

科目名	材料量子力学	対象	2TM	学部 研究科		学科 専攻科		学籍 番号		評 点
平成 29 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(持込可) [ 電卓 ]							

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。 $h=2\pi\hbar=6.626\times10^{-34}\text{ J}\cdot\text{s}$ ,  
 $c=3.00\times10^8\text{ m/s}$ ,  $m_e=9.11\times10^{-31}\text{ kg}$ ,  $m_p=1.67\times10^{-27}\text{ kg}$ ,  $k_B=1.38\times10^{-23}\text{ J/K}$ ,  $N_A=6.02\times10^{23}/\text{mol}$ ,

$$E_n=(n+1/2)\hbar\omega, E_l=l(l+1)\hbar^2/2I, \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2a} \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

1 以下の各問いに答えよ。

- (1) 速度  $10^6\text{ m/s}$  で運動する自由電子のド・ブローイ波長は何 nm か。
- (2) 室温(300K)で熱運動している中性子の運動エネルギーは何 J か。
- (3) 室温(300K)で熱運動している中性子のド・ブローイ波長は何 nm か。
- (4) エルミート演算子の定義を述べよ。用いた記号の意味を説明すること。
- (5) 実数のポテンシャル  $V(x)$  はエルミート演算子であることを示せ。
- (6) 交換子  $[\hat{x}, \hat{p}_x]$  の値を求めよ。 (6)
- (7) 一般に粒子の位置と運動量の両方を確定することはできない。その理由を(5)の結果をもとに説明せよ。
- (8) 中心力ポテンシャルのもとでの1電子状態は  $|nlm\rangle$  と表される。主量子数  $n$ 、方位量子数  $l$ 、磁気量子数  $m$  の意味を固有値と関係づけて量子力学的に説明せよ。
- (9) スピン量子数  $s$  が  $1/2$  となる理由を説明せよ。

2 以下の各問いに答えよ。

- (1) 完全に自由な粒子のシュレディンガー方程式をかけ。
- (2) (1)の一般解を求めよ。
- (3) 長さ  $L$  のリング上の粒子のエネルギー固有値を求めよ。(必要あれば固有値の異なる固有関数は直交することを用いよ)

3 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。  
 ただし、導出の過程が無いと採点されません。

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2 \right) \Psi = E \Psi \quad m: \text{粒子の質量}, k: \text{力の定数}$$

- (1) 基底状態は  $a$  を定数として、 $\Psi_0 = \left( \frac{2a}{\pi} \right)^{1/4} e^{-ax^2}$  の形で表される。 $a$  の値を求めなさい。
- (2) 基底状態のエネルギー固有値を求めなさい。 $k, m$  を用いて表せ。
- (3) 基底状態における位置  $x$  の期待値を求めなさい。
- (4) 基底状態におけるポテンシャルエネルギー  $V(x) = \frac{1}{2} kx^2$  の期待値を求めなさい。

4  $^{14}\text{N}_2$  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  $2290\text{ N/m}$ 、結合距離を  $110\text{ pm}$  とする。  
 また、温度は室温(300K)とする。

- (1) 換算質量(kg)を求めよ。
- (2) 振動の基底状態と第一励起状態のエネルギーは何 J か。
- (3) 振動の基底状態にある  $\text{N}_2$  分子の数を  $N_0$ 、振動の第一励起状態にある  $\text{N}_2$  分子の数を  $N_1$  としたとき、 $N_1/N_0$  はいくらか。
- (4) 回転の基底状態と第一励起状態のエネルギーは何 J か。
- (5) 回転の基底状態にある  $\text{N}_2$  分子の数を  $N_0$ 、回転の第一励起状態にある  $\text{N}_2$  分子の数を  $N_1$  としたとき、 $N_1/N_0$  はいくらか。