2008年11月25日

平成20年度物理化学Ⅲ中間試験問題

問1　原子的な尺度でみると，粒子は波動の特性をもち，波動は粒子の特性をもつ。この粒子と波動の二重性について，以下の問に答えよ。

① 直線運動量 p をもつ粒子の波長 λ を表すド・ブローイの関係式を書け。ただし，プランク定数を h とせよ。

② 直線運動量 p で運動する質量 m の粒子について，そのエネルギー E を p と m で表せ。

③ 静止質量 m_e (kg)の電子を V (V)の電位差で加速した場合，この加速された電子の波長 λ (m)を求める式を導出せよ。ただし，電子の電荷を e (C)とし，プランク定数を h (Js)で表せ。

問2　$x=0$ と $x=L$ にある二つの壁の間に閉じ込められた質量 m の粒子について，以下の問に答えよ。

① 一般にこの粒子の波動関数 $\Psi_n(x)$ は規格化定数を C とおいて次式で表わされる。

$$\Psi_n(x) = C\sin\frac{n\pi x}{L} \qquad (n = 1,2\cdots)$$

この場合の規格化定数 C を算出せよ。必要であれば，不定積分の公式

$\int \sin^2 ax dx = \frac{1}{2}x - \frac{1}{4a}\sin 2ax + k$ （$k=$ 定数)を用いよ。

② 量子数 n をもつ粒子の直線運動の期待値を算出せよ。ただし，x軸上で直線運動する粒子の運動量演算子は $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ で表わされる。必要であれば，不定積分の公式 $\int \sin ax \cos ax dx = \frac{1}{2a}\sin^2 ax$ を用いよ。

問3　半径rの円周上での二次元の回転運動について以下の問に答えよ。

① 二次元の回転で許される波動関数の波長λにはどのようなものがあるか。量子数には m_ℓ を用いて表せ。このとき m_ℓ のとりうる範囲も述べること。

② 二次元の回転の波動関数は回転角 ϕ とオービタル磁気量子数 m_ℓ を用いて $\Psi_{m_\ell}(\phi) = \frac{e^{im_\ell\phi}}{(2\pi)^{1/2}}$ とあらわされる。また、オービタル角運動量 l_z の演算子 $\hat{l}_z$ は $\hat{l}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}$ であらわされる。オービタル角運動量 l_z を求めよ。

③ 回転をしている粒子がある回転角 ϕ の位置で見つかる確率を求めよ。

④ ②，③で得られる結果はどのような原理の例であると言えるか。

問 4　ポテンシャルエネルギーが$V=\frac{1}{2}kx^2$（k は力の定数）で表される振動子の波動関数は

$\Psi_v = N_v H_v(y)\ e^{-y^2/2}$、エネルギーは$\left(v+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$（$v$=0，1，2，・・・、ただし、$\omega=\left(\frac{k}{m}\right)^{1/2}$：$m$

は振動子の質量）、$y=\frac{x}{\alpha}$、$\alpha=\left(\frac{\hbar^2}{mk}\right)^{1/4}$である。また、$N_v = \frac{1}{(\alpha\ \pi^{1/2} 2^v v!)}$，　、

$H_0(y)=1,\ H_1(y)=2y,\ H_2(y)=4y^2-2$　である。このとき次の問に答えよ。

① v=0、1、2 の時の粒子の存在確率を示すグラフの概形（極大値や節の位置を計算する必要はない）を横軸に y を用いて描け。また、それぞれ節の数は何個あるか答えよ。

② 振動の折り返し点では全エネルギーがポテンシャルエネルギーと等しくなることを利用してv=1 の時の振動の中心から振動の折り返し点までの距離x_{tp}を求めよ。

③ ②で粒子が両側の折り返し点よりも振動の中心に近い場所のどこかで見つかる確率をあらわす式（計算不要）をx_{tp}を用いて書け。なお、変数にはyを用いればよい。

④ ③を計算して得られる確率は約 0.84 となり、古典的に許されない領域にも粒子が見いだされる確率があることがわかる。この現象をなんと呼ぶか。

解答例

問 1

① $\lambda = \dfrac{h}{p}$

② $E = \dfrac{p^2}{2m}$

③（see, p. 314, 例題 11-2）

$E = eV = \dfrac{p^2}{2m_e}$ だから， $p = (2m_e eV)^{1/2}$。したがって， $\lambda = \dfrac{h}{(2m_e eV)^{1/2}}$

問 2

① （see, p. 337, （c）規格化の項）

$$\int_0^L \Psi_n(x)^2 dx = C^2 \int_0^L \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = C^2 \left[\frac{1}{2}x - \frac{\sin 2n\pi x/L}{4n\pi/L} \right]_0^L = C^2 \left\{ \left(\frac{1}{2}L - \frac{\sin 2n\pi}{4n\pi/L} \right) - (0-0) \right\} = C^2 \frac{L}{2} = 1$$

したがって， $C = \left(\dfrac{2}{L} \right)^{1/2}$

② （see, p. 339, 自習問題 12-1, 昨年度も出題）

求めるものは，運動量p_xに対する期待値$\langle p_x \rangle$である。

$$\langle p_x \rangle = \frac{\hbar}{i} \int \Psi^* \frac{d}{dx} \Psi dx$$

これに波動関数と積分範囲を代入して計算する。

$$\langle p_x \rangle = \frac{\hbar}{i} \int_0^L \Psi_n(x) \frac{d}{dx} \Psi_n(x) dx = \frac{2n\pi\hbar}{iL^2} \int_0^L \sin(\frac{n\pi x}{L}) \cos(\frac{n\pi x}{L}) dx = \frac{2n\pi\hbar}{iL^2} \left[\frac{L}{2n\pi} \sin^2 \left(\frac{n\pi x}{L} \right) \right]_0^L$$

$= 0$

問 3

① 周期境界条件より波長の整数倍が円周に等しくなる必要がある。従って $\lambda = \dfrac{2\pi r}{m_\ell}$ 、ただし、波長が無限大の場合も可能なので m_ℓ は 0, 1, 2,,,, である。（回転の向きまで考慮すると 0,±1,±2・・・）

② 運動量の演算子に関する固有方程式から求めればよい。すなわち $\hat{l}_z \Psi_{m_\ell}(\phi) = \hat{l} \Psi_{m_\ell}(\phi)$ となる l_z を求めればよい。従って、 $\dfrac{\hbar}{i} \dfrac{\partial}{\partial \phi} \dfrac{e^{im_\ell \phi}}{(2\pi)^{1/2}} = \dfrac{\hbar}{i} im_\ell \dfrac{e^{im_\ell \phi}}{(2\pi)^{1/2}} = m_\ell \hbar \dfrac{e^{im_\ell \phi}}{(2\pi)^{1/2}} = l_z \dfrac{e^{im_\ell \phi}}{(2\pi)^{1/2}}$ これより、オービタル角

運動量は$m_\ell\hbar$となる。

③　粒子の存在確率は$\Psi_{m_\ell}(\phi)^*\Psi_{m_\ell}(\phi)=\frac{e^{-im_\ell\phi}}{(2\pi)^{1/2}}\frac{e^{im_\ell\phi}}{(2\pi)^{1/2}}=\frac{1}{2\pi}$すなわちどの角度に置いてもおなじ存在確率$\frac{1}{2\pi}$である。

④　不確定性原理

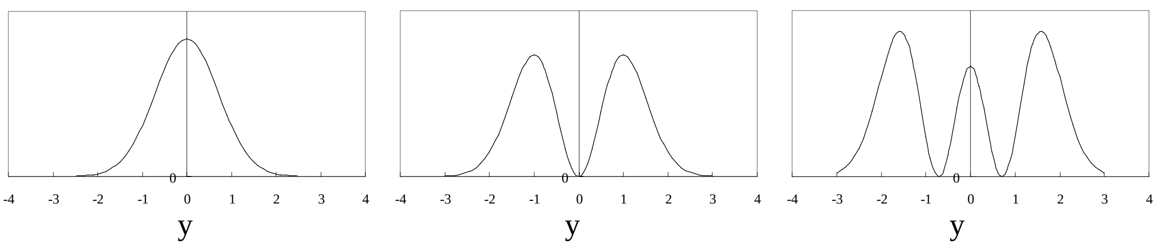
問 4

①　$\Psi_0=\mathrm{N}_0\mathrm{H}_0(\mathrm{y})\mathrm{e}^{-\mathrm{y}^2/2}=\frac{1}{(\alpha\pi^{1/2})}\mathrm{e}^{-\mathrm{y}^2/2}$ より $|\Psi_0|^2=\frac{1}{\alpha^2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{y}^2}$、

$\Psi_1=\mathrm{N}_1\mathrm{H}_1(\mathrm{y})\mathrm{e}^{-y^2/2}=\frac{2y}{(2\alpha\pi^{1/2})}\mathrm{e}^{-y^2/2}=\frac{y}{\alpha\pi^{1/2}}\mathrm{e}^{-y^2/2}$ より $\left|\Psi_1{}^2\right|=\frac{y^2}{\alpha^2\pi}\mathrm{e}^{-y^2}$

$\Psi_2=\mathrm{N}_2\mathrm{H}_2(\mathrm{y})\mathrm{e}^{-y^2/2}=\frac{4y^2-2}{(4\times2\alpha\pi^{1/2})}\mathrm{e}^{-y^2/2}=\frac{2y^2-1}{4\alpha\pi^{1/2}}\mathrm{e}^{-y^2/2}$ より $|\Psi_2|^2=\frac{(2y-1)^2}{16\alpha^2\pi}\mathrm{e}^{-y^2}$

これの概形は$e^{-y^2/2}$がガウス型関数（釣鐘状）であることを考慮し、適当な数値を代入して計算すると下記のようになる。左から v=0,1,2



概形から節の数はそれぞれ0，1，2 個である。

②　v=1 の場合のエネルギーは$\left(1+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega=\frac{3}{2}\hbar\omega$、また折り返し点でこれがポテンシャルエネルギー$V=\frac{1}{2}kx^2$と等しくなるので、$\frac{1}{2}kx_{tp}{}^2=\frac{3}{2}\hbar\omega$。従って、$x_{tp}=\sqrt{\frac{3\hbar\omega}{k}}$となる。

③　存在確率はある点における確率を- x_{tp}からx_{tp}までの範囲で加え合わせたものすなわち、

P=$\int_{-x_{tp}}^{x_{tp}}\left|\Psi_1{}^2\right|dy$ である。

④　トンネル現象