2007 年 11 月 27 日

平成 19 年度物理化学Ⅲ中間試験問題

問１　身長 180 cm で体重 100 kg の人が時速 10 km/h で走っている。この人の波長を求めよ。ただし，プランク定数は h = 6.63 x 10^{-34} Js であり，エネルギーの単位換算として[J] = [kg m^2 s^{-2}]である。（この計算から，我々の日常生活では量子力学が無視できることを実感できるであろう。）

問２　x 軸にそった１次元の箱の中にある粒子について，以下の問に答えよ。ただし，この粒子の波動関数は量子数を n として $\Psi_n(x)=\left(\frac{2}{L}\right)^{1/2}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ で表され，粒子の存在する領域は， $0 \le x \le L$ である。

①この波動関数を得るために必要な境界条件はどのようなものであるか述べよ。

②　n=3 の時の粒子の存在確率の位置による変化を描け。

③ この粒子の直線運動の平均値はゼロであることを証明せよ。必要であれば，不定積分の公式 $\int \sin ax \cos ax dx = \frac{\sin^2 ax}{2a}$ を用いよ。

④　③で示したゼロの平均値が持つ意味を説明せよ。

⑤　この粒子のエネルギーは $E=\frac{n^2h^2}{8mL^2}$ で表される。m=9.1×10^{-31} kg、L=1.0 nm の場合、この粒子を n＝4 から n＝5 の状態に励起するために必要な光の波長を計算せよ。ただし光速は 3.0×10^8 m/s とせよ。

⑥　粒子の質量が小さく箱の壁の高さが有限で壁が薄い場合には、箱の中に閉じこめられた粒子は箱の外に漏れ出すことが可能である。この現象をなんと呼んでいるか？

問３

３次元の回転を行っている粒子ではオービタル角運動量 ℓ とオービタル磁気量子数 m_ℓ により許される波動関数が指定される。

①　ℓ 、m_ℓ はそれぞれどのような値をとりうるか。

②　回転運動ではエネルギーだけでなく角運動量も量子化されているため回転体の配向も量子化されている。ℓ＝3 の場合にはその配向は何種類あるか？

③　角運動量の大きさは $\{\ell(\ell+1)\}^{1/2}\hbar$ 、z 成分が $m_\ell\hbar$ で表される。ℓ＝3、m_ℓ ＝2 の場合、この回転は z 軸に対して約何度傾いているか。

解答例

問 1

ド・ブローイの式，$\lambda = h/p = h/mv$ を計算する。

運動量は，p = 100 [kg] x (10 x 10^3/ 3600)[m s^{-1}] = 2.77_8 x 10^2 [kg m s^{-1}]

したがって，

λ = 6.63 x 10^{-34} [J s] / 2.77_8 x 10^2 [kg m s^{-1}] = 2.38_6 x 10^{-36} [m]

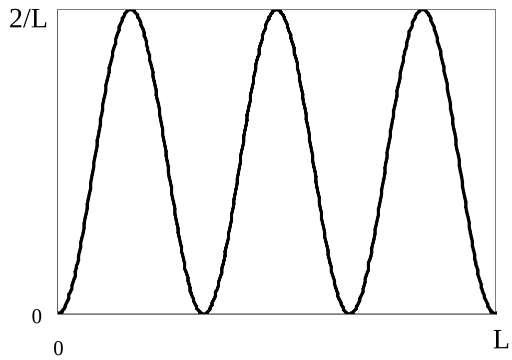
（つまり，波長は身長の凡そ 10^{-36} 倍であり，日常生活では無視できる。）

問 2 「p. 339, 自習問題 12.1」

① 箱の両端で波動関数が 0 となること。

② 粒子の存在確率は波動関数を 2 乗した

$\Psi_n(x) = \frac{2}{L}\sin^2\left(\frac{3\pi x}{L}\right)$ である。この関数の概形を描くと右の図のようになる。



③ 求めるものは，運動量 p_x に対する期待値<p_x>である。

$$< p_x >= \frac{\hbar}{i}\int \Psi * \frac{d}{dx}\Psi dx$$

これに波動関数と積分範囲を代入して計算する。

$$< p_x >= \frac{\hbar}{i}\int_0^L \Psi_n(x)\frac{d}{dx}\Psi_n(x)dx$$

$$= \frac{2n\pi\hbar}{iL^2}\int_0^L \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right)dx$$

$$= \frac{2n\pi\hbar}{iL^2}\left[\frac{L}{2n\pi}\sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\right]_0^L$$

$$= 0$$

④ 一次元の粒子は正逆の方向にそれぞれ等しい確率で運動することを意味する。この結果として，両方向の運動量が相殺され，ゼロになる。

⑤ $\Delta E = \frac{h^2}{8mL^2}(5^2 - 4^2) = \frac{9h^2}{8mL^2} = \frac{9 \times 6.63^2 \times 10^{-68}}{8 \times 9.1 \times 10^{-31} \times 1^2 \times 10^{-18}} = 5.43 \times 10^{-19}$ J これとエネルギーの等しい光の波長は $\lambda = \frac{6.63 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8}{5.43 \times 10^{-19}}$ ≒3.7×10^{-7}m　従って約 370ｎｍ

⑥トンネル現象

問 3

① ℓ : 0, 1, 2. . . .　m_ℓ : $-\ell$、$-\ell+1$、. . .　$\ell-1$、ℓ

② m_ℓ の数だけあるので、$2\ell+1$=7 個

③ ℓ＝3 の場合大きさは $\sqrt{12}\hbar$、z 成分は $2\hbar$ である。従って、z 軸に対して $\sin\theta = \frac{2\hbar}{\sqrt{12}\hbar}$ となる θ をなして回転している。すなわち、約 35°