

1 古典力学的取り扱いにおけるポテンシャルエネルギーが $V = \frac{\pi^2 q^8}{2\sqrt{r^5}}$ となる質量 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。古典力学における運動量 p の演算子は $p = \frac{\hbar}{i} \nabla$ と表される。ただし、 π は円周率、 q は粒子の電荷、 r は粒子に働く中心力の焦点と粒子との距離であるとする。

2 ブタジエン ($\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$) 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 π 電子系の3つのエネルギー準位を求めよ。ただし、クーロン積分を α 、交換積分(共鳴積分)を β とする。また、それぞれのエネルギー準位における π 電子の分布はどの様になるか図示せよ。

4 3原子から構成され、分子内に π 電子2個を持つ π 共役系化合物が存在すると仮定する。この分子の構造は環状か直線状かのどちらかの構造をとるはずである。どちらの構造になるかを Hückel 法で予想せよ。

5 この講義についての改善点を記せ。