



構造化学 No.2

理学部化学科 岡林潤
(スペクトル化学研究センター)
2016.10.12

【12】《微分演算子》

1. 微分演算子 $\frac{d^2}{dx^2}$ について, $f(x) = Ae^{ax}$ と $f(x) = A\sin ax$ の固有値を求めよ.
2. 運動量の z 方向の演算子 $\hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$ の固有関数を求めよ.

【13】《ブタジエンの電磁波吸収》

一次元井戸型ポテンシャル (幅 a) を使って, ブタジエンの π 電子が吸収する電磁波を調べてみよう. ただし, 電子の質量を m とし, $k > 0$ とする.

1. 電子が 0 から a の範囲にあるときの Schrödinger 方程式を求めよ.
2. 一般解 $\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ を代入し, 成り立つべき条件式を求めよ.
3. $x = 0$ での境界条件を使って, A と B の関係を求めよ.
4. $x = a$ での境界条件を使って, k の満たすべき条件を求めよ.
5. プランク定数 h , m , a , 自然数 n を用いて, エネルギー固有値を式で表せ.
6. ブタジエンの π 電子はいくつか.
7. π 電子が吸収する電磁波のエネルギーの中で最小のものを式で表せ.
8. その電磁波の波長を求めよ.
9. その電磁波の波長はエチレンの場合と比べて長いか短い? また, その理由を簡潔に記せ.

【14】《円周上を運動する粒子》

半径 a の円周上を自由に運動する粒子 ($r = a$ のときのポテンシャルエネルギー $U(r) = 0$; $r \neq a$ のとき $U(r) = \infty$) の波動関数とエネルギー固有値を求める.

1. 粒子の質量を m , 接線方向の運動量を p として, 古典論で運動エネルギーを求めよ.
2. 接線方向の運動量 p は演算子 $(-i\frac{\hbar}{2\pi} \frac{d}{a d\theta})$ で置き換えることができる. 運動エネルギーを演算子で表わせ.
3. 波動方程式を求めよ.
4. 波動方程式の解を $A\exp(i\lambda\theta)$ とする. エネルギー固有値を式で表わせ.
5. 規格化定数 A を求めよ. (ヒント; 確率を1周積分すると1になる)

- 境界条件を式で表わせ。(ヒント ; 1周するとともに戻る)
- 境界条件から λ の取りうる値を示せ.
- 以上の結果をベンゼンの π 電子にあてはめ, エネルギー準位を模式的に表わせ.

【15】 《円周上を運動する粒子》

質量 m の質点が, 原点との距離 r を一定に保ったまま xy 平面内で自由回転している.

- 質点の運動量の x 成分を p_x , y 成分を p_y として, この系のハミルトニアン \mathcal{H} を記せ.
- 運動量について

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$$

の置き換えに従って, \mathcal{H} の微分演算子による表式を求めよ.

- 座標をデカルト座標 (x, y) から極座標 (r, θ) に変換する. このときの座標微分演算子は,

$$\frac{\partial}{\partial x} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}, \quad \frac{\partial}{\partial y} = \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta}$$

のように変換される. これらの関係を用いて, 前問 2. の \mathcal{H} を極座標表示に変換せよ.

- 前問 3. の \mathcal{H} を用いて Schrödinger 方程式を書け. 固有関数として $\psi(\theta)$, エネルギーとして E を用いよ.
- $\psi(\theta) = Ae^{i\lambda\theta}$ の形の関数を前問 4. の Schrödinger 方程式に代入し, エネルギー E を λ の関数として求めよ.
- $\psi(\theta)$ が一価関数であるという条件を満たすために, λ が満足しなければならない条件を求めよ.
- この質点の角運動量 \mathcal{L} は z 方向を向き, その大きさは, $\mathcal{L} = xp_y - yp_x$ である. \mathcal{L} の微分演算子による表式を極座標表示で求めよ.
- λ の物理的意味を述べよ.

【16】 《期待値》

$\psi(x) = (a/\pi)^{1/4} e^{-ax^2}$ が $\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} kx^2$ の固有関数になるように a の値を定めよ. 次に, この固有関数を用いて, \mathcal{H} の期待値を求めよ.

- 今回のレポートの締切は 10 月 26 日 (水) 14:55.
- 表紙は不要です. 氏名の記入を忘れずに.
- コメント, 感想, 質問等も記載してください.
- <http://www.chem.s.u-tokyo.ac.jp/users/spectrum/lecture16.html> に解答を載せます.
(理学部化学科の web → スペクトルセンター web → 講義)