

## 平成21年物理化学Ⅲ中間試験問題

以下の問題1～4に答えよ。ただし問題4は4-1または4-2から1問選択せよ。

**問題 1** 以下の問いに答えよ

① 電子を200kVで加速した場合の波長（ド・ブローイ波長）を求めよ。必要なら電子の質量  $m = 9.31 \times 10^{-31} (\text{kg})$  及び  $h = 6.63 \times 10^{-34} (\text{J}\cdot\text{s})$  を用いること。

② 以下に示す4個の関数  $f(x)$  の中から、演算子  $d/dx$  の固有関数であるものを全て選び、その固有値を求めよ。

$$f(x) = e^{ax}, \quad f(x) = e^{ax^2}, \quad f(x) = \sin ax, \quad f(x) = \cos ax$$

**問題 2** 波動関数についての以下の文章を読み問いに答えよ。

量子力学では粒子の運動は波動関数を用いて表されるが、これはシュレーディンガー方程式に従う。シュレーディンガー方程式の数学的な解は無数にあるが、これが物理的意味を持つには（ア）条件を満たす必要があり、このため粒子の持つエネルギーが（イ）されることになる。例えば長さ  $L$  の1次元の箱

の中で運動している粒子の波動関数は  $\psi = \left(\frac{1}{2i}\right)\left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \left(e^{i\frac{n\pi}{L}x} - e^{-i\frac{n\pi}{L}x}\right)$  ( $x: 0 \sim L, n=1,2,3,\dots$ ) で表わ

され、エネルギーは  $E = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$  となり、（イ）されていることがわかる。 $n=2$  の場合、長い間続けてこの粒子の運動量の観測を行うと右向きに進む運動量（ウ）の粒子と左向きに進む運動量（エ）の粒子を（オ）

対（カ）の割合で検出できることになる。さらにこの波動関数は  $\psi = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$  と書きなおすこ

とができ、 $n=4$  の場合、これは波長が（キ）の波を表し、この場合粒子の存在確率が極大となる場所が  $x$  軸上に（ク）箇所、節は（ケ）つあることになる。

① （ア）～（ケ）に適当な語句・記号もしくは数値を入れよ。

② （ア）条件にはどのようなものがあるか？ 列挙せよ。

**問題 3** 調和振動子の波動関数  $\psi_v(x) = N_v H_v(y) e^{-y^2/2}$  を規格化し、規格化係数  $N_v$  を求めよ。ただし、

$x$  と  $y$  は  $y = x/\alpha$  の関係にあり、 $H_v(y)$  はエルミート多項式である。なお、エルミート多項式の積分

$\int_{-\infty}^{\infty} H_{v'} H_v e^{-y^2} dy$  は、 $v' \neq v$  のときに0であり、 $v' = v$  のときに  $\pi^{1/2} 2^v v!$  となる。解答欄には途中の計算式も記入せよ。

**問題 4-1** 二次元の回転運動に関する以下の文章において、空欄（ア）～（カ）に適する数式または語句を書け。

いま、 $xy$  平面内で半径  $r$  の円形の通路を動く質量  $m$  の粒子を考える。通路内のポテンシャルエネルギーは  $V = 0$  であるから、全エネルギー  $E$  は運動量  $p$  を用いて  $E =$ （ア）と書ける。古典力学によると  $z$  軸まわりの（イ）は  $J_z = \pm pr$  であり、 $I = mr^2$  は通路上にある質点の（ウ）であるから、 $J_z$  と  $I$  を用いてエネルギーは  $E =$ （エ）と書ける。

ド・ブローイの関係式を（イ）に適用すると  $J_z = \pm hr/\lambda$  となり、この質点の波動性が表現される。この波動関数が円運動の周回を繰り返す際に直前の一周と同じになれば、そのときに限って許される解が存在すると考えれば、その条件は量子数  $m_l$  ( $0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ) を導入して  $\lambda =$ （オ）で与えられる。したがって、（イ）は  $m_l$  とプランク定数を用いて  $J_z = \pm hr/\lambda =$ （カ）と書ける

**問題 4-2** 質量  $m$  の粒子が、力の定数  $k$  で振動している場合、そのエネルギー準位は量子数を  $\nu$

( $0, 1, 2, \dots$ ) として  $E_\nu = (\nu + \frac{1}{2})\hbar\left(\frac{k}{m}\right)^{1/2}$  であらわされる。このとき以下の問いに答えよ。

- ①  $\nu = 0$  のときの最低エネルギーは  $0$  ではない。これを何と呼ぶか?
- ② ①のように最低エネルギーが  $0$  とはならないのはなぜか?
- ③ 一酸化炭素  $\text{CO}$  に  $4.6 \mu\text{m}$  の波長の赤外線照射すると振動のエネルギーが励起された。 $\text{CO}$  の振動の力の定数を求めよ。ただし、光速は  $3.0 \times 10^8 \text{ (m/s)}$ 、質量には実効質量  $1.1 \times 10^{-26} \text{ (kg)}$  を用いればよい。

解答

問題 1

① 電子を 200kV で加速した場合の波長 (ド・ブローイ波長) を求めよ。必要なら電子の質量  $m = 9.11 \times 10^{-31} (kg)$ 、単位電荷  $e = 1.61 \times 10^{-19} (C)$  及び  $h = 6.63 \times 10^{-34} (J \cdot s)$  を用いること。

$$eV = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \text{ より } p = \sqrt{2meV} \text{ また、 } \lambda = \frac{h}{p} \text{ より}$$

$$\lambda = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{\sqrt{2 \times 9.11 \times 10^{-31} \times 1.61 \times 10^{-19} \times 200 \times 10^3}} = 2.7 \times 10^{-12} m \text{ 従って、 } 2.7 \text{ pm}$$

②  $f(x) = e^{ax} : d(e^{ax})/dx = ae^{ax}$  これは固有関数であり、固有値は  $a$ 。

$f(x) = e^{ax^2} : d(e^{ax^2})/dx = 2axe^{ax^2}$  これは固有関数ではない。

$f(x) = \sin ax : d(\sin ax)/dx = a \cos ax$  これは固有関数ではない。

$f(x) = \cos ax : d(\cos ax)/dx = -a \sin ax$  これは固有関数ではない。

問題 2

① (ア) : 境界、(イ) : 量子化、(ウ) :  $\hbar \frac{n\pi}{L} = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{L} = \frac{h}{L}$ 、(エ) :  $\frac{h}{L}$ 、(オ) : 1、(カ) : 1、(キ) :  $\frac{L}{2}$ 、

(ク) : 4 (ケ) : 5 (0 を横切っていない端の点を含めない場合 3)

② 有限、1 価、連続、導関数が連続

問題 3

【解答案】 p.349 の例題 12.3

$$N_v = 1/(\alpha\pi^{1/2} 2^v v!)^{1/2}$$

問題 4-1

【解答案】 p.353 を参照

(ア)  $p^2/2m$

(イ) 角運動量

(ウ) 慣性モーメント

(エ)  $J_z^2/2I$

(オ)  $2\pi/m_l$

(カ)  $m_l h/2\pi$  または  $m_l \hbar$

問題 4-2

① 零点エネルギー

② 粒子は閉じ込められているので、位置が完全に不確定にはならない。従って不確定性原理より運動エネルギーが 0 すなわち運動量 0 にはならない。

③ 準位間隔は  $\hbar\left(\frac{k}{m}\right)^{1/2}$  である。したがって  $\frac{\hbar}{2\pi}\left(\frac{k}{m}\right)^{1/2} = h\frac{c}{\lambda}$  より

$$k = \left(\frac{2\pi c}{\lambda}\right)^2 m = \left(\frac{2 \times \pi \times 3 \times 10^8}{4.6 \times 10^{-6}}\right)^2 \times 1.1 \times 10^{-26} = 1.8 \times 10^3 (N/m)$$