

- (A) 酸素分子は三重項ビラジカルである。これを説明することができるようになったのは、分子軌道法の重要な成果の一つといわれている。(1) 分子軌道が形成される様子を軌道のエネルギーダイアグラムを描くことにより説明せよ。(2) 酸素分子の電子配置を、 $(\sigma_{1s})^2(\sigma_{1s}^*)^2 \dots$ という表記に従って記せ。電子を配置するときのルールは原子軌道でも分子軌道でも同じである。((i) 構成原理、(ii) パウリの原理、(iii) フント則、を復習せよ)

- (B) (1) 単純 Hückel 法における、1,3-ブタジエンの永年方程式を記せ。(実際に方程式を解いてもよいが、) 以下の四角囲みに Hückel 計算結果を記した。炭素原子は順に 1～4 番とし、その A0 係数が、対応する固有エネルギーの真下に縦に並んでいる。
 (2) 各分子軌道を、図 1(a) のようにローブで描け。ローブの大きさは係数に比例させる。
 (3) 以下の量を、算出する方法の説明を添えて、答えよ。
 (i) 炭素 1 と炭素 2 における π 電子密度
 (ii) 炭素 1-炭素 2 間と炭素 2-炭素 3 間の π 結合次数

Orbital Energies				
1. 6180	0. 6180	-0. 6180	-1. 6180	
LCAO Coefficients				
0. 3717	-0. 6015	-0. 6015	-0. 3717	炭素番号
0. 6015	-0. 3717	0. 3717	0. 6015	1
0. 6015	0. 3717	0. 3717	-0. 6015	2
0. 3717	0. 6015	-0. 6015	0. 3717	3
				4

MO 番号 1

2

3

4