

$C_2$  点群の対称性軌道を基底としたブタジエンの  $\pi$  軌道の永年方程式を書き、それぞれを解いてエネルギー固有値と固有関数を求めよ。ヒュッケル近似で解かれた以下の値となることを証明せよ。

$$\varepsilon_1 = \alpha + 1.618\beta \quad \phi_1 = 0.3717\psi_1 + 0.6015\psi_2 + 0.6015\psi_3 + 0.3717\psi_4$$

$$\varepsilon_2 = \alpha + 0.618\beta \quad \phi_2 = 0.6015\psi_1 + 0.3717\psi_2 - 0.3717\psi_3 - 0.6015\psi_4$$

$$\varepsilon_3 = \alpha - 0.618\beta \quad \phi_3 = 0.6015\psi_1 - 0.3717\psi_2 - 0.3717\psi_3 + 0.6015\psi_4$$

$$\varepsilon_4 = \alpha - 1.618\beta \quad \phi_4 = 0.3717\psi_1 - 0.6015\psi_2 + 0.6015\psi_3 - 0.3717\psi_4$$