

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. 用語

- 時間に依存しないシュレーディンガー方程式 $H\Psi = E\Psi$ 、について、 H , Ψ , E はなんと呼ぶかそれぞれ答えよ。
- 上記方程式にはエネルギーの一番低い E についての Ψ はなんと呼ぶか。また、それより大きな E についての Ψ はなんと呼ぶか、答えよ。
- 水素原子の量子力学的ハミルトニアンを書き下せ。図を交えつつ、各項の説明をせよ。
- ヘリウム原子の量子力学的ハミルトニアンを書き下せ。図を交えつつ、各項の説明をせよ。
- Pauli の排他原理によると、2つの異なる電子 (Fermi 粒子) は同じ座標を占めることができない。2粒子系の波動関数 $\Psi(x_1, x_2)$ について、Pauli の排他原理を満たすようにせよ。そして「2つの異なる電子は同じ座標を占めることができない」を数式として示せ。

2. 1次元、箱の中の粒子

- 一次元の系を考える。ポテンシャル $U(x)$ について、 $0 \leq x \leq a$ で $U(x) = 0$ 、その他で $U(x) = \infty$ とする。このポテンシャル下で運動する1個の粒子を考える。(時間に依存しない)シュレーディンガー方程式を書け。
- 先程の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。
- 固有関数を最低のエネルギー固有値から3つ図示せよ。さらに腹と節の場所にそれぞれ解るように印を入れよ。
- 同様の問題を三次元で考える。ポテンシャル $U(x, y, z)$ について、 $0 \leq x \leq a$ かつ $0 \leq y \leq b$ かつ $0 \leq z \leq c$ のとき $U(x, y, z) = 0$ 、その他で $U(x, y, z) = \infty$ とする。このポテンシャル下で運動する粒子について、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。
- 上の問題で $a = b = c$ とし、エネルギー準位を求めよ。さらにエネルギー準位を低い順から3つ図示せよ。

3. 分子軌道法、二原子分子について

二つの原子を無限遠に離し、原子軌道から分子軌道を作ることを考える。このとき分子軌道のエネルギーは

$$\begin{vmatrix} H_{11} - E & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} - E \end{vmatrix} = 0$$

の永年方程式を解くことで得られる。

- 等核二原子でさらに同じ軌道エネルギーの場合を考える。永年方程式をとき軌道エネルギーを求め、議論せよ。
- 違うエネルギー準位かつ、 $H_{22} - H_{11} \gg |H_{12}|$ の場合、永年方程式をとき軌道エネルギーを求め、軌道の線形結合のとりやすさについて議論せよ。ただし、 $x \ll 1$ のとき

$$(1 + x)^n \approx 1 + nx$$

であることを用いよ。

- σ 軌道および σ^* 軌道について、概略図を書き、簡単に説明せよ。
- π 軌道および π^* 軌道について、概略図を書き、簡単に説明せよ。
- LiH と O_2 について、(a), (b) の結果を踏まえつつ、エネルギー準位、および電子配置がどうなるか図を交えつつ議論せよ。なお、Liの軌道エネルギーは 1s: -67.4 , 2s: -5.34 , Hは 1s -13.6 , Oは 1s -562.4 , 2s -33.9 , 2p -17.2 (単位は eV) である。

4. 感想 (0点)