

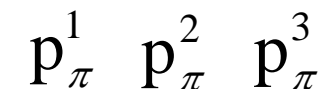
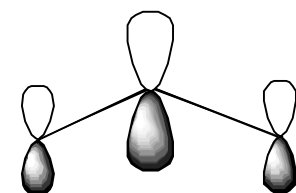
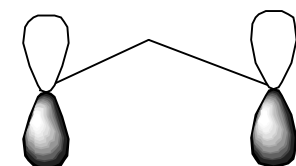
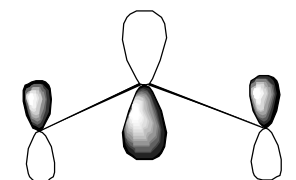
課題：ヒュッケル近似を適用したアリルラジカルの 分子軌道の波動関数 Ψ が次のようになることを示しなさい。

アリルラジカル MOのエネルギーとAOの係数

$$\text{————} \quad \alpha - \sqrt{2}\beta \quad 0.500p_{\pi}^1 - 0.707p_{\pi}^2 + 0.500p_{\pi}^3$$

$$\text{—} \uparrow \text{—} \quad \alpha \quad 0.707p_{\pi}^1 + 0.000p_{\pi}^2 - 0.707p_{\pi}^3$$

$$\text{—} \uparrow \downarrow \text{—} \quad \alpha + \sqrt{2}\beta \quad 0.500p_{\pi}^1 + 0.707p_{\pi}^2 + 0.500p_{\pi}^3$$



提出期限：6月22日（木）午後5時

提出場所：工学部4号館316号室前ポスト

備考：表紙は不要です。A4判レポート用紙にまとめて、複数枚になるときはホッチキスなどで綴じる。