以下の問いに答えよ。100 点以上獲得した場合は 100 点とする。計算過程、思考過程はなるべく残すこと (加点对象)。持ち込みは不可である。

1. 一次元の中の粒子 (30 点)

- (a) ポテンシャル $0 \leq x \leq a$ で $U(x) = -U_0$, $x < 0, x > a$ で $U(x) = \infty$ の下運動する粒子を考える。(時間に依存しない) シュレーディンガー方程式を書け。
 (b) シュレーディンガー方程式を解いて、固有関数とエネルギー固有値を求めよ。固有関数は規格化せよ。

2. 量子力学 (30 点)

- (a) ある系の状態が $\psi(x)$ にあるとき、物理量 A (演算子は $\hat{A}(x)$ で表すことにする) を測定したときの期待値を表す式を書け。
 (b) あるハミルトニアン $H(x)$ の固有値 E_i, E_j および固有関数 $\psi_i(x), \psi_j(x)$ について、 $E_i = E_j$ の場合を考える。この 2 つの固有関数は、... しているという。... を答えよ。
 (c) 物理的に意味のあるハミルトニアン H は最低固有エネルギーを持つ。この時の波動関数はなんと呼ばれるか。またそれ以外の高いエネルギー固有値に対する波動関数をなんと呼ぶか。それぞれ答えよ。
 (d) $\psi(x), \phi(x)$ は $\lim_{x \rightarrow \infty} \psi(x) = 0, \lim_{x \rightarrow \infty} \phi(x) = 0$ 、規格化され、積分かつ、微分が可能な任意の関数としたとき、 $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \left(-i \frac{d}{dx}\right) \phi(x) dx = \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x) \left(-i \frac{d}{dx}\right) \psi(x) dx \right\}^*$ を示せ (ヒント: 部分積分を使う)。
 (e) あるハミルトニアン $H(x)$ の固有値 E_i 、固有関数 $\psi_i(x)$ ($i = 1, \dots, \infty$) が与えられたとき、互いに違う固有値に属する固有関数は直交することを示せ。つまり、 $E_i \neq E_j$ ならば、 $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_j^*(x) \psi_i(x) dx = 0$ である。ただし、必要ならば $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_j^*(x) H(x) \psi_i(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x) H^*(x) \psi_j(x) dx$ および $H^*(x) = H(x)$ であることを使え。

3. 水素原子 (30 点)

- (a) 直交座標系を使って、水素原子のハミルトニアンを書き、各項の意味を説明せよ。
 (b) s 軌道、 p 軌道の概略図を書いて説明せよ。また、主量子数が例えば 7 のとき、 s 軌道、 p 軌道、 d 軌道の数はそれぞれいくつずつか。
 (c) $1s$ 軌道の電子の波動関数が、 $\psi_{1s}(r, \theta, \phi) = \sqrt{\frac{1}{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$ と与えられている時、この波動関数が規格化されていることを示せ (ヒント: 極座標系でのヤコビアンは $r^2 \sin \theta$ である)。
 (d) $1s$ 軌道の電子-核間距離 r の期待値を求めよ。

4. 電子構造 (30 点)

- (a) 直交座標系を使って、ヘリウム原子のハミルトニアンを書き、各項の意味を説明せよ。
 (b) 酸素原子、ナトリウム原子の電子配置を記せ。
 (c) 二原子分子から σ 軌道、 π 軌道の構成の仕方を σ 軌道、 π 軌道の概略図を書きつつ説明せよ。
 (d) リチウム分子 (Li_2)、酸素分子 (O_2)、窒素分子 (N_2) の電子配置を記し、結合次数および、磁性を持つか否か議論せよ。
 (e) フッ化水素分子 (HF) について、電子配置を記せ。ヒント: フッ素の $2p_x, 2p_y$ は水素の $1s$ とは混じらない。

5. 感想 (10 点)

以上