

1 下の文章の空欄に適切な語句や式を入れよ。

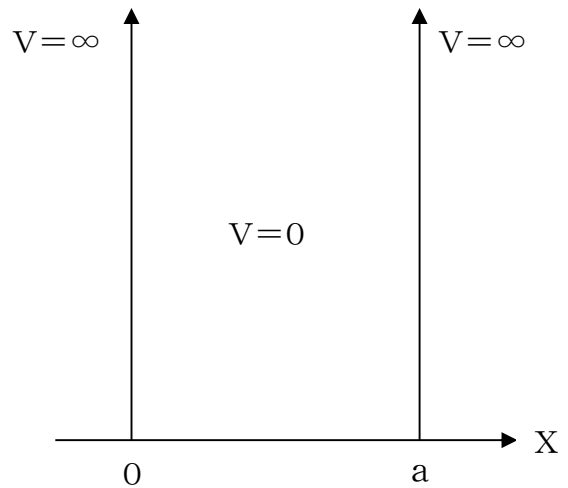
19世紀後半から20世紀前半にかけて、量子力学が構築された。

プランクとアインシュタインは独立に、光の振動数とエネルギーが式(①)で表されることを示した。これによって、光は粒子の様に振る舞うことが明らかとなった。そして、ド・ブロイは運動する粒子は波の性質を持ち、その波長が(②)と表されることを示した。これはド・ブロイ波または(③)と呼ばれる。これらの研究成果により、“物質の運動”と“波動”に密接な繋がりがあることが示され、シュレーディンガーは $H\phi = E\phi$ という波動方程式を作り上げた。この式中の H は(④)であり、 ϕ は(⑤)と呼ばれる。また、(⑥)は粒子を見つける実験を行ったときにその粒子が見つかる確率を表す。ハイゼンベルグは「不確定性原理」を提唱し、(⑦)と(⑧)あるいは(⑨)と(⑩)の厳密な値は同時に測定することができないことを示した。

2 図に示す様な、一次元のポテンシャル井戸に閉じ込められた粒子について以下の問いに答えよ。

ただし、粒子の質量を m とする。

- (1) この粒子が満たすべき Schrödinger 方程式を書け。
- (2) 波動関数を \sin 関数と \cos 関数の和であらわし、 $X=0$, $X=a$ における境界条件から、粒子が取り得るエネルギーを求めよ。
- (3) 波動関数を規格化し、この粒子の状態を記述する波動関数を求めよ。



3 エチレンとブタジエンはどちらがより長い波長の光を吸収すると考えられるか答えよ。

またその理由も説明せよ。

4 水素分子イオン H_2^+ について以下の問いに答えよ。

2つのプロトンをそれぞれA, Bとし、水素原子の規格化された原子軌道関数を ϕ_A , ϕ_B とすると、近似的な分子軌道 ϕ は

$$\phi = c_1 \phi_A + c_2 \phi_B$$

と書ける。

H_2^+ の電子に対するハミルトニアンを H とし、変分法によって c_1 , c_2 についての連立方程式を導き、エネルギーの最低値を求めよ。

ただし

$$H_{AA} = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_A^* H \phi_A dv = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_B^* H \phi_B dv$$

$$H_{AB} = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_A^* H \phi_B dv = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_B^* H \phi_A dv$$

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_A^* \phi_B dv = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_B^* \phi_A dv$$

とする。