

R01 量子化学演習 (金 1) (答案は返却しません)

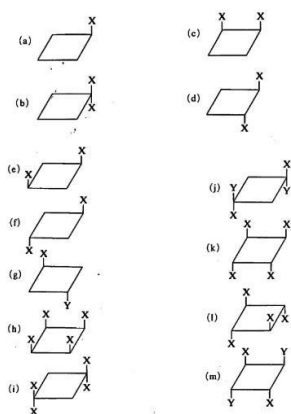
2019 年 12 月 13 日

学年 クラス (機能・分子) 学籍番号 氏名

先導物質化学研究所

塩田 淑仁

3.9 次の置換シクロブタンのそれぞれの点群は何か。シクロブタンそのものは D_{2h} 対称を持ち、X あるいは Y によって H を置換しても他の構造パラメーターを一切変えないと仮定せよ。



前回の復習 (配点 13 点、前回の得点に足します。)

- | | | | | | |
|-----|----------|-----|----------|-----|----------|
| (a) | C_s | (b) | C_{2v} | (c) | C_s |
| (d) | C_2 | (e) | C_{2v} | (f) | C_{2h} |
| (g) | C_s | (h) | C_{4v} | (i) | D_{2h} |
| (j) | C_{2h} | (k) | C_{2h} | (l) | D_{2d} |
| (m) | D_2 | | | | |

各 1 点 点数は 別にしてください。

演習 (考え方もできるだけ記すこと) 各 20 点

1 点群の既約表現を表す記号であるマリケン記号について意味を説明せよ。

(1) A, B, E, T, G, H

(2) 添字' " 12 g u

(3) 大文字と小文字の違い

採点基準 なにか書いてあれば 20 点とする。

2 群の位数 h について、 C_3 C_{3v} D_{3h} の位数を求めよ。

$$C_3 = 3 \quad C_{3v} = 6 \quad D_{3h} = 12$$

答のみでよい 全問正解 20 2 個正解 15 点 1 個正解 10 点

3 既約表現の次元から問題 2 を解答せよ。

$$C_3 = 1+1+1 \quad C_{3v} = 1+1+2^2 \quad D_{3h} = 1+1+2^2 + 1 + 1+2^2$$

式があてれば OK、順序は問わない、答えのみは X

4 直交性定理について説明せよ。

解答：異なる対象種の表現に対応する指標表の成分の内積は 0 になり、同じ場

合は位数 h となる。

採点基準 赤いところが文章にペアではいってれば正解、ペアで1個10点

5 縮退のない軌道に電子が二個占有するとその対称性はどうなるか説明せよ。

解答 縮退がないとき軌道に二個占有されたときの軌道の表現は常に a_1 となる。

採点基準 赤い部分があれば正解

以下解答欄 ウラ面も使用してよい。