

2020 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、導出過程などは加点対象となるので残すこと。

1. ハミルトニアンと原子単位 (23 点=5 点, 10 点, 8 点)

1-1. 水素原子について SI 単位系を用いハミルトニアンを書き下せ。さらに図を書き、各項に説明を入れよ。

1-2. SI 単位系を原子単位系に変換する方法を導出し、水素原子のハミルトニアンを原子単位系で書き直せ。ヒント: 座標をすべて定数倍せよ。

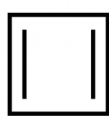
1-3. 水素化リチウムのハミルトニアンを原子単位系で書き下せ。さらに図を書き、各項に説明を加えよ。

2. 二次元の箱の中の粒子 (17 点=10 点, 7 点)

2-1. 長さが a, b である二次元の箱の中に質量 m の粒子が閉じ込められている。箱の中でポテンシャルは 0、箱の外ではポテンシャルが ∞ のとき、シュレーディンガー方程式を解いて固有値、固有関数をすべて求めよ。

2-2. 2-1. を例に用いて、量子力学における、縮退、基底状態、励起状態の各用語を説明せよ。

3. Huckel 法: (30 点=5, 10, 10, 5 点)



3-1. 1, 3-シクロブタジエンは左図のような形をしている。分子面に垂直な規格化された p 軌道 ($\phi_1, \phi_2, \phi_3, \phi_4$ とせよ) のみ考え、分子軌道を LCAO 近似で表せ。

3-2. 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 $\int \phi_i H \phi_j d\tau$ は隣り合ったもののみ値 β を持つとする。このとき、永年方程式を書け。

3-3. 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。

3-4. 1,3-シクロブタジエンは正方形か、長方形か。理由をつけて答えよ。

4. 分子軌道法 (30 点=5 点, 5 点, 5 点, 5 点, 5 点, 5 点)

4-1. $1s, 2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$ 軌道について、2 つの原子軌道の重ね合わせが分子軌道として存在する場合、しない場合などの分類を説明とともに行え。

4-2. σ 軌道、 π 軌道について 4-1. を踏まえつつ、図を交えつつ説明せよ。

4-3. 結合性軌道、非結合性軌道について 4-1, 4-2 を踏まえつつ図を交えつつ説明せよ。

4-4. O_2 と C_2 のエネルギーダイヤグラムを書き、電子構造について似ている点、違う点について議論せよ。

4-5. HF の電子構造をエネルギーダイヤグラムとともに議論せよ。

4-6. H_2O の $\angle H-O-H$ はなぜ 108° 程度となるか議論せよ。

5. 感想 (0 点; 加点対象外)