

以下の問いに答えよ。計算過程、思考過程はなるべく残すこと (加点対象)。持ち込みは不可である。

1. 2次元の中の粒子 (10点)

- (a) ポテンシャル $0 \leq x \leq a$ かつ $0 \leq y \leq b$ で $U(x, y) = 0$ 、その他で $U(x, y) = \infty$ のポテンシャル下で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すべて求めよ。固有関数たちは規格化せよ。

2. 量子力学 (45点)

- (a) 「基底状態」、「励起状態」、「期待値の求め方」、「固有値」、「状態の縮退」について、説明せよ (5点)。
- (b) 直交座標系を使って、水素分子のハミルトニアンを書き下し、各項の意味を説明せよ (5点)。
- (c) 運動量演算子について、一次元の場合、 $\hat{p}$ の具体的な形を書け (5点)。
- (d) 運動量演算子はエルミート演算子であることを一次元の場合について示せ (5点)。ヒント: 部分積分を使え。
- (e) 一次元系の場合のハイゼンベルグの原理を示せ。状態 ψ は規格化されており、簡単のため $\hat{x}$ および $\hat{p}$ の期待値 $\langle \hat{x} \rangle$ $\langle \hat{p} \rangle$ はゼロとする。すると、 $\delta x = \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle}$ および $\delta p = \sqrt{\langle \hat{p}^2 \rangle}$ となることに注意しつつ以下の導出を行え (25点)。
- $(\delta x)^2$ を ψ と x を使って表わせ。
 - $\int \left(x \frac{d\psi^*}{dx} \psi + x \psi^* \frac{d\psi}{dx} \right) dx = -1$ を示せ。
 - $\int \frac{d\psi^*}{dx} \frac{d\psi}{dx} dx$ を $(\delta p)^2$ を使って表わせ。
 - 任意の実数 α について、 $\int_{-\infty}^{\infty} \left| \alpha x \psi + \frac{d\psi}{dx} \right|^2 dx \geq 0$ が成り立つことを使って、この不等式を δx および δp を使って表せ。
 - i. から iv. の結果を任意にを使ってハイゼンベルグの原理 $\delta x \delta p \geq \hbar/2$ を示せ。

3. 変分法 (25点)

- 2つの水素原子の原子軌道を $\psi_A(r_A) = e^{-r_A}$, $\psi_B(r_B) = e^{-r_B}$ とし、この2つの原子軌道の線形結合をとって分子軌道を構築し、化学結合を議論したい。ハミルトニアンを $\hat{H}$ とせよ。
- (a) 重なり積分 S 、クーロン積分 α 、共鳴積分 β の表式を書け。
- (b) エネルギー E の表現を α, β, S を使って表わせ。
- (c) エネルギー E を極小化し、それらを α, β, S を使って表わせ。
- (d) エネルギー E を極小化するときの、規格化された波動関数を求めよ。
- (e) 上の設問で求めた波動関数とエネルギーから、化学結合を議論せよ。

4. 電子構造 (20点)

- (a) σ 軌道 σ^* 軌道について、概略図を書き、説明せよ。
- (b) π 軌道、 π^* 軌道について、概略図を書き、説明せよ。
- (c) フッ素分子 (F_2)、炭素分子 (C_2)、酸素分子 (O_2) の電子のエネルギーダイアグラムを記し、結合次数および、磁性を持つか否か議論せよ。
- (d) 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 (0点)