

第1問 量子力学において波動関数 ψ で表される状態での物理量 A の期待値 $\langle A \rangle$ は

$$\int \psi^* A \psi d\tau$$

で計算される。長さ L の1次元の井戸型ポテンシャル中を運動している粒子について以下の問いに答えよ。粒子は、もっともエネルギーの低い状態にあり、その波動関数は

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right), \quad \text{for } 0 \leq x \leq L$$

で表されているとする。

必要があれば以下の公式を用いよ。

$$\int x \sin x dx = \sin x - x \cos x, \quad \int x \cos x dx = \cos x + x \sin x$$

- (1) 粒子の位置と運動量の期待値 $\langle x \rangle$ と $\langle p \rangle$ を求めよ。
- (2) (1) の結果の意味するところを簡単に説明せよ。
- (3) 量子力学では、粒子の位置と運動量を完全に決定することができない。これを何と呼ぶか。

第2問 原子に関する以下の問いに答えよ。

- (1) 水素原子の中の電子のエネルギーは、主量子数 n にのみ依存している。エネルギーが n に対してどのような依存性を示すか示せ（比例定数は適当において良い）。
- (2) 電子の状態を完全に指定するためには他の量子数も必要である。どのような量子数が必要か挙げよ。
- (3) エネルギーが等しい異なる状態が複数存在することを何と呼ぶか。
- (4) $n = 3$ に対してはいくつの異なる状態が存在しているか。
- (5) 多電子原子の原子軌道のエネルギーは n が等しくても、もはやすべて同じエネルギーにはならない。どのようにエネルギーが分裂（変化）するか、簡単に説明せよ。

第3問 等核2原子分子の結合に関する以下の問いに答えよ。

- (1) 右の図は等核2原子分子 B_2 、 C_2 、 N_2 、 O_2 、 F_2 の結合のポテンシャル曲線である。それぞれどの分子に対応するか示せ。
- (2) そのような対応を付けた根拠を簡単に説明せよ。
- (3) 上の5つの分子のうち、電子基底状態で常磁性を示すものを挙げよ。
- (4) 常磁性を示す分子には、電子配置にどのような特徴があるか。また、その時に考慮すべき原理（規則）を何と呼ぶか。
- (5) 上の分子のうち、1価の陽イオンになったときに中性分子のときより結合が強くなると考えられるものを挙げよ。

