## (2017/06/29) 分子電子構造論資料

## H29 参考問題

## 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) 平行スピンをもつ電子同士に働く相互作用について説明せよ。
- (3) 反平行スピンをもつ電子同士に働く相互作用について説明せよ。
- (4) ベンゼンは D<sub>6h</sub> 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。右に縮退たベンゼンの HOMO を示す。
- (5)  $D_{3h} \geq C_{3V}$  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。