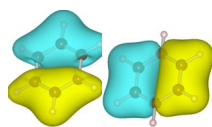


H28 参考問題

分子電子構造論

以下の問いに答えよ

- (1) 1つの軌道に電子が3個以上入らない、これをパウリの排他原理という、その理由を説明せよ。
- (2) 非交差則とその例外について説明せよ
- (3) ベンゼンは D_{6h} の対称性をもつ、これから電子を1つ取り出すとヤーンテラー変形が起きる、この現象について説明せよ。以下に縮退したベンゼンの HOMO を示す。



- (4) D_{4h} と C_{4v} の違いについて説明し、例となる分子をそれぞれの対称性について、1つ示せ。
- (5) スピン軌道相互作用について説明せよ。以下の3つのキーワードを使用すること（有効核電荷、スピン禁制、相対論効果）