

speed of light in vacuum	$c_0 = 2.998 \times 10^8$ (m/s)
Planck constant	$h = 6.626 \times 10^{-34}$ (Js)
Dirac's constant	$\hbar = h/2\pi$
elementary charge	$e = 1.602 \times 10^{-19}$ (C)
rest mass of electron	$m = 9.109 \times 10^{-31}$ (kg)
permittivity of vacuum	$\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12}$ (F/m)
Boltzmann constant	$k = 1.381 \times 10^{-23}$ (J/K)
Avogadro constant	$N_A = 6.022 \times 10^{23}$ (mol ⁻¹)

以下の問に答えよ。

【1】光子の量子論的性質についての問い。

波長 1Å、500 nm に相当する光子のエネルギーはそれぞれ何 eV か。

【2】ハミルトニアンに関する問い。

1) 2 個の電子と +2e の電荷を持つ核とから構成される He 原子のハミルトニアンを

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2) + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} \right)$$

と表記したとき、 $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1$ 、 $-\frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1}$ 、 $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}$ の項はそれぞれ何を意味しているか。

2) 3 個の電子と +3e の電荷を持つ核とから成る Li 原子のハミルトニアンはどのように書けるか。

【3】固有関数・固有値に関する問い。

微分演算子 $A = d^2/dx^2$ について、方程式 $Af = af$ を満たすような固有関数 $f(x)$ ，固有値 a を求めよ。

【4】関数近似に関する問い。

3 次元スカラー関数 $g(x, y, z) = (1 - e^{-x})(1 - e^{-y})(1 - e^{-z})$ を $|x| \ll 1$ ， $|y| \ll 1$ ， $|z| \ll 1$ の条件で近似する式を x, y, z のそれぞれについてすべて 1 次である項までを示せ。

【5】術語説明に関する問い。

以下の術語を簡単に説明せよ。

- 1) 原子軌道
- 2) Pauli の原理
- 3) LCAO MO 近似

【6】理解度についての調査。

まず、学部の人に「量子化学」またはそれに類する講義を履修したことがあるか否かを回答し、続けて、自分自身が「量子化学」をどの程度理解しているつもりであるか、についてコメントせよ。

注意：冒頭に、所属研究室名、学年、学籍番号、氏名 を明記し、2cm程度の空白を空けてから、解答せよ。