

H26 化生薬 専門 (多肢式) 試験問題から

【No. 24】 ベンゼンの6員環の六つの炭素原子について、ある炭素原子を炭素1とし、時計回りに炭素2、炭素3、…、炭素6とする。 ϕ_k をkに対応する番号の炭素原子の $2p_z$ 原子軌道(zはベンゼン環を含む平面に垂直な座標軸)とすると、ベンゼンの6員環に非局在化した π 分子軌道の波動関数 Ψ_n ($n=1\sim 6$)は、ヒュッケル近似のもとで、次のように表すことができる。このとき、 Ψ_2 と同じエネルギーをもつ π 分子軌道の波動関数はどれか。

学籍番号
氏名

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{6}}(\phi_1 + \phi_2 + \phi_3 + \phi_4 + \phi_5 + \phi_6)$$

$$\Psi_2 = \frac{1}{2}(\phi_2 + \phi_3 - \phi_5 - \phi_6)$$

$$\Psi_3 = \frac{1}{\sqrt{12}}(2\phi_1 + \phi_2 - \phi_3 - 2\phi_4 - \phi_5 + \phi_6)$$

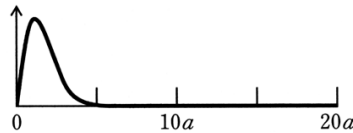
$$\Psi_4 = \frac{1}{\sqrt{12}}(2\phi_1 - \phi_2 - \phi_3 + 2\phi_4 - \phi_5 - \phi_6)$$

$$\Psi_5 = \frac{1}{2}(\phi_2 - \phi_3 + \phi_5 - \phi_6)$$

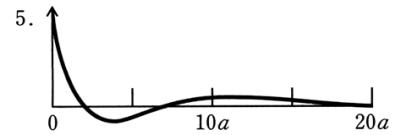
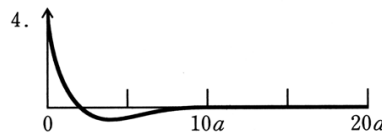
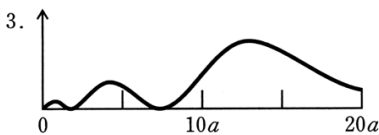
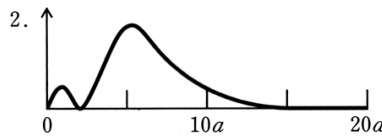
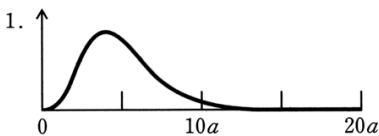
$$\Psi_6 = \frac{1}{\sqrt{6}}(\phi_1 - \phi_2 + \phi_3 - \phi_4 + \phi_5 - \phi_6)$$

- | |
|-------------|
| 1. Ψ_1 |
| 2. Ψ_3 |
| 3. Ψ_4 |
| 4. Ψ_5 |
| 5. Ψ_6 |

【No. 25】 図は水素原子の1s軌道の動径分布関数(動径確率密度関数)の概略を示したものである。水素原子の2p軌道の動径分布関数の概略として最も妥当なのはどれか。

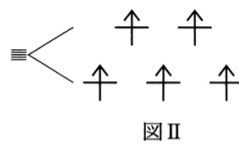
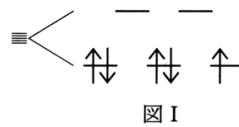


ただし、横軸は動径であり、 a はボーア半径を表し、縦軸は任意単位で表されている。



【No. 28】 ヘキサアクアマンガン(II)錯体に関する次の記述の㉞~㉠に当てはまるものの組合せとして最も妥当なのはどれか。

「ヘキサアクアマンガン(II)錯体において Mn^{2+} の3d軌道は結晶場により分裂している。基底状態において、電子配置はフントの規則が示すとおり、㉞のようになる。したがって、3d軌道内で電子が励起される際には㉠が変化するが、この励起過程は㉡であるため、ヘキサアクアマンガン(II)錯体は他の3d遷移金属(II)のヘキサアクア錯体に比べて、㉢着色を示す。」



- | | ㉞ | ㉠ | ㉡ | ㉢ |
|----|------|--------|------|----|
| 1. | 図 I | パリティ | 許容遷移 | 濃い |
| 2. | 図 I | スピン多重度 | 許容遷移 | 濃い |
| 3. | 図 II | パリティ | 許容遷移 | 濃い |
| 4. | 図 II | パリティ | 禁制遷移 | 淡い |
| 5. | 図 II | スピン多重度 | 禁制遷移 | 淡い |