

- 1 ポテンシャルエネルギーが V である質量 m の粒子の 3 次元空間内における運動について、その Schrödinger 方程式を書け。
- 2 ベンゼンの π 電子のエネルギーを Hückel 法で求める場合の永年行列式を書け。
- 3 Hückel 法を用いて、アリルラジカル ($\cdot\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}_2$) のラジカル電子が分子中のどの炭素原子上で見出されるかを予想せよ。
- 4 原子 1 (原子軌道 ϕ_1) と原子 2 (原子軌道 ϕ_2) から成る 2 原子分子について、電子の分子軌道を Hückel 法で求めると $\Psi = c_1\phi_1 + c_2\phi_2$ が得られた。この電子が原子 1 上で見出される確率を求めよ。
- 5 ブタジエンとエチレンとの反応 (熱反応) の機構を説明せよ。