

[物理化学基礎]

(1) 光照射による金属表面からの電子の放出は光電効果と呼ばれる。光電効果に関して以下の問いに答えよ。

(a) アインシュタインの光量子仮説を裏付ける光電効果の特徴を光の「振動数」、「強度」を使って50字以内で述べよ。

(b) 光電子の最大の運動エネルギーを E 、光の振動数を ν 、金属の仕事関数を ϕ とするとき、光電効果に対するエネルギー保存の式を示せ。ただし、プランク定数を h とする。また、金属の仕事関数 ϕ の物理的な意味を100字以内で説明せよ。

(c) 金属ナトリウムに光を照射したとき、放出される電子の最大運動エネルギーは、光の波長 $\lambda = 300 \text{ nm}$ の場合は $3.695 \times 10^{-19} \text{ J}$ 、 $\lambda = 400 \text{ nm}$ の場合は $2.041 \times 10^{-19} \text{ J}$ である。これらのデータから、(ア) プランク定数 ($\text{J} \cdot \text{s}$)、(イ) 仕事関数 (J) をそれぞれ有効数字3桁で求めよ。ただし、光速を $c = 3.00 \times 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ とする。

(2) 低温におけるアンモニア分子の赤外吸収スペクトルは、 968.32 cm^{-1} と 931.71 cm^{-1} の2つの吸収線からなる。この2本の吸収線は、アンモニア分子の大振幅振動に関する。この大振幅振動は、3つの水素原子のなす正三角形の内心を通り、その正三角形に垂直な直線 (x 軸) 上を動く窒素原子の、3つの水素原子に対する相対運動と見なすことができる。

(d) 上に記されたアンモニア分子の大振幅振動は反転運動と呼ばれる。窒素原子の位置が3つの水素原子のなす正三角形の内心にあるとき、その位置を $x = 0$ とする。この反転運動に対するポテンシャルエネルギー $V(x)$ の概形を、その特徴が分かるように描け。

(e) 上記2つの赤外吸収バンドの形成は、4つの振動固有状態を使って説明することができる。図1に、これら4つの振動固有状態を表す波動関数(実関数)の概形を示す。4つの固有状態を(ア)、(イ)、(ウ)、(エ)、その固有エネルギーを、それぞれ $E(\text{ア})$ 、 $E(\text{イ})$ 、 $E(\text{ウ})$ 、 $E(\text{エ})$ とするとき、これらのエネルギーの大小関係について不等号を用いて表せ。

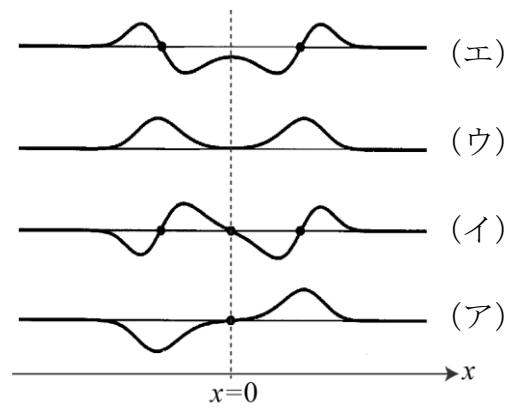


図1 大振幅振動に対する振動固有関数の模式図. 節の位置を・で示した. なお、各(ア)～(エ)の図における縦軸は、振動固有関数の振幅をあらわす。

(f) エネルギーの低い2つの振動固有状態のエネルギーをそれぞれ、 E_0 、 E_1 ($E_1 > E_0$)、固有関数をそれぞれ、 $\varphi_0(x)$ 、 $\varphi_1(x)$ とする. これらの固有関数を初期値 ($t = 0$)として、時刻 $t (> 0)$ における波動関数 $\psi_0(x, t)$ と $\psi_1(x, t)$ をそれぞれ求めよ. ただし、時間依存のシュレーディンガー方程式は次式で与えられる.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H} \psi(x, t)$$

ここで、 \hat{H} は大振幅振動を記述する時間に依存しないハミルトニアンであり、 \hbar はプランク定数を h とするとき、 $\hbar = h/(2\pi)$ である.

(g) 時刻 $t = 0$ における固有関数の重ね合わせ状態を

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_0(x, 0) + \psi_1(x, 0)]$$

とする. 時刻 $t (> 0)$ における $P(x, t) = |\psi(x, t)|^2$ を計算せよ.

(h) (g) で求めた $P(x, t)$ の周期 T を求めよ.