

エチレン $\text{CH}_2=\text{CH}_2$ の結合の分子軌道を次のように炭素原子 p 軌道の一次結合として作る。

$$\Psi = c_1\phi_1 + c_2\phi_2$$

原子軌道は規格化されているとし、さらに c_i ($i = 1, 2$) は実数とする。

分子軌道エネルギー $E = \frac{\int \Psi^* \hat{H} \Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau}$ は、

積分 $H_{ii} = \int \phi_i^* \hat{H} \phi_i d\tau$, $H_{ij} = \int \phi_i^* \hat{H} \phi_j d\tau$ とヒュッケル分子軌道の仮定を用いると、

$$E = \frac{(c_1^2 + c_2^2)\alpha + 2c_1c_2\beta}{c_1^2 + c_2^2} \quad (1)$$

で与えられる。ここで、 $H_{11} = H_{22}$, $H_{12} = H_{21}$ である。
これについて以下の設問に答えよ。

- 問1 H_{ii} と H_{ij} の名称を述べよ。
- 問2 ヒュッケル分子軌道法の中で用いられるいくつかの仮定について説明せよ。
- 問3 問2の仮定を用いて(1)式を導出せよ。ただし、導出過程においてそれらの仮定をどこで使ったかが判るように示すこと。
- 問4 エネルギー E を極小とするために係数 c_1, c_2 が満たすべき条件式を求めよ(ヒント: 2つある)。さらに求めた条件式から、 (c_1, c_2) $(0, 0)$ の解を与える永年方程式を導け。
- 問5 永年方程式を解いて、分子軌道エネルギーを全て求めよ。
- 問6 2個の電子のあるエチレンの全エネルギーはいくらか。