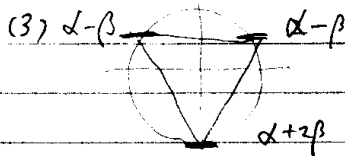


授業科目	施行 月 日	年 月 日 曜日 第 時限	昼・夜の別	入学年度	学年	学科(略号)	ふりがな	★評点
			クラス番号	クラス 番		氏名		
担当教官	座席	教室 番	学籍番号				氏名	藤田

(注意) ★印を除き必ず記入すること。1年生は、クラス番号も記入すること。(学籍番号は全桁記入すること)

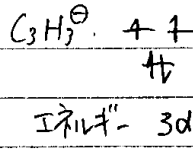
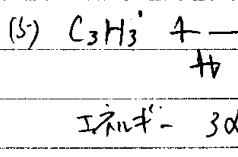
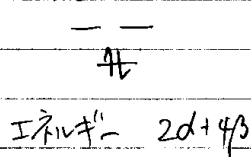
[1] (1) $(4n+2)\pi$ 電子系環状平面分子は芳香族である

(2)
$$\begin{vmatrix} \lambda & 1 & 1 \\ 1 & \lambda & 1 \\ 1 & 1 & \lambda \end{vmatrix} = 0$$



$E = \alpha + 2\beta, \alpha - \beta, \alpha - \beta$
($\lambda = 2, -1, -1$)

(4) $C_3H_3^{\oplus}$



順に化学結合のエネルギー $4\beta, 3\beta, 2\beta$ 減る
対称電子数 0, 1, 2 増える

[2] (1) 全電子波動関数に Slater 行列を採用し、11314-27-1:1 電子反発が取り込まれた。

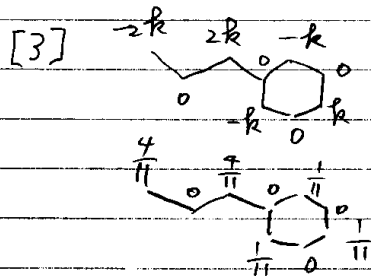
(2) I: コア積分

J: 軌道内 ($i=j$), 軌道間 ($i \neq j$) 反発積分

(3) $S_1: E = 2I_1 + I_2 + I_3 + J_{11} + 2J_{12} + 2J_{13} + J_{23} - K_{12} - K_{13} + K_{23}$

$T_1: E = 2I_1 + I_2 + I_3 + J_{11} + 2J_{12} + 2J_{13} + J_{23} - K_{12} - K_{13} - K_{23}$

$\therefore \Delta E_{ST} = -2K_{23}$ 交換積分の2倍に相当する。



SOMO の係数を左のようにおいて規格化可なり

$(-2k)^2 + (2k)^2 + (-k)^2 \times 2 + k^2 = 1, \quad k = \frac{1}{\sqrt{11}}$

π 電子密度は個々の原子の係数の二乗 k^2 の和、左回と右回

[4] (1) 縮重軌道には π 電子密度を最大にする電子配達が安定

(2) $(F - \epsilon; S) C_i = 0 \quad F_i: Fock$ 行列。

(3) π 軌道が原子軌道の $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d \dots$ のような類似の対称性をもつ

(4) 6-31G 基底で HF 構造最適化し、6-31+G** 基底で分子軌道計算を行う。

[5] (1) 260.63763 (kJ) (2) -1515.80174 (eV) (3) D_{2h}

価電子数は $6 \times 4 + 4 \times 6 + 1 \times 4 = 52$ 。HOMO は 26 番目だから

(4) 8.52704 eV (5) 26