

Hückel 法の β の係数の符号に関して質問がありました。
軌道エネルギーの表現方法にややわかりにくいところがあります。

物理化学の指定教科書「物理化学」(マッカーリ・サイモン)に準拠すると、

$$x = (\alpha - \epsilon) / \beta$$

と置いていますので、

$$\epsilon = \alpha - x\beta$$

になります。

α も β も負の値を持つとして、エネルギーの上下関係を検討して、準位を図示してください。
演習 1 の表や、演習 3 の軌道エネルギーでは、 β の係数を $-x$ としています。

この煩雑を避けるため、

$$\lambda = (\epsilon - \alpha) / \beta \quad (\text{つまり、} -x)$$

と置く教科書も多い(「改訂量子化学入門」(米沢貞次郎ら)など)。

簡単な数学で、行列 $x\mathbf{E}\vec{c}$ を右辺へ移項して、 $-x$ が固有値になることを示せます。

λ を使ったときには、 $-\lambda\mathbf{E}\vec{c}$ を右辺へ移項して、固有値は λ のままとなり、

$$\epsilon = \alpha + \lambda\beta$$

です。和の方をエネルギー下位に描くのが自然に出てきます。

(私個人はどちらかというところ、こちらの手順の方に慣れていますが)