

以下の問に答えよ。

【1】単純 Hückel 法に関する問題。

- 1) 単純 Hückel 法によるとブタジエンの π 電子の軌道エネルギー・分子軌道は、それぞれ、
 $\varepsilon_1 = \alpha + 1.618\beta$, $\varepsilon_2 = \alpha + 0.618\beta$, $\varepsilon_3 = \alpha - 0.618\beta$, $\varepsilon_4 = \alpha - 1.618\beta$,
 $\psi_1 = 0.372(\chi_1 + \chi_4) + 0.602(\chi_2 + \chi_3)$, $\psi_2 = 0.602(\chi_1 - \chi_4) + 0.372(\chi_2 - \chi_3)$,
 $\psi_3 = 0.602(\chi_1 + \chi_4) - 0.372(\chi_2 + \chi_3)$, $\psi_4 = 0.372(\chi_1 - \chi_4) - 0.602(\chi_2 - \chi_3)$
となる。ただし、原子軌道 χ_i ($i=1,2,3,4$)、クーロン積分 α 、共鳴積分 β である。以上の結果に基づき、以下の問に答えよ。
- a) 各炭素原子の π 電子密度 $P_{\mu\mu}$ 、 π 結合次数 $P_{\mu\nu}$ を求めよ。
b) イオン化ポテンシャル、電子親和力を推定せよ。
c) 吸収スペクトルで π - π^* 遷移の波長を推定せよ。
- 2) ブタジエンを例に、単純 Hückel 法で π 電子の分子軌道、軌道エネルギーを求める手順を簡単に解説せよ。

【2】量子化学計算に関する問い。

自らが量子化学的な計算を行って考察を試みたい分子の構造、物性、または化学反応の **例**を一つだけ挙げ、試みたい考察の **内容** と考察を試みたいと考える **理由** を述べよ。

注意： 冒頭に、所属研究室名、学年、学籍番号、氏名 を明記し、2cm程度の空白を空けてから、解答せよ。