

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 (10 点)

- (a) 基底状態、励起状態という言葉の説明せよ。
 (b) 水素分子の量子力学的ハミルトニアンを直交座標系および Born-Oppenheimer 近似を用いつつ書き下せ。図を交えつつ、各項の説明をせよ。

2. 1次元、箱の中の粒子 (20 点)

- (a) 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。
 (b) 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。

3. シュレーディンガー方程式 (10 点)

次の (a)(b) をヒントにし、一次元系でポテンシャル $V(x)$ 下で運動する一粒子系について、時間に依存しないシュレーディンガー方程式を導け。

- (a) 波動方程式は

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi(x, t) - v^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) = 0$$

- (b) 波動方程式の解の形として定在波である $\Psi(x, t) = \Psi(x) \cos(\omega t)$ を仮定せよ。

4. 分子軌道法 (60 点)

以下の問いに答えよ。原子の軌道エネルギーについて、必要ならば以下の表を使うこと (軌道エネルギーの単位は eV である)。

H	-13.6(1s)
Cl	-2854.0 (1s), -288.7 (2s), -219.7 (2p), -29.2 (3s) -13.8 (3p)
S	-23.9 (3s) -11.9 (3p)
Pd	-63.25 (4p) -9.01 (4d)

- (a) 分子軌道の考え方を説明せよ。次の用語を用いること:シュレーディンガー方程式、多電子系、平均場近似。
 (b) σ 軌道、 π 軌道およびその結合性軌道と反結合性軌道について説明せよ (つまり組み合わせて 4 種類の軌道がある)。
 (c) 水素分子は安定して存在するが、ヘリウム分子は安定して存在しない理由を分子軌道の考え方をを用いてエネルギーダイアグラムや図を用いつつ説明せよ。
 (d) HCl 分子と CO 分子の分子軌道をエネルギーダイアグラムや図を用いつつ説明せよ。
 (e) H_2S の分子構造は、 $\text{H}-\text{S}-\text{H}$ の角度がほぼ 90 度である。なぜそうなるか説明せよ。
 (f) Pd に CO 分子を一分子結合させる。結合する理由を Pd, CO の π 軌道のエネルギーダイアグラムと分子軌道の図とを交えつつ説明し、さらにどの原子からどの原子へ電子が供与されるのか、説明せよ。 π 電子逆供与と呼ばれる (何故か「逆」とされる)。尚、Pd の電子配置は $[\text{Kr}]4d^{10}$ である。

5. 感想 (0 点)