

課題第1問

14.11† J.G. Dojahn, E.C.M. Chen, and W.E. Wentworth (*J. Phys. Chem.* **100**, 9649 (1996)) characterized the potential energy curves of homonuclear diatomic halogen molecules and molecular anions. Among the properties they report are the equilibrium internuclear distance R_e , the vibrational wavenumber, $\tilde{\nu}$, and the dissociation energy, D_e :

Species	r_e/pm	$\tilde{\nu}/\text{cm}^{-1}$	D_e/eV
F_2	1.411	916.6	1.60
F_2^-	1.900	450.0	1.31

Rationalize these data in terms of molecular orbital configurations.

課題第2問

シクロブタジエンについて、Hückel法を用いて電子エネルギー準位 ϵ を求め、各準位の π 電子の個数を求めよ。また、次の量を求めよ。ただし、隣接原子間の重なり積分は0、クーロン積分、共鳴積分をそれぞれ α 、 $\beta (<0)$ とする。

(1) π 電子エネルギー
$$E_\pi = \sum_i n_i \epsilon_i$$

(2) π 電子密度
$$q_r = \sum_i n_i C_{ri} C_{ri}$$

(3) π 結合次数
$$p_{rs} = \sum_i n_i C_{ri} C_{si}$$

ここで、 n_i は i 番目の分子軌道の電子占有数、 r と s は r 番目、 s 番目の炭素原子を表す。

(各1名を指名)