

R01 量子化学演習（金 1・2） （答案は返却しません）

2019 年 12 月 6 日

学年 クラス（機能・分子） 学籍番号 氏名

先導物質化学研究所

塩田 淑仁

演習

1 次の物体が属する点群は何か

(a) 球 (b) 円錐 (c) 円筒形 (d) 正三角形 (e) 二等辺三角形 (f) 正 6 角形 (g)

4 本足のテーブル

2 次の分子の対象要素をあげ、それが属する点群を決定せよ。（形を図示するこ

と）(1) シクロブタジエン (2) シクロブタン (3) シクロブテン

3 極性を持つ分子の点群を説明せよ。

4 ヘルマンモーガン系とシェーンフリース系の違いについて説明せよ。

5 結晶点群は並進と両立できる n 回回転軸を持ち 3 2 個あることが知られている。5 回回転軸は含まれないその理由を説明せよ。

以下解答欄 ウラ面も使用してよい。

1 (a) R_3 (b) $C_{\infty v}$ (c) $D_{\infty h}$ (d) D_{3h} (e) C_{2v} (f) D_{6h} (g) 適当でなんでもよい

配点 1 問 3 点 計 21 点

2 (1) 点群 D_{2h} 要素 $E C_2 \sigma_v \sigma_h$ (2) 点群 D_{4h} 要素 $E C_4 \sigma_v \sigma_h$

別解 点群 C_{2v} 要素 $E C_2 \sigma_v$ (シクロブタンが歪むことを説明している場合)

(3) 点群 C_{2v} 要素 $E C_2 \sigma_v$

配点 1 問 6 点 計 18 点

3 $C_1 C_s C_n C_{nv}$ 配点 1 つ 5 点 全部で 20 違うものがあれば 1 点減点

4 ヘルマンモーガン系は結晶の点群表記に用いられ三十二種類しかないが、シェーンフリース系は結晶制限される。

ヘルマンモーガン系は n 回回転軸が 1、2、3、4、6 に限定されるが、シェーンフリース系には制限がない。

ヘルマンモーガン系は回反軸を使うが、シェーンフリース系では回映軸を使う。

採点基準 3 つのうち 1 つでも書いてあれば 10 点、2 つあれば 20 点

$$5 \cos \theta = n/2 \quad (\text{ただし } n \text{ は整数})$$

上の条件をみたすのは $\alpha = 0 (= 360)$ 、60、90、120、180

よって $360/n$ で条件を満たすのは 1、2、3、4、6 となり

5 回軸はみたさない。

採点基準 $\cos$ の式があれば 1 0 点 そこから導かれれば 2 0 点

答えがまちがっていても 図があれば + 5 点