

2019 年度 構造化学 試験問題 担当講師 中田真秀

注意: ノート、教科書など持ち込み不可

1. ハミルトニアン (10 点)

原子核は固定されているとする。単位系、座標系などは好きなものを持ちいてよい。ただし、どんなものを用いたか必ず説明を加えること。

3-1. 水素原子の図とハミルトニアンを書き下せ。各項に説明を入れ、図と項の対応をつけよ。(4 点)

3-2. 3-1. 同様にヘリウム原子について行え。(6 点)

2. ヘリウム原子のハートリー近似 (6x5=30 点)

2-1. 三次元空間に一つ電子がある。その波動関数が $\psi(x)$ で表されるとする。ある微小体積 $x \sim x + dx$ に電子が存在する確率を書け

2-2. 電子密度 $\rho(x)$ を表す式を 2-1. で求めた式で表せ。

2-3. ヘリウム原子の波動関数を $\Psi(x_1, x_2) = \chi_1(x_1)\chi_2(x_2)$ と近似する。この近似波動関数がシュレーディンガー方程式を満たすとする。

a. 両辺に左から $\chi_2^*(x_2)$ を掛け、さらに両辺を x_2 について全空間で積分せよ。

b. a.を同様に $\chi_1^*(x_1)$ について行え。

c. a. b.で得た方程式が 1 電子シュレーディンガー様方程式の形をとっていること、一つの電子が、もう一つの電子の作る平均場との相互作用していることについて説明せよ。

3. Huckel 法 (30 点=5, 5, 10, 10 点)

3-1. エチレン分子の構造式を書け。

3-2. 分子面に垂直な規格化された p 軌道(ϕ_1, ϕ_2 とせよ)のみ考え、分子軌道を LCAO 近似で表せ。

3-3. クーロン積分 $\int \phi_i H \phi_i d\tau$ はすべて等しく α とし、重なり積分は、自分自身以外では 0 とし、共鳴積分は隣り合ったもののみ $\int \phi_i H \phi_j d\tau$ 値 β を持つとする。このとき、永年方程式を書け。

3-4. 永年方程式を解いて、エネルギーダイヤグラムと波動関数の図を書け。

4. Huckel 法: (30 点=5, 5, 10, 10 点)

4-1. 1,3-シクロブタジエンの構造式を書け。

4-2. 3-3. と同じ近似を用い、永年方程式を書き下せ。

4-3. エネルギーダイヤグラムと波動関数の図を書き、基底状態の電子状態を予想せよ。

4-4. 基底状態で、1,3-シクロブタジエンは長方形か正方形か予測せよ。

5. 感想 (0 点)