

R01 量子化学演習 (金1) (答案は返却しません)

2019年12月20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

演習 (考え方もできるだけ記すこと)

1. 問題 11C.1a 11C1b を解答せよ。
2. 問題 11C.5a 11C5b を解答せよ。

以下解答欄 ウラ面も使用してよい。

11C.1a C_{2v} の対称性の分子において px z pz の積分が 0 になるか判定せよ

C_{2v} で対応する対称種の表現は px: b1 z: a1 pz: a1

これらの直積は b1 よって積分は 0

(配点 2.5 下線部があれば 2.0 点 表現が大文字の場合は -5 点)

11C1b D_{3h} の対称性の分子において px z pz の積分が 0 になるか判定せよ

D_{3h} で対応する対称種の表現は px: e' z: a2'' pz: a2''

これらの直積は e' よって積分は 0

(配点 2.5 下線部があれば 2.0 点 表現が大文字の場合は -5 点)

11C5a

遷移双極子モーメントが 0 でないためには 軌道の対称種の表現が A1 である

必要がある。基底状態 A1 と xyz 各偏光の直積はそれぞれ B1, B2, A1 となる。

A1 となるための励起状態の表現は x 偏光のとき B1 y 偏光のとき B2 z 偏光のとき A1 となるときである。

(配点 2.5 下線部があれば 2.0 点 表現が小文字の場合は -5 点)

11C5b

遷移双極子モーメントが 0 でないためには 軌道の対称種の表現が A1 である

必要がある。基底状態 B1 と y 偏光 (B2 表現に属する) の直積は A2 であるので 励起状態は A2 である必要がある。

(配点 2.5 下線部があれば 2.0 点 表現が小文字の場合は -5 点)