

※いずれかを○で囲んでください		必ず○で囲んでください	
解 答 用 紙		問 題 用 紙	
不要 (直接記入)	1枚もの	計算 用紙	両面 印刷
	2枚もの	要・不要	ホチキス 使用
		要・不要	要・不要

イ.試験実施上の注意事項(例えばノート使用可否等)をご記入下さい  
 ロ.試験の実施時間は、90分の時間内で各担当教員のご判断により設定してください。  
 ハ.問題をご記入の際は万年筆又はボールペン(黒)でご記入下さい  
 ※ 細かい切り貼りは、はがれ落ちる可能性があるため、おやめ下さい  
 ニ.問題用紙が複数枚ある場合、両面印刷、ホチキス止めを希望する場合は「要」に○を、  
 希望しない場合は「不要」に○をしてください。  
 ※ 記入がない場合は「不要」と判断しますので、ご敬慮ください。

印刷枚数
------

科目名	材料量子力学	対象	2TM	学 部	学 科	学籍 番号	評 点
平成 28 年 月 日 ( )	時 限	担当	田村 隆治	学 年	氏 名		
試験 時間	60 分	注 意 事項	1.筆記用具以外持込不可 2.下記のみ参照・確認可 [電卓]				

$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}$

以下の問いに答えなさい。必要なら、次の数値、公式、関係式を用いよ。 $h = 2\pi\hbar = 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}$ ,  
 $c = 3.00 \times 10^8 \text{ m/s}$ ,  $m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$ ,  $k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ ,  $N_A = 6.02 \times 10^{23} / \text{mol}$ ,  
 $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ ,  $E_l = l(l + 1)\hbar^2/2I$ ,  $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\pi/a}$ ,  $\lambda_m T = 2.90 \times 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{K}$

- 1 以下の各問いに答えよ。
- (1) 室温(300K)における  $\text{N}_2$  分子の平均の運動エネルギーは何 J か。
- (2) 室温(300K)における  $\text{N}_2$  分子のド・ブローイ波長は何 nm か。ただし、N 原子の原子量を 14 とする。
- (3) 太陽放射スペクトルは 500nm 付近にピークを有する。太陽の温度 (K) を推定せよ。
- (4) 中心カポテンシャルのもとでの 1 電子状態は  $|nlm\rangle$  と表される。この状態が満足する 3 つの固有方程式を書け。ただし、エネルギー固有値は  $E_{nl}$  とせよ。用いた記号の定義を述べること。

- 2 エルミート演算子に関する以下の問いに答えよ。ただし、エルミート演算子  $\hat{P}$  は任意の関数  $\Psi$ 、 $\Phi$  に対して、次の関係を満たす演算子として定義される。 $(\Psi|\hat{P}|\Phi)^* = (\Phi|\hat{P}|\Psi)$
- (1) エルミート演算子の固有値が実数となることを示しなさい。
- (2) エルミート演算子の期待値が実数となることを示しなさい。
- (3) 固有値の異なる固有関数が直交することを示しなさい。
- (4)  $\langle ml|l'm'\rangle$  の値はいくらか。ただし、 $|lm\rangle$  は球面調和関数  $Y_{lm}$  を表し、また、規格化されているものとする。

- 3 長さ  $L$  の一次元の箱に閉じ込められた質量  $m$  の自由粒子に関して以下の問いに答えなさい。ただし、ポテンシャルエネルギーは  $V(x) = 0$  ( $0 \leq x \leq L$ ),  $+\infty$  ( $x < 0, x > L$ ) で与えられるものとする。
- (1) 規格化定数を  $C$  としてエネルギー固有関数を求めよ。
- (2) エネルギー固有値を求めよ。
- (3) 規格化定数  $C$  を求めよ。
- (4) 箱の中の自由粒子の任意の状態  $\Psi$  はどのように表されるか。

- 4 一次元調和振動子のシュレディンガー方程式は次の式で与えられる。以下の問いに答えなさい。
- $$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2 \right) \Psi = E\Psi \quad m: \text{粒子の質量}, k: \text{力の定数}$$

- (1) 基底状態の波動関数は  $\Psi_0 = Ae^{-\alpha x^2}$  と表される。規格化因子  $A$  を求めなさい。 $a$  を用いて表せ。
- (2)  $\Psi_0$  がシュレディンガー方程式の固有関数となるように  $a$  の値を決定しなさい。 $k, m$  を用いて表せ。
- (3)  $\Psi_0$  のエネルギー固有値を求めなさい。 $k, m$  を用いて表せ。

- 5  $\text{H}^{35}\text{Cl}$  分子の振動と回転に関する以下の問いに答えよ。力の定数を  $516 \text{ N/m}$ 、結合距離を  $127 \text{ pm}$  とする。
- (1) 換算質量 ( $\text{kg}$ ) を求めよ。
- (2) 室温(300K)で振動の基底状態にある  $\text{HCl}$  分子の数を  $N_0$ 、振動の第一励起状態にある  $\text{HCl}$  分子の数を  $N_1$  としたとき、 $N_1/N_0$  はいくらか。
- (3)  $\text{HCl}$  分子が振動により吸収する光の波長を求めなさい。
- (4) 室温(300K)で回転の基底状態にある  $\text{HCl}$  分子の数を  $N_0$ 、回転の第一励起状態にある  $\text{HCl}$  分子の数を  $N_1$  としたとき、 $N_1/N_0$  はいくらか。