0.136160	-0.108918	0.062169
X2	-0.038939	0.174043	0.32403	0.208226	0.058566	-0.026870	-0.000000	0.198469	-0.231809	-0.011831
Y2	0.065601	-0.171062	0.250436	-0.286455	-0.058199	0.236676	0.000000	0.118752	-0.139512	0.021776
Z2	-0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	-0.000000	0.436220	-0.000000	0.000000	0.000000
S3	0.324807	0.469186	-0.149519	0.246476	-0.257837	0.030591	-0.000000	0.167493	-0.083302	-0.097265
X3	0.033050	0.238523	0.124677	-0.251789	0.146441	0.041638	-0.000000	0.240217	0.094638	0.457454
Y3	0.090079	-0.053750	0.042569	0.220773	0.428232	-0.045599	-0.000000	0.071226	0.106856	0.157796
Z3	0.000000	-0.000000	0.000000	-0.000000	0.000000	-0.000000	0.169019	-0.000000	0.000000	0.000001
S4	0.246043	0.551555	0.033632	-0.325938	0.199791	-0.017578	0.000000	-0.102365	0.037928	0.030308
X4	-0.103577	-0.163899	0.044286	-0.207662	0.218190	-0.070332	-0.000000	-0.434929	-0.140877	-0.368308
Y4	0.047575	-0.022248	0.061065	0.199075	0.382874	-0.092263	-0.000000	0.224160	0.271936	-0.312442
Z4	0.000000	0.000000	-0.000000	0.000000	0.000000	-0.000000	0.119846	-0.000000	0.000000	0.000000
S5	0.404633	-0.183279	0.500928	-0.002298	-0.163342	-0.158063	-0.000000	-0.051498	0.012127	0.030508
X5	-0.084936	0.105054	0.088381	0.153128	0.016302	0.373413	-0.000000	-0.026984	-0.291904	-0.041003
Y5	-0.120615	-0.009199	0.004236	-0.148188	-0.198724	-0.259446	-0.000000	-0.096889	0.529387	-0.023330
Z5	-0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	-0.000000	-0.000000	0.613799	0.000000	-0.000000	0.000000
S6	0.150361	-0.145010	-0.137765	-0.312215	-0.008103	-0.060567	-0.000000	0.413419	-0.126638	-0.214366
S7	0.125256	-0.071027	-0.275219	-0.191549	-0.422197	-0.442067	-0.000000	-0.016056	-0.062284	0.193630
S8	0.108659	0.187988	-0.130507	0.099934	-0.432326	0.024262	-0.000000	0.034315	-0.060267	-0.421232
S9	0.118095	0.209684	0.073691	-0.122059	0.398772	-0.103197	0.000000	-0.076368	0.139636	-0.413767
S10	0.069753	0.229796	-0.000438	-0.346966	-0.035981	0.022693	0.000000	-0.382458	-0.237328	0.115237
S11	0.159948	-0.123203	0.197774	-0.147757	-0.192171	-0.052652	-0.000000	0.055838	0.516642	-0.015360
S12	0.157701	-0.049582	0.268521	0.052577	-0.078213	-0.252205	-0.392882	-0.045180	-0.117680	-0.008879
S13	0.157701	-0.049582	0.268521	0.052577	-0.078213	-0.252205	-0.392882	-0.045180	-0.117680	-0.008879
A0	-0.610452	-0.586829	-0.503620	-0.495881	0.159296	0.188986	0.224809	0.283465	0.288822	0.292620
S1	0.000000	-0.084364	0.000000	0.051425	-0.000000	-0.053107	-0.000001	-0.031069	0.122514	-0.531488
X1	-0.000000	-0.345298	0.000000	0.146466	-0.000000	-0.030054	-0.000000	0.060632	-0.027887	0.165629
Y1	0.000000	-0.252776	-0.000000	-0.211170	-0.000000	0.110266	-0.000000	0.052570	0.154311	0.078813
Z1	0.234244	-0.000000	-0.621981	0.000001	-0.553023	0.000002	-0.366186	-0.000001	-0.000000	0.000000
S2	-0.000000	0.044822	-0.000000	-0.111904	0.000000	0.411696	0.000002	0.031163	0.018410	0.185575
X2	0.000000	0.412308	0.000000	-0.245743	0.000000	0.248348	0.000000	0.005927	0.056325	-0.071295
Y2	-0.000000	0.171937	0.000001	0.404273	-0.000000	-0.339305	-0.000001	-0.051710	0.168263	0.072216
Z2	0.239962	0.000000	-0.485487	0.000001	0.478075	-0.000002	0.421144	0.000001	0.000000	-0.000000
S3	0.000000	0.005842	-0.000000	-0.132584	-0.000000	-0.450731	-0.000002	0.273629	0.007002	0.048577
X3	-0.000000	-0.140704	0.000000	0.235004	-0.000000	0.268287	0.000001	-0.039529	0.048091	-0.052804
Y3	0.000000	-0.011364	-0.000001	-0.420845	-0.000000	-0.320540	-0.000001	-0.316299	0.101345	-0.057362
Z3	0.612983	0.000000	0.304222	-0.000000	0.414068	0.000002	0.567849	-0.000001	-0.000000	0.000001
S4	-0.000000	-0.022572	0.000000	0.031996	0.000000	0.080402	0.000001	-0.395805	0.171636	0.091495
X4	-0.000000	0.135874	-0.000000	-0.127064	-0.000000	-0.045097	0.000000	-0.138103	0.069813	0.054972
Y4	0.000000	0.001417	0.000000	0.224102	0.000000	-0.110242	-0.000000	-0.285559	0.109728	-0.057058

Z4	0.579541	0.000000	-0.391210	-0.000000	-0.487058	-0.000001	0.506484	0.000001	0.000000	-0.000000	-0.000000
S5	-0.000000	0.080717	0.000000	0.041775	0.000000	0.126290	-0.000001	0.009673	-0.000000	0.572155	-0.254999
X5	0.000000	-0.468929	0.000000	0.10021	0.000000	0.182391	0.000000	0.074323	0.000000	0.835797	-0.205205
Y5	-0.000000	-0.181313	-0.000000	-0.194036	0.000000	0.000000	0.021474	0.000000	-0.081005	-0.207331	0.147029
Z5	-0.273287	0.000000	0.198781	-0.000000	0.095989	0.000000	0.179849	0.000000	-0.000000	-0.000000	-0.000000
S6	0.000000	-0.108939	-0.000001	-0.294605	0.000000	0.176514	0.000001	0.068064	-0.000000	0.225807	0.336032
S7	-0.000000	0.352263	0.000000	0.194632	0.000000	0.102207	0.000000	0.022055	-0.045899	0.472300	-0.107335
S8	0.000000	0.099911	0.000000	0.182551	0.000000	0.213913	0.000001	0.460237	0.111617	-0.173355	0.205205
S9	0.000000	0.044528	0.000000	0.215483	-0.000000	0.081175	-0.000001	0.558508	0.033476	-0.024445	-0.129316
S10	-0.000000	0.051746	-0.000001	-0.310133	-0.000000	-0.185867	-0.000001	0.064777	0.231478	-0.129316	-0.129316
S11	-0.000000	0.226905	-0.000000	-0.184610	0.000000	0.233927	0.000000	0.097427	0.476824	-0.100116	0.236908
S12	-0.224995	-0.232243	0.000000	0.041620	-0.154465	-0.056183	-0.196497	-0.045063	0.268461	0.236908	-0.236908
S13	0.224996	-0.232243	-0.214864	0.041621	-0.154465	-0.056183	-0.196497	-0.045063	0.268461	0.236908	-0.236908
AO	0.305665	0.323598	0.340956	0.346021	0.413055	0.455065	0.490974	0.507525	0.507525	0.507525	0.507525
S1	0.160804	0.211802	0.036136	0.000000	0.032930	0.015079	0.160432	0.269950	0.269950	0.269950	0.269950
X1	-0.087238	-0.283077	-0.098126	-0.000000	0.131936	0.028113	0.323466	0.492385	0.492385	0.492385	0.492385
Y1	-0.024690	-0.014544	0.481866	0.000000	0.257957	0.423016	0.039978	-0.059943	-0.059943	-0.059943	-0.059943
Z1	-0.000000	-0.000000	-0.000000	0.192415	-0.000000	-0.000000	-0.000000	-0.000000	-0.000000	-0.000000	-0.000000
S2	0.061236	0.178886	0.291717	-0.000000	-0.251616	-0.103723	-0.161309	-0.226165	-0.226165	-0.226165	-0.226165
X2	0.016634	0.119872	0.132236	0.000000	-0.027892	0.009401	0.300623	0.541478	0.541478	0.541478	0.541478
Y2	-0.006846	-0.055043	-0.199379	0.000000	-0.180324	-0.525171	-0.114600	0.140836	0.140836	0.140836	0.140836
Z2	0.000000	0.000001	0.000001	-0.332438	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
S3	0.169704	-0.049630	0.062759	0.000001	-0.174085	-0.109230	0.279871	-0.159912	-0.159912	-0.159912	-0.159912
X3	-0.210578	0.051987	-0.020614	-0.000000	0.196664	0.064198	0.511852	-0.310374	-0.310374	-0.310374	-0.310374
Y3	-0.170109	-0.050983	-0.031271	0.000000	0.383022	-0.053573	-0.057709	-0.091706	-0.091706	-0.091706	-0.091706
Z3	-0.000000	-0.000000	0.000000	0.096067	0.000000	-0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
S4	0.403699	-0.068220	0.023644	-0.000000	0.023217	0.050904	-0.275703	0.158148	0.158148	0.158148	0.158148
X4	0.264369	-0.036252	0.072159	0.000000	0.097630	-0.111160	0.528589	-0.280705	-0.280705	-0.280705	-0.280705
Y4	-0.211999	0.097644	-0.074948	-0.000000	-0.525354	0.283798	0.020498	0.026275	0.026275	0.026275	0.026275
Z4	0.000000	0.000000	0.000000	-0.054529	-0.000000	0.000000	-0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
S5	-0.139997	-0.131606	-0.011549	-0.000000	0.087422	0.158610	-0.000435	-0.099051	-0.099051	-0.099051	-0.099051
X5	-0.000484	-0.477418	0.344982	-0.000001	-0.121360	-0.219036	-0.072039	0.003235	0.003235	0.003235	0.003235
S6	-0.195401	0.340743	0.376182	0.000001	-0.174745	-0.234147	0.041735	0.203350	0.203350	0.203350	0.203350
Z5	0.000000	0.000001	-0.000000	0.683734	-0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
S6	-0.120924	-0.239288	-0.041522	-0.000001	-0.113237	-0.213987	0.040932	0.107288	0.107288	0.107288	0.107288
S7	-0.160477	-0.259217	0.285976	-0.000000	0.186724	0.219410	0.084817	0.050867	0.050867	0.050867	0.050867
S8	-0.333403	0.008560	-0.057824	-0.000000	0.277059	-0.166561	0.056632	-0.095035	-0.095035	-0.095035	-0.095035
S9	-0.192680	0.143021	0.010230	0.000000	-0.322424	-0.120420	-0.102760	0.031043	0.031043	0.031043	0.031043
S10	-0.527204	-0.021536	-0.099365	0.000000	-0.267281	0.162909	-0.083949	0.055147	0.055147	0.055147	0.055147
S11	0.202097	-0.385988	-0.074592	-0.000001	0.111943	-0.090929	-0.040032	-0.061028	-0.061028	-0.061028	-0.061028
S12	0.091472	0.270613	-0.193987	-0.431722	0.031628	0.048981	0.019975	0.005454	0.005454	0.005454	0.005454
S13	0.091472	0.270611	-0.193987	0.431723	0.031628	0.048981	0.019975	0.005454	0.005454	0.005454	0.005454
***BOND-ORDER AND CHARGE-DENSITY MATRIX**											
TOTAL ENERGIES IN CNDO/2, 1 A.U.=27.21E.V.**											
TOTAL ENERGY = -41.268414 A.U.											
DIPOLE MOMENT IN CNDO/2 METHOD											
DIPOLE MOMENT= 0.306449 DEBYES											

ACRYLAMIDE

EIGEN VALUES AND VECTORS

A0	-1.763623	-1.497692	-1.420160	-1.108886	-0.987575	-0.905248	-0.820738	-0.793092	-0.728531	-0.627642
S1	0.314419	-0.357018	-0.384177	0.162381	-0.266125	-0.024723	0.022721	0.092815	-0.116848	0.069917
X1	0.009021	0.229250	-0.029487	0.322405	-0.145330	0.044327	0.034520	-0.370239	0.172406	0.308784
Y1	-0.142424	0.028689	-0.060299	-0.267674	-0.418496	-0.004092	-0.026685	0.039263	0.088305	0.306329
Z1	0.004172	-0.002428	0.008357	0.000739	-0.012715	0.228957	-0.224139	0.017869	-0.094490	0.005029
S2	0.190167	-0.432799	-0.245253	-0.445387	0.187047	0.003092	-0.014066	-0.095414	-0.040392	-0.047211
X2	0.098739	-0.144444	-0.109134	0.158248	-0.211151	-0.055879	0.001414	0.488275	-0.247290	0.245515
Y2	-0.062180	0.034497	-0.053387	-0.190470	-0.368587	-0.056093	-0.138411	-0.010503	0.382355	-0.325245
Z2	0.002467	-0.001457	0.004764	0.000370	-0.007634	0.141167	-0.146305	0.012324	0.069060	0.004092
S3	0.555381	0.100293	-0.078290	0.245088	0.086706	-0.153337	-0.212708	-0.140598	0.077345	-0.087103
X3	-0.010446	0.403654	-0.203980	-0.222001	-0.075558	0.026777	-0.039797	-0.171372	-0.162181	-0.057718
Y3	0.082784	-0.082190	0.365576	0.282870	-0.004259	0.180056	0.220108	-0.208218	-0.076424	-0.158986
Z3	0.012462	-0.006987	0.023744	0.001621	-0.025425	0.412917	-0.339506	0.024814	-0.102027	0.002859
S4	0.481791	-0.072762	0.521009	-0.049797	-0.167047	0.020597	0.263666	-0.042462	0.113231	-0.011837
X4	0.087923	0.140664	0.033027	-0.121487	-0.070172	-0.299424	-0.355506	-0.027356	-0.327815	0.011839
Y4	0.129540	-0.072507	-0.020654	0.192834	0.254467	-0.174580	-0.349365	0.203536	0.421144	0.140996
Z4	0.029082	-0.012441	0.043596	-0.001517	-0.033986	0.484280	-0.285714	0.017538	-0.024317	-0.004386
S5	0.377675	0.560017	-0.356956	-0.238791	0.154174	0.181516	-0.228455	0.313501	0.103852	0.039306
X5	-0.138639	-0.089927	0.038928	-0.085581	0.048291	0.153708	0.295276	0.397641	0.141114	0.170827
Y5	-0.025931	-0.026911	-0.140327	0.174593	-0.008143	0.160783	0.238978	-0.257753	0.038555	-0.374178
Z5	0.005405	-0.000650	0.008193	-0.000098	-0.014242	0.248011	-0.245126	0.014801	-0.091730	0.005285
S6	0.088818	-0.098437	-0.214003	0.043719	-0.422078	0.000284	0.013703	-0.037060	0.058296	0.462110
X6	0.040117	-0.151337	-0.113693	-0.373851	-0.036883	-0.013777	-0.102322	-0.256466	0.366231	-0.208260
Y6	0.096673	-0.187381	-0.051561	-0.175768	0.380490	0.068302	0.096339	-0.237720	-0.184366	0.383580
Z6	0.199447	-0.077803	0.226339	0.011113	-0.066736	0.430424	0.072514	-0.009556	0.141633	-0.013124
S7	0.191686	0.057479	0.231379	-0.164403	-0.222563	-0.048395	0.121132	-0.136336	-0.383669	-0.078883
X7	0.613953	-0.560565	-0.493906	-0.485177	0.097985	0.239387	0.259491	0.277838	0.290057	0.325574
Y7	0.007432	-0.040411	-0.006505	-0.117506	0.001194	0.031316	0.422825	-0.212027	-0.085646	0.323323
Z7	0.123109	-0.157305	-0.018570	-0.172493	0.002413	0.13408	0.090689	-0.233052	0.009588	0.146528
S8	-0.070329	0.128776	0.011200	0.314329	-0.002955	0.012509	0.169179	-0.070373	0.324473	-0.016206
X8	0.475681	0.313784	-0.260742	-0.021967	-0.425958	-0.495223	0.043429	-0.049540	-0.027784	-0.110171
Y8	-0.017141	0.020879	0.002090	0.022822	-0.002224	-0.004385	-0.432291	-0.411816	0.121746	0.058314
Z8	0.120055	0.135836	0.016110	0.082518	-0.002155	0.001944	0.114812	0.245839	0.050463	-0.154822
S9	0.065910	-0.035981	0.001268	-0.120879	-0.000918	0.016263	0.153703	-0.086082	0.428091	-0.228001
X9	0.437200	0.337216	-0.356404	-0.030541	0.597025	0.379154	-0.030876	0.030876	0.017380	0.060645
S10	0.475681	0.313784	-0.260742	-0.021967	-0.425958	-0.495223	0.043429	-0.049540	-0.027784	-0.110171
X10	-0.017141	0.020879	0.002090	0.022822	-0.002224	-0.004385	-0.432291	-0.411816	0.121746	0.058314
Y10	0.120055	0.135836	0.016110	0.082518	-0.002155	0.001944	0.114812	0.245839	0.050463	-0.154822
Z10	0.065910	-0.035981	0.001268	-0.120879	-0.000918	0.016263	0.153703	-0.086082	0.428091	-0.228001
S11	0.437200	0.337216	-0.356404	-0.030541	0.597025	0.379154	-0.030876	0.030876	0.017380	0.060645
S12	-0.006979	-0.008049	-0.007817	-0.051159	-0.000001	-0.033317	-0.133855	0.106298	0.275700	0.366048
X11	-0.219984	0.295275	0.043056	0.085806	-0.008187	0.014710	0.085226	-0.106299	-0.106299	0.076188
Y11	0.043088	-0.042407	0.016642	-0.270138	-0.008081	0.027532	-0.050461	0.004090	0.130532	-0.134333
Z11	0.127568	-0.081473	0.289319	0.026341	-0.049365	0.432238	0.047441	0.063881	0.039296	0.190962
S12	0.119201	0.134942	0.133859	0.088111	-0.097267	0.251509	0.095579	-0.216414	-0.199329	-0.167675

X4	0.109313	-0.469791	-0.201202	0.124175	0.077255	-0.117481	0.126085	-0.244821	-0.238274	-0.112595
Y4	0.006594	-0.016899	-0.029018	0.267570	0.012451	-0.031566	-0.001469	0.151739	0.373004	
Z4	-0.397680	-0.288179	-0.343158	-0.01973	0.055902	-0.195925	-0.002787	-0.015400	-0.207633	
S5	0.087105	-0.069429	0.003862	-0.002650	-0.002792	0.012377	-0.004769	0.030334	-0.034527	0.067136
X5	0.314644	-0.428487	-0.078046	-0.075960	0.016818	-0.029540	0.010175	-0.064871	0.068959	-0.149324
Y5	0.176066	-0.180765	-0.067021	0.752858	0.014352	-0.020404	0.011219	0.011327	-0.026250	0.037012
Z5	0.166894	-0.076234	0.707271	0.032790	0.447869	-0.27914	0.029132	-0.038136	-0.020821	-0.103472
S6	0.010202	-0.001419	-0.006313	0.142822	0.002588	-0.043073	-0.467002	0.301892	-0.246216	-0.190681
S7	0.108111	-0.116642	-0.006747	-0.184321	0.003131	-0.011332	0.193793	0.436102	-0.434128	0.061074
S8	-0.021104	0.025812	-0.001186	0.125845	-0.004024	0.027230	0.470381	0.273866	0.228684	-0.266790
S9	-0.314902	0.065107	-0.165481	-0.026662	0.199797	-0.464591	0.032854	-0.024694	0.001259	0.205749
S10	0.124416	-0.243899	-0.054881	-0.106216	0.017031	-0.082397	-0.154100	0.381154	0.388940	0.410774
AO	0.330733	0.402435	0.437473	0.493530	0.538010					
S1	-0.080481	-0.100716	-0.348761	0.016675	0.099748					
X1	-0.037264	0.023224	0.359070	-0.480692	-0.199784					
Y1	0.007696	-0.415532	0.253301	0.300989	-0.193232					
Z1	-0.224719	-0.012318	-0.003148	-0.003478	0.001236					
S2	-0.023653	0.027034	0.216378	-0.197628	-0.081910					
X2	0.042573	0.090250	0.482664	-0.354535	-0.127233					
Y2	0.054609	0.440681	-0.198370	-0.135131	0.039682					
Z2	0.120735	0.004761	0.000474	0.000862	-0.000615					
S3	0.196932	-0.455052	-0.054232	-0.036515	0.111516					
X3	0.003171	-0.001334	0.130775	-0.164125	0.674034					
Y3	-0.027133	0.172012	-0.384325	0.555755	0.119878					
Z3	0.400483	0.029082	0.007847	0.010045	-0.005150					
S4	-0.186940	0.141717	0.162604	0.167532	0.108935					
X4	0.247484	0.191997	0.153562	0.226144	-0.027247					
Y4	-0.197782	0.227073	0.247973	0.147418	0.249371					
Z4	-0.478206	-0.062814	-0.026264	-0.034050	0.011495					
S5	-0.066587	0.121171	-0.052894	0.090322	-0.300794					
X5	0.130656	-0.222530	0.087941	-0.141895	0.471225					
Y5	0.007824	-0.039857	-0.088775	-0.098224	-0.019795					
Z5	-0.206412	-0.017989	-0.003435	-0.007564	0.007640					
S6	0.045301	0.263709	-0.156274	-0.011046	0.106854					
S7	-0.007069	-0.218747	0.198221	0.000174	-0.030397					
S8	0.068808	0.265829	-0.000257	-0.113102	0.001623					
S9	0.490279	0.095293	0.052117	0.063711	-0.000508					
S10	-0.215303	0.013595	0.035535	-0.027063	0.083168					

**ENERGIES IN CNDO/2, 1 A.U. = 27.21E.V. **

TOTAL ENERGY = -54.961598 A.U.

DIPOLE MOMENT IN CNDO/2 METHOD

TOTAL MOMENT = 2.960555 DEBYES

ACRYLIC ACID

EIGEN VALUES AND VECTORS

A0	-1.727234	-1.525843	-1.467315	-1.112489	-1.005662	-0.845543	-0.832632	-0.816089	-0.736588	-0.639969
S1	0.357808	-0.155058	-0.472444	0.174191	-0.249043	-0.033541	0.0	0.11781	-0.094765	0.078345
X1	0.015773	0.222448	0.084485	0.324231	-0.152538	0.123852	0.0	-0.298691	0.211520	0.267625
Y1	-0.139770	0.036682	-0.034565	-0.256404	-0.435038	-0.086288	0.0	0.043067	0.096866	0.312557
Z1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.401887	0.0	0.0	0.0
S2	0.213606	-0.282939	-0.397846	-0.450760	0.159372	0.041971	0.0	-0.114831	-0.040239	-0.032194
X2	0.111116	-0.084307	-0.154739	0.169016	-0.174393	-0.161052	0.0	0.446631	-0.265863	-0.199816
Y2	-0.058580	0.044862	-0.029860	-0.182481	-0.376940	-0.192033	0.0	-0.045961	0.317685	-0.371181
Z2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.258633	0.0	0.0	0.0
S3	0.547428	0.128565	-0.014568	0.248089	0.136999	-0.245527	0.0	-0.195762	0.069876	-0.084054
X3	0.004447	0.439707	0.023563	-0.221160	-0.108154	0.004127	0.0	-0.193910	-0.122009	0.041926
Y3	-0.024426	0.087174	-0.340094	0.269842	-0.063183	0.371184	0.0	-0.111099	-0.049035	-0.136364
Z3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.567060	0.0	0.0	0.0
S4	0.414140	0.646520	0.003686	-0.293271	0.097882	0.186211	0.0	0.362926	0.057904	-0.011470
X4	-0.138222	-0.099473	-0.001198	-0.116346	0.018995	0.256471	0.0	0.508060	0.086776	0.040284
Y4	-0.002050	0.039040	-0.123604	0.172672	-0.066013	0.408087	0.0	-0.171915	0.041023	-0.416057
Z4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.428950	0.0	0.0	0.0
S5	0.478131	-0.382792	0.536712	-0.031282	-0.184012	0.259616	0.0	0.049616	0.207716	0.008159
X5	0.069053	0.044425	0.081230	-0.060348	-0.010751	-0.454468	0.0	-0.133046	-0.382494	-0.060582
Y5	0.080772	-0.053587	-0.063088	0.156860	0.299534	-0.339623	0.0	0.154644	0.490744	0.075757
Z5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.515792	0.0	0.0	0.0
S6	0.111068	-0.003605	-0.214282	0.056228	-0.420938	-0.024455	0.0	-0.012884	0.095472	0.449089
S7	0.049155	-0.091691	-0.160284	-0.375932	-0.067263	-0.041648	0.0	-0.272177	0.324559	-0.257662
S8	0.102208	-0.138471	-0.126491	-0.185108	0.351433	0.219249	0.0	-0.196763	-0.120511	0.401106
S9	0.186460	-0.100537	0.259572	-0.114578	0.222990	0.082227	0.0	-0.130211	-0.411810	-0.071421
A0	-0.618384	-0.618266	-0.522364	-0.507859	0.085415	0.247316	0.261660	0.266098	0.284253	0.339183
S1	-0.027286	0.0	0.0	-0.104381	0.0	0.460976	0.0	-0.045542	0.050992	0.143153
X1	-0.278700	0.0	0.0	-0.174090	0.0	0.172318	0.0	-0.199166	-0.011366	0.062888
Y1	0.069896	0.0	0.0	0.310096	0.0	0.160798	0.0	0.014470	-0.339304	0.034279
Z1	0.0	-0.437193	-0.401454	0.0	-0.417609	0.0	-0.558378	0.0	0.0	0.0
S2	0.039299	0.0	0.0	0.028243	0.0	-0.248098	0.0	-0.552384	-0.097313	0.035927
X2	0.262512	0.0	0.0	0.092023	0.0	0.041682	0.0	-0.251637	0.067963	-0.090595
Y2	-0.052257	0.0	0.0	-0.137557	0.0	0.132216	0.0	-0.010620	-0.449515	-0.080230
Z2	0.0	-0.399133	-0.486983	0.0	0.623881	0.0	0.380687	0.0	0.0	0.0
S3	-0.020188	0.0	0.0	-0.063598	0.0	-0.304270	0.0	0.188490	-0.428588	-0.220955
X3	0.362240	0.0	0.0	0.104091	0.0	0.160429	0.0	-0.105579	0.118910	-0.015977
Y3	-0.016940	0.0	0.0	-0.262245	0.0	0.090947	0.0	-0.130493	0.016822	-0.017626
Z3	0.0	-0.089743	0.274744	0.0	-0.456106	0.0	0.621991	0.0	0.0	0.0
S4	-0.112866	0.0	0.0	0.003534	0.0	0.019828	0.0	-0.006718	0.084679	0.069638
X4	-0.524366	0.0	0.0	-0.109508	0.0	-0.051356	0.0	0.022506	-0.173968	-0.136785
Y4	-0.157773	0.0	0.0	0.719636	0.0	-0.046837	0.0	0.056130	-0.023993	0.007579
Z4	0.0	-0.171776	0.662314	0.0	0.456019	0.0	-0.374008	0.0	0.0	0.0
S5	0.142025	0.0	0.0	0.065369	0.0	0.185220	0.0	-0.171234	0.159198	-0.213736
X5	-0.549000	0.0	0.0	0.210325	0.0	0.229951	0.0	-0.193352	0.200881	-0.284674
Y5	-0.052522	0.0	0.0	0.295428	0.0	0.125823	0.0	-0.065933	0.081005	0.488965

Z5	0. 0	0. 782301	-0. 295869	0. 0	0. 133753	0. 0	-0. 128595	0. 0	0. 0	0. 0
S6	-0. 105049	0. 0	0. 0	0. 142387	0. 0	-0. 537039	0. 0	0. 120493	0. 271562	-0. 106463
S7	-0. 150535	0. 0	0. 0	-0. 196851	0. 0	0. 059597	0. 0	0. 463575	0. 444919	-0. 003612
S8	-0. 030297	0. 0	0. 0	-0. 132122	0. 0	0. 321282	0. 0	0. 442069	-0. 259971	-0. 129442
S9	-0. 200153	0. 0	0. 0	-0. 093001	0. 0	-0. 145490	0. 0	0. 161816	-0. 135373	0. 701090
A0	0. 359454	0. 418171	0. 475926	0. 523817						
S1	-0. 376674	-0. 306274	-0. 061951	0. 121626						
X1	-0. 045189	0. 227571	0. 565051	-0. 198187						
Y1	-0. 173770	0. 424534	-0. 310818	-0. 236858						
Z1	0. 0	0. 0	0. 0	0. 0						
S2	0. 030623	0. 154250	0. 241091	-0. 083967						
X2	0. 239567	0. 363508	0. 446889	-0. 130730						
Y2	0. 373265	-0. 359435	0. 146811	0. 052644						
Z2	0. 0	0. 0	0. 0	0. 0						
S3	-0. 197817	0. 228671	-0. 113888	0. 152478						
X3	-0. 005150	0. 130834	0. 155960	0. 675581						
Y3	0. 473781	0. 324561	-0. 448541	0. 047592						
Z3	0. 0	0. 0	0. 0	0. 0						
S4	0. 072499	-0. 118183	-0. 061889	-0. 311064						
X4	-0. 136040	0. 194863	0. 093855	0. 468709						
Y4	-0. 128816	-0. 075812	0. 084001	-0. 001470						
Z4	0. 0	0. 0	0. 0	0. 0						
S5	0. 131078	0. 056653	-0. 079407	0. 055612						
X5	0. 184760	0. 059383	-0. 117167	-0. 002320						
Y5	0. 269892	0. 127824	-0. 054690	0. 196050						
Z5	0. 0	0. 0	0. 0	0. 0						
S6	0. 258743	-0. 221036	0. 002108	0. 120855						
S7	-0. 143830	0. 264857	0. 010860	-0. 036168						
S8	0. 319151	-0. 108234	0. 139357	0. 007796						
S9	0. 102881	0. 053139	0. 011754	0. 083850						

ENERGIES IN CND0 2, 1A,U,-27.21E,V.

TOTAL ENERGY=-60.958266A.U.

DIPOLE MOMENT IN CND0/2 METHOD

TOTAL MOMENT= 1.354772 DEBYES

***CYCLOPENTADIENE**

***EIGEN VALUES AND VECTORS**

AO	-1. 294376	-1. 013920	-0. 978361	-0. 952278	-0. 923148	-0. 609612	-0. 608263	-0. 596731
S1	0. 385225	-0. 000002	-0. 265525	0. 000000	-0. 000000	-0. 059797	0. 000000	-0. 000000
X1	-0. 000000	-0. 231519	-0. 000000	-0. 439565	-0. 000000	0. 000000	0. 063397	-0. 523634
Y1	-0. 201074	0. 114735	0. 000001	0. 315510	-0. 000000	-0. 308420	0. 000001	0. 000001
Z1	0. 000000	-0. 000000	-0. 000000	-0. 000000	0. 551084	-0. 000000	-0. 000000	-0. 000000
S2	0. 379716	-0. 084075	0. 445655	0. 225029	0. 000000	0. 092018	-0. 131860	0. 003020
X2	0. 207481	-0. 044612	-0. 101234	-0. 379337	-0. 028328	-0. 102440	-0. 284795	0. 357878
Y2	-0. 060068	-0. 284607	-0. 101579	-0. 079996	0. 360475	0. 360848	0. 271736	0. 208600
Z2	0. 000000	-0. 000000	-0. 000000	-0. 000000	0. 374027	-0. 000000	-0. 000000	0. 000000
S3	0. 376509	0. 373934	0. 308438	0. 058125	-0. 259182	-0. 025185	-0. 047994	0. 117932
X3	0. 123533	0. 071560	-0. 232604	-0. 328446	0. 189711	0. 354219	-0. 016332	-0. 027719
Y3	0. 180952	-0. 112426	0. 103112	-0. 098952	0. 100390	-0. 209460	-0. 404800	-0. 159141
Z3	0. 000000	-0. 000000	-0. 000000	0. 000000	0. 326433	0. 000000	0. 000000	0. 000000
S4	0. 376509	0. 373931	-0. 308441	0. 058125	-0. 259182	0. 025185	0. 047995	-0. 117931
X4	-0. 123533	-0. 071562	-0. 232603	0. 328446	0. 189711	-0. 354219	-0. 016379	-0. 027722
Y4	0. 180952	-0. 112427	-0. 103112	-0. 098952	0. 100390	-0. 209457	0. 404802	0. 159142
Z4	-0. 000000	-0. 000000	-0. 000000	0. 000000	0. 326433	0. 000000	-0. 000000	0. 000000
S5	0. 379716	-0. 084079	-0. 445654	0. 225029	-0. 208673	0. 092019	0. 131859	-0. 003020
X5	-0. 207481	0. 044611	-0. 101234	0. 379337	-0. 028328	0. 102438	-0. 284796	0. 357880
Y5	-0. 060068	-0. 284606	0. 101582	-0. 007996	-0. 360475	0. 360846	-0. 271739	-0. 208601
Z5	-0. 000000	-0. 000000	-0. 000000	0. 000000	0. 374026	-0. 000000	0. 000000	0. 000000
S6	0. 115556	-0. 274638	0. 000001	0. 073286	0. 318902	-0. 222963	0. 000001	0. 000000
S7	0. 115556	-0. 274638	0. 000001	0. 073286	-0. 318903	-0. 222963	0. 000001	0. 000001
S8	0. 077665	-0. 058777	0. 252051	0. 346831	0. 000000	0. 281093	0. 251552	-0. 297112
S9	0. 074812	0. 207072	0. 174996	0. 197860	-0. 272764	-0. 052680	0. 309741	0. 251045
S10	0. 074812	0. 207071	0. 174998	0. 197860	-0. 272765	-0. 052683	-0. 309741	-0. 251047
S11	0. 077665	-0. 058780	0. 252051	0. 346831	0. 203612	0. 281091	-0. 251554	0. 297114
AO	-0. 590495	0. 548850	-0. 457803	0. 115590	0. 277101	0. 286942	0. 325999	0. 334761
S1	0. 000000	0. 148506	-0. 000000	-0. 000000	-0. 491333	0. 000002	0. 171784	0. 000001
X1	0. 000000	-0. 000002	-0. 000000	-0. 000000	-0. 000000	-0. 181548	-0. 000000	0. 015817
Y1	0. 000000	-0. 460052	0. 000000	-0. 000000	0. 088518	0. 000000	0. 461161	-0. 000001
Z1	-0. 420062	-0. 000000	-0. 000000	-0. 129240	-0. 000002	-0. 000000	0. 000002	-0. 000000
S2	-0. 000000	0. 045127	0. 000000	0. 000000	0. 278550	-0. 299374	0. 096472	0. 179920
X2	-0. 000000	0. 216673	-0. 000000	0. 000000	0. 014430	0. 089345	-0. 016554	-0. 347278
Y2	-0. 000000	0. 160123	0. 000000	0. 000000	0. 113757	0. 024322	0. 024052	0. 118997
Z2	0. 209419	0. 000000	-0. 575183	-0. 499868	-0. 000000	-0. 000000	-0. 000001	-0. 000000
S3	-0. 000000	-0. 114630	0. 000000	-0. 000000	-0. 157812	0. 451720	-0. 189455	0. 145985
X3	0. 000000	-0. 355915	0. 000000	0. 000000	0. 121957	0. 032791	0. 197840	-0. 124370
Y3	0. 000000	-0. 163315	-0. 000000	0. 000000	0. 043092	-0. 116786	-0. 234145	-0. 218907
Z3	0. 478628	-0. 000000	-0. 411296	0. 392535	-0. 000001	0. 000000	0. 000000	0. 000001
S4	0. 000000	-0. 114630	-0. 000000	0. 000000	-0. 157815	-0. 451718	-0. 189455	-0. 145986
X4	0. 000000	0. 355915	-0. 000000	0. 000000	0. 121958	0. 032792	-0. 197840	-0. 124371
Y4	-0. 000000	-0. 163315	0. 000000	0. 000000	0. 043093	0. 116785	0. 234146	-0. 218907
Z4	0. 478628	0. 000000	0. 411296	0. 392535	-0. 000001	-0. 000000	0. 000000	0. 000000
S5	-0. 000000	0. 045127	-0. 000000	0. 000000	0. 278552	-0. 299373	0. 096471	-0. 179920

X5	-0.00000	-0.216670	0.00000	0.00000	0.000000	-0.186806	-0.014429	0.089346	0.016554	-0.347277
Y5	0.00000	0.160121	-0.00000	0.00000	0.000001	-0.124914	0.113757	-0.024323	0.024052	-0.118999
Z5	0.209419	0.00000	0.575183	-0.499868	0.411296	0.00000	0.000001	0.00000	-0.000001	0.000000
S6	-0.372602	-0.181545	0.00000	0.296136	-0.00000	0.173345	0.340635	-0.000001	-0.313420	0.000000
S7	0.372602	-0.181545	-0.00000	-0.296136	-0.00000	0.173345	0.340633	-0.000001	-0.313418	0.000000
S8	0.00000	-0.150302	-0.00000	0.00000	-0.00000	0.416881	-0.172401	0.244017	-0.068526	-0.404989
S9	0.00000	0.294094	-0.00000	0.00000	0.00000	0.265432	0.198510	-0.327130	0.368736	-0.289871
S10	0.00000	0.294092	-0.00000	0.00000	-0.00000	0.265433	0.198513	0.327128	0.368736	0.289871
S11	-0.00000	-0.150300	0.00000	-0.00000	-0.000001	0.416880	-0.172403	-0.244017	-0.068526	0.404990
A0	0.357498	0.377168	0.433189	0.489021	0.500854	0.527906				
S1	0.000001	-0.000000	-0.331149	0.093504	0.000001	-0.000001				
X1	0.000005	0.581967	0.00000	-0.00000	0.243889	-0.208787				
Y1	0.000003	0.00000	0.389364	-0.284047	-0.000001	0.000001				
Z1	0.709331	0.000006	0.00000	0.00000	-0.00000	-0.00000				
S2	0.000002	0.287993	-0.061890	-0.238381	0.068482	0.175574				
X2	0.000002	0.231502	0.297033	-0.358532	0.301585	0.081439				
Y2	0.000003	0.202794	0.375159	0.266547	0.096647	-0.420910				
Z2	0.257643	-0.000003	-0.000001	0.00000	0.00000	0.00000				
S3	0.000003	0.199839	0.232143	0.194477	-0.185277	-0.147828				
X3	0.000003	0.322244	-0.192010	-0.016662	-0.497670	0.202011				
Y3	0.000001	-0.093920	0.143230	0.337358	-0.177620	-0.433786				
Z3	-0.101353	0.000002	0.090000	-0.00000	-0.00000	-0.00000				
S4	-0.000002	-0.199839	0.232142	0.194477	0.185278	0.147830				
X4	0.000004	0.322244	-0.192007	0.016663	-0.497670	0.202012				
Y4	0.000001	0.093920	0.143229	0.337357	-0.177620	0.433787				
Z4	0.101353	-0.000000	-0.00000	0.00000	-0.00000	0.00000				
S5	-0.000003	-0.287993	-0.061890	-0.238381	-0.068483	-0.175574				
X5	0.000001	0.231501	-0.297034	0.358532	0.301587	0.081438				
Y5	-0.000001	-0.202793	0.375157	0.266547	0.096647	0.420912				
Z5	0.257643	-0.000001	-0.00000	-0.00000	0.00000	-0.00000				
S6	0.414452	-0.000004	-0.066688	0.068987	-0.000001	-0.00000				
S7	-0.414556	0.000003	-0.066685	0.068987	-0.000001	-0.00000				
S8	0.000001	0.018107	0.130183	-0.176439	0.123649	0.065421				
S9	0.000001	0.008546	-0.062434	0.105216	-0.190877	-0.092014				
S10	-0.000000	-0.008546	-0.062433	0.105215	0.190877	0.092014				
S11	0.000001	-0.018107	0.130184	-0.176439	-0.123649	-0.065421				

**ENERGIES IN CNDO/2 IAU=27.21EV. **

TOTALENERGY=-39.992266A.U.

DIPOLE MOMENT IN CNDO/2 METHOD

TOTAL MOMENT=0.691497DEBYES

(電子回折)

h) L.R.H. Scharpen, V.W. Laurie, *J. Chem. Phys.*

43 2765 (1965) (マイクロ波)

EIGENVALUES AND VECTORS: AO の行の $-1.467074, -1.125192$ などの数値は軌道エネルギー ϵ の値を a. u であらわしたものである。各数字の下にかかっている数値は分子軌道 $\varphi_i = \sum_r C_{ir} \chi_r$ の係数 C_{ir} である。なお AO としては $s1, x1, y1, z1$ などの記号を用いられているが、図 1 における 1 番目の原子の S, P_x, P_y, P_z 軌道を意味する。また被占軌道は価電子数/2 が被占されることになる。

TOTAL ENERGY: $W = E_e + E_N$ を Atomic Unit で求めたもの

DIPOLE MOMENT: Pople の表式にしたがって計算した双極子能率で、原子の形式荷電による寄与と、原子双極子能率の寄与を考えている。

次に塩化ビニリデン、メチルビニルエーテル、アクリロニトリル、イソブレン、アクリルアミド、アクリル酸シクロペンタジエンについての CNDO/2 計算の結果は表 3 (2)~(8) にそれぞれ示しておいた。

IV. CNDO/2 法によるビニルモノマーの電子状態

前章では、いうならばコンピュータによってえられた計算結果をその打出されたままの形で紹介しておいた。この中にはいろいろの情報が含まれており、その積極的な利用はむしろ実験的な研究にたずさわっておられ方々の検討にまづべきであると考ええる。しかしながらここでは若干の手引きとなる知見をまとめておこう。

1. 全エネルギー、軌道エネルギー 計算結果の中から、最高被占軌道最低空軌道の軌道エネルギー、全エネルギー、核反発エネルギーなどを一括して表示しておこう。これらの値は表 3 ではいずれも原子単位で与えられているが、ここでは他の比較のために eV 単位に換算してある。

最高被占軌道のエネルギーの $\epsilon_{h.o.}$ とイオン化ポテンシャル I_p との間には

$$I_p = -\epsilon_{h.o.}$$

で示す関係がなり立つことが知られている、実験値との比較は表 5 のごとく傾向はほぼ実験値と一致し

表 4 ビニルモノマーの全電子エネルギー、軌道エネルギー

ビニルモノマー	価電子数	最高被占軌道エネルギー (eV) ^{a)}	最低空軌道エネルギー (eV) ^{a)}	全エネルギー W(eV)
塩化ビニル	18	-13.6149 (π)	4.1096 (σ) 4.8288 (π)	- 880.6563
塩化ビニリデン	24	-13.6383 (π)	2.6844 (σ) 4.3375 (σ) 4.4259 (π)	-1296.9125
メチルビニルエーテル	24	-13.0490 (π)	5.5936 (π)	-1202.3085
アクリロニトリル	20	-14.3473 (π)	3.3403 (π)	- 948.2424
イソブレン	28	-13.4929 (σ) -13.7035 (π)	4.3344 (π)	-1122.9135
アクリルアミド	28	-13.2017 (n) -13.4397 (π)	2.6662 (π)	-1495.5051
アクリル酸	28	-13.8188 (n) -14.2135 (π)	2.3241 (π)	-1658.6744
シクロペンタジエン	26	-12.4568 (π)	3.1452 (π)	-1088.1896

a) () の中の記号は軌道が π 軌道, σ 軌道, n (孤立電子対) 軌道の区別を示す。 π 軌道はこの計算では各原子の nP_z 軌道の一次結合で作られているものをいう。

表 5 イオン化ポテンシャルの計算値
イオン化ポテンシャル

モノマー	計算値 (eV)	実験値 (eV)
シクロペンタジエン	12.46	8.58, 9.1
イソプレン	13.49, 13.70	8.81, 9.08
塩化ビニル	13.61	10.00, 9.95
アクリロニトリル	14.34	10.75
アクリル酸	14.21, 13.81	10.90

ているが、その絶対値は 3 eV ほど実験値より大きい。これは CNDO/2 法にみられる一般的な傾向である。また最低空軌道の値はいずれも正となっているが、この絶対値が小さいほど電子親和力が大きいと考えると、アクリル酸、アクリルアミドは電子親和力大きいことを示している。

また全エネルギー W の値は、図 1 の分子構造にもとづいて計算したものであって、 W の最少、すなわち Pople らのいう "Equilibrium geometry" に対する値¹⁰⁾、すなわち原子価角、結合距離を変化させてみだした極少の W ではないことを注意しておこう。たとえばアクリルアミドの場合にはアミノ基の立体配置によって W の値は変化する可能性があり、この値の変化から NH_2 基の回転障壁を推定しようものと考えられる。またイソプレンの S -*cis*、 S -*trans* 構造などの幾何異性体のエネルギー差もこれより求められることをつけ加えておく。ここで参考のために拡張ヒュンケル法で計算した塩化ビニルの軌道エネルギーと CNDO/2 法のそれとを表 6 にあげて

おく。CNDO/2 法の表 3-(1) の値を eV 単位に換算したもの、拡張 Huckel 法の値は標準的な手続きで計算したものである。最低空軌道の順序*など両法の結果には不一致がみられることを指摘しておこう。また気につくことは π 軌道のうちの最低被占軌道が特定の σ 軌道に比して低い点であり、すべての π 電子は σ 電子よりも高い

表 6 塩化ビニルの軌道エネルギーの比較

被 占 軌 道		空 軌 道	
CNDO/2 法	拡張Huckel法	CNDO/2 法	拡張 Huckel 法
-13.6149(π)	-12.6311(π)	12.8542	46.8808
-14.4120	-13.6592	10.8501	23.0457
-15.1449	-14.5110	7.8181	15.3255
-18.3136(π)	-15.3658	7.0387	10.6310
-22.9402	-15.5242(π)	4.8288(π)	5.4538(σ)
-19.5132	-16.3598	4.1096(σ)	-8.0541(π)
-27.1488	-19.5454		
-30.6165	-24.2489		
-39.9181	-28.6882		

エネルギーをもつというような簡単な概念は正しくないことがわかる。したがって π 電子の化学反応における特別な寄与は、その分子軌道が分子面を節面とする p 原子軌道（この計算では p_z 軌道）の一次結合であらわされることによってもたらされる特殊な対称性によると考える方がより妥当と思われる。

なおアクリル酸、アクリルアミドにおいてカルボニル基の酸素原子に大部分局在化**している孤立電子対軌道がいずれの場合にも最高被占軌道であることは、ほぼ妥当な結果であるとしてよいが、イソプレンの最高被占軌

表 7 塩化ビニルの π 軌道

Huckel 法	拡張 Huckel 法 ^{a)}	π 近似の SCF 法 ^{b)}	CNDO/2 法 ^{c)}
$\varphi_3 = 0.6849\chi_1 - 0.7011\chi_2$ + 0.1986 χ_3 ($\epsilon_3 = \alpha - 1.0236\beta$)	$\varphi_3 = 0.7549\chi_1 - 0.8699\chi_2$ + 0.2684 χ_3 ($\epsilon_3 = -8.0540\text{eV}$)	$\varphi_3 = 0.8035\chi_1$ - 0.8364 χ_2 + 0.2856 χ_3 ($\epsilon_3 = 6.3651\text{eV}$)	$\varphi_3 = 0.6953\chi_1 - 0.7089\chi_2$ + 0.1181 χ_3 ($\epsilon_3 = 4.8288\text{eV}$)
$\varphi_2 = 0.7011\chi_1 + 0.5587\chi_2$ - 0.4456 χ_3 ($\epsilon_2 = \alpha + 0.7369\beta$)	$\varphi_2 = +0.6968\chi_1 + 0.5004\chi_2$ - 0.4055 χ_3 ($\epsilon_2 = -12.6311\text{eV}$)	$\varphi_2 = 0.5721\chi_1 + 0.3772\chi_2$ - 0.7242 χ_3 ($\epsilon_2 = -9.2891\text{eV}$)	$\varphi_2 = 0.4588\chi_1 + 0.4588\chi_2$ - 0.8322 χ_3 ($\epsilon_2 = -13.6149\text{eV}$)
$\varphi_1 = 0.2011\chi_1 + 0.4438\chi_2$ + 0.8724 χ_3 ($\epsilon_1 = \alpha + 2.2067\beta$)	$\varphi_1 = 0.1153\chi_1 + 0.2988\chi_2$ + 0.8891 χ_3 ($\epsilon_1 = -15.5242\text{eV}$)	$\varphi_1 = 0.3220\chi_1 + 0.5147\chi_2$ + 0.6504 χ_3	$\varphi_1 = 0.5532\chi_1 + 0.6328\chi_2$ + 0.5418 χ_3 ($\epsilon_1 = -18.3136\text{eV}$)

a) 重なり積分が考慮されているので規格化の条件は $\sum_{r,s} \text{C}_{1r} \text{C}_{1s} S_{rs} = 1$ である

b) M. Simonetta, G. Favini, S. Carra, Mol. Phys. 1 181 (1958). 重なり積分考慮

c) 表 3 の値を統一的に書きなおしたものである

* この σ 軌道は C-Cl 結合に局在化した分子軌道である。拡張 Huckel 法では $i \rightarrow j$ 分子軌道間の一電子励起エネルギーは $\Delta E_{ij} = \epsilon_j - \epsilon_i$, SCF 法では $\Delta E_{ij} = \epsilon_j - \epsilon_i - (J_{ij} - K_{ij}) \pm K_{ij}$ で与えられるので、軌道順序とスペクトルの最低吸収の順序とをむすづけて考えるのは正しくない。

** 表 3 の固有ベクトルの係数から n 電子であることが判定される。

図2 ビニルモノマーの全価電子密度

図3 ビニルモノマーの形式荷電

図4 ビニルモノマーの全 π 電子密度, π 結合次数, $C_{2s}-H_{1s}$ 結合次数
() : π 結合次数 () : $C_{2s}-H_{1s}$ 結合次数

道が完全な σ 軌道(P_z 軌道の係数はいずれも0)になっていることは検討に値する。

2. 分子軌道の係数, 電子密度, 結合次数
塩化ビニルの π 軌道だけをとりあげて, いろいろな方法で計算した結果を比較したのが表7である。

係数の絶対値は, 規格化の条件において重なり積分を考慮するか, 無視するかによって非常に異なるので四方法の比較は余り意味をもたないが, 二つの炭素原子の係数間の大小関係はいずれの場合でも完全に一致している*。

次にビニル化合物の全価電子密度を図2にあげておく。全価電子密度とは各軌道電子密度を P_{rr} とすると

$$P_A = \sum_r P_{rr}$$

で定められるように一つの原子の原子密度の和であたえられる。アクリル酸, アクリルアミドのカルボニル基に隣接した炭素原子の P_A が他の炭素原子よりも, むしろ大きいことは興味がある結果であるが, この結果の正否

についてはたとえば ^{13}C ケミカルシフトなどによる検討を必要とする。またこれから得られる形式荷電は図3に示した。形式荷電 Q_A とすると Q_A は次式であたえられる。

$$Q_A = Z_A - P_A$$

図4にはビニルモノマーの P_z 軌道の軌道電子密度 P_{rr} , 結合次数 P_{rs} および炭素の $2s$ 軌道と隣接する水素の $1s$ 軌道間の結合次数

P_{1s-2s} の値が記載されている。

まず $C=C$ 二重結合の全 π 電子密度の傾向は, アクリロニトリルを除いて全価電子密度

* 分子に関する鏡映 σ_h をもっていない構造で計算したアクリルアミドでは, π と σ との分離は完全でない。

P_A と一致することが確かめられる。

また〔 〕中に記載された π 結合次数は、二重結合性の大きさを示す尺度であるが、共役系が長くなればなるほど減少する傾向がみとめられ、アクリロニトリル、イソプレン、アクリルアミド、アクリル酸ではビニル基の $C=C$ 結合と、それ以外の $C-C$ 結合間の p_{rs} の差がきわめて大きく出ている。このことは CNDO/2 法の計算結果の特長といえよう。

最後に () 中にある数字は水素の 1s, 炭素の 2s 軌道間の結合次数であり、この結合次数と、 $^{13}C-H$ 間のスピン結合定数 $J_{^{13}C-H}$ との間に比例関係のあることが知られている¹¹⁾。すなわち

$$J_{C-H} = A P_{1s-2s}^2$$

ただし A は常数である。一般には $\begin{array}{c} H \\ \diagup \\ C \\ \diagdown \\ H \end{array} \begin{array}{c} H \\ \diagup \\ C \\ \diagdown \\ X \end{array}$ にお

いて置換基のトランス位にある水素原子との結合定数がシス位にあるものよりも大きく、 X の電気陰性度の増大とともにこの差は増大するとされているが、この計算に関する限り、そのような傾向はみとめられない。この点について検討の余地が存在するが、 sp^2 混成の炭素原子に結合する水素原子との間の p_{1s-2s} の値は、 sp^3 混成の炭素原子に結合する水素原子との間の p_{1s-2s} の値よりも大きく、この傾向は実験値と並行的な関係がなりたっている。

3. 化学反応性 すべての価電子を考慮した SCF 法における化学反応性としては、従来の化学反応性の理論が共役化合物の、しかも π 電子だけに注目し、主として Hückel 法を基礎にして、くみたてられてきただけに、若干尺度自体にも検討の余地が残されている。しかしながら分子の属する点対称群が分子面に対する鏡映 σ_h をふくんでいる場合、簡単にいうと分子面に関して対称である場合 (図 1 の分子構造におけるアクリルアミドをのぞいた他のすべてのモノマー) には、 σ と π 電子とが完全に分離されるので、一応 π 軌道だけに注目して、全 π 電子密度¹²⁾, π 結合次数¹²⁾, 自由原子価フロンティア電子密度¹³⁾

$$p_{rr} = q_r = 2 \sum_r^{\text{occ}} C_{r,r}^2 c_r$$

$$p_{rs} = 2 \sum_r^{\text{occ}} C_{r,r} C_{r,s}$$

$$F_r = \sqrt{3} - \sum_s p_{rs}$$

$$f_r(E) = 2(C_r^h)^2$$

$$f_r(N) = 2(C_r^{1V})^2$$

$$f_r(R) = (C_r^h)^2 + (C_r^{1V})^2$$

が定義される。ただし C_{ir} は i 番目の π 分子軌道の r

番目の P_z 原子の軌道の係数、 C_r^h , C_r^{1V} は最高被占 π 軌道、最低空 π 軌道の r 番目の原子の P_z 軌道の係数である。この章でも述べたように CNDO/2 法によってえられた π 軌道の係数は Hückel 法で求められた係数とよい並行関係をしめすので、これらの尺度はいずれも有用であると考えられる。完全にたしかめられたわけではないが、全価電子密度 P_A も求電子性、求核的反応性と密接な関連性を有するものと考えられる。

しかし Hückel 法と CNDO 法との軌道エネルギーはその意味を異にするものであるから、エネルギーが関係する尺度¹³⁾については、簡単にその並行関係の存在するとは決論しがたい。

最後に反応に関する σ 電子の寄与について一言するならば、先に述べたように π 軌道がエネルギーが高く、 σ 軌道が低いとする簡単な描像は正しくないことは明らかであるから、遷移状態における試薬の相互作用の大きさ¹³⁾に関して、 π 軌道と σ 軌道とは異なることも同時に考慮する必要がある。

以上で計算結果から得られる情報の一部を紹介した。その他にもいろいろ興味ある事実がみられるが、これは読者の方々にまかせることにしたい。

以上、ビニル化合物の CNDO/2 法による計算手続き、計算結果、計算結果からえられる一部の情報について述べた。実験結果から得られる知見がより精密になるにつれて、その解釈、予見に用いられる分子軌道法の近似も一層高められる必要性が生じてくるのは当然である。しかしながら近似の進んだ方法に包含されている情報は未だ完全に利用しつくされているとはいいがたく、今後の検討もまたねばならない点も少なくないことを付言して、この小文を終りたい。(昭和 45 年 10 月 5 日受理)

文 献

- たとえば、鶴田禎二、高分子合成反応、日刊工業 (1959); 米沢、高分子生成反応、地人書店 (1967); K.F. O'Driscoll, T. Yonezawa, *Rev. Macromol. Chem.* **11** (1966)
- R. Hoffmann, *J. Chem. Phys.* **39** 1397 (1963)
- 長倉、福井、吉田共編、有機量子化学 化学同人増刊 (1966); 米沢、永田、加藤、今村、諸熊、改訂量子化学入門、化学同人 (1968)
- J.A. Pople, D.P. Santry, G.A. Segal, *J. Chem. Phys.* **43** S129 (1965); J.A. Pople, G.A. Segal, *J. Chem. Phys.* **45** S136 (1965)
- J.A. Pople, G.A. Segal, *J. Chem. Phys.* **44** 3289 (1966)
- J.A. Pople, D.L. Beveridge, P.A. Dobosh, *J. Chem. Phys.* **47** 2026 (1967)
- N.C. Baird, M.J.S. Dewar, *J. Chem. Phys.* **50** 1262 (1969)

- 8) T. Yonezawa, K. Yamaguchi, H. Kato, *Bull. Chem. Soc. Japan* **40** 536 (1967); H. Kato, H. Konishi, T. Yonezawa, *Bull. Chem. Soc. Japan* **40** 1017, 2761 (1968); T. Yonezawa, H. Nakatsuji, H. Kato, *J. Am. Chem. Soc.* **90** 1239 (1968)
- 9) C.C.J. Roothaan, *Rev. Mod. Phys.* **23** 69 (1951)
- 10) J.A. Pople, D.L. Beveridge, *Approximate Molecular Orbital Theory*, McGraw-Hill (1970)
- 11) T. Yonezawa, I. Morishima, M. Fujii, *Bull. Chem. Soc. Japan* **38** 1224 (1965), **39** 2110 (1965)
- 12) C.A. Coulson, H.C. Longuet-Higgins, *Proc. Roy. Soc. A* **192** 16 (1947)
- 13) K. Fukui, T. Yonezawa, H. Shingu, *J. Chem. Phys.* **20** 722 (1952); K. Fukui, T. Yonezawa, C. Nagata, H. Shingu, *J. Chem. Phys.* **22** 1433 (1954); K. Fukui, T. Yonezawa, C. Nagata, *Bull. Chem. Soc. Japan* **27** 423 (1954)
- 14) T. Yonezawa, K. Hayashi, C. Nagata, S. Okamura, K. Fukui, *J. Polymer Sci.* **14** 312 (1954); K. Hayashi, T. Yonezawa, C. Nagata, S. Okamura, K. Fukui, *J. Polymer Sci.* **20** 537 (1957)

正 誤 訂 正

訂 正 箇 所	誤	正
24ページ右 ix 中上から 5 行目	(37) はジケテン	(37) は β -プロピオラクトン
25ページ右上から 1 行目	dianhydride	dianhydride
282ページ右下から 1 行目	9, 38)	9, 39)
284ページ右上から 8 行目	…実現できなかった	…実現できなかった ²³⁾
285ページ右下から 9 行目	Potts ら ²³⁾	Potts ら ²²⁾
287ページ右上から 7 行目	文献 22) のつぎに 23) 橋本陸子, 博士論文 (東京工業大学, 昭和 36 年) を追加	
287ページ	文献番号 23)~37)	24)~38)
	" 38)	39)
472ページ左上から 11 行目	酵残基	酸残基
473ページ右下式
840ページ右下から 5 行目	65%と硫酸	と 65%硫酸
843ページ右	1, 4-シクロヘキサジエン 0.6 g	1, 4-シクロヘキサジエン 6.0 g
844左図 5 上 2 行目	かんはん	かくはん
" " 上 5 行目	NaHCO ₃	NaHCO ₃
" " 右図 6 の下	まず文献 ¹⁰⁾	まず文献 ⁹⁾
845右図 7 P + 2(162)のピーク	細線	太線
846表 63 列上段	硫酸温度	硫酸濃度
916右下から 20 行目	(n = 2, 3)	(n = 1, 2)
" " 2 行目	生成化	生成比
918左下から 11 行目	iv.	4.
920左上 2 つ目式}	$\xrightarrow{[Pt]}$	$\xrightarrow{[Pt]}$
" 3 つ目式}		
921右下から 11 行目	1, 3-シクロ……	1, 4-シクロ……
927文献 43)	工化	旦化
1174ページ下欄外	Nippon Gosei Gom Co.	Japan Synthetic Rubber Co.
1177ページ右上 18~19 行	たとえば軟質塩ビと NBR の配合	たとえば軟質塩ビは塩ビと NBR の配合