第５回化学Ａ演習レポート

提出日　2019 年　　月　　日

学年：　　　学科：　　　クラス：　　　学籍番号　　　氏名

【注意】必要に応じて、電気素量 1.602×10^{-19} C、電子の質量 $m_e = 9.109 \times 10^{-31}$ kg、$h = 6.63 \times 10^{-34}$ Js、光の速度 $c = 3.00 \times 10^{8}$ m s^{-1} を用いよ。その他、必要な定数があれば、その旨明記して使用して良い。

問題１　以下の設問に答えなさい。

$x \le 0$ および $x \ge L$ の領域で $V = \infty$、$0 \le x \le L$ の領域で $V = 0$ であるようなポテンシャルを「１次元井戸型ポテンシャル」という。１次元井戸型ポテンシャルの中の質量 m の粒子のシュレディンガー方程式 [1]、および規格化された波動関数 [2] は、次のように表される。

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \qquad \cdots\cdots\cdots [1]$$

$$\psi(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \sin\frac{n\pi x}{L} \qquad (n = 1,2,3,4,\ldots.) \quad \cdots\cdots\cdots [2]$$

一方、$x \le 0$、 $x \ge L$ および $y \le 0$、$y \ge M$ の領域で $V = \infty$、$0 \le x \le L$ および $0 \le y \le M$ の領域で $V = 0$ であるようなポテンシャルを「２次元井戸型ポテンシャル」という。

(1) 上記の２次元井戸型ポテンシャルの中での、質量 m の粒子のシュレディンガー方程式を書きなさい。

(2) 上記の２次元井戸型ポテンシャルの中での、質量 m の粒子の規格化された波動関数、およびエネルギーを、量子数 n_x, n_y を用いて表しなさい。

(3) (2)で求めた準位のうち、量子準位$(n_x, n_y) = (2,1)$ において、粒子の確率密度（存在確率）が最大になる座標をすべて求めなさい。また、その最大となる確率密度（存在確率）の大きさを求めなさい。

(4) (2)で求めた準位のうち、量子準位$(n_x, n_y) = (2,1)$ が、量子準位$(n_x, n_y) = (1,5)$と縮重しているとき、箱の長さの比M/Lを求めなさい。

問題１の解答欄

(1) 偏微分表示は全微分表示でも可とする。

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{\partial^2\psi(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi(x,y)}{\partial y^2}\right) = E\psi(x,y) \quad \text{または、} -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi(x,y)}{\partial y^2}\right) = E\psi(x,y)$$

(2) 波動関数 $\psi(x,y) = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2}\left(\frac{2}{M}\right)^{1/2} \sin\frac{n_x \pi x}{L} \sin\frac{n_y \pi y}{M}$ $(n_x, n_y = 1,2,3,4,\ldots.)$

エネルギー　$E_{nx,ny} = \frac{h^2}{8m^2}\left(\frac{n_x^{\,2}}{L^2} + \frac{n_y^{\,2}}{M^2}\right)$

(3) 座標 $\left(\frac{L}{4}, \frac{M}{2}\right)$, $\left(\frac{3L}{4}, \frac{M}{2}\right)$　存在確率 $\frac{4}{LM}$　　(4) $2\sqrt{2}$

(4) (2)のエネルギーの式に$(n_x, n_y) = (2,1)$ および $(n_x, n_y) = (1,5)$を代入。 $1/L^2 + 25/M^2 = 4/L^2 + 1/M^2$ より求まる。

問題2　$0<x<\mathrm{a}$ において $U=0$、それ以外の x で $U=\infty$の「1次元の箱」の中の粒子の波動関数は

$$\psi_n(x)=\left(\frac{2}{a}\right)^{1/2}\sin\frac{n\pi x}{a},\qquad n=1,2,3,\cdots$$

である。以下の各問に答えなさい。

(1) 長さa の立方体の内側（0<x<a, 0<y<a, 0<z<a）においてU=0、それ以外の(x, y, z)でU = ∞の「3次元の箱」の中の粒子の波動関数を答えなさい。ただし、x, y, z軸に関する量子数をそれぞれn_x, n_y, n_zとすること。

(2) $(n_x, n_y, n_z)=(1,2,1)$の量子準位において、粒子を見いだす確率が最も大きいのは、どのような座標(x, y, z)のときか？ その座標をすべて答えなさい。

(3) (2)において答えた座標において、粒子を見出す確率を答えなさい。

(4) ある量子準位(n_x, n_y, n_z)において、その量子数がすべて異なるとき、その量子準位の縮重度を答えなさい。

問題2の解答欄

(1)
$$\psi_{nx,ny,nz}(x,y,z)=\left(\frac{2}{a}\right)^{3/2}\sin\frac{n_x\pi x}{a}\sin\frac{n_y\pi y}{a}\sin\frac{n_z\pi z}{a},\qquad n_x,n_y,n_z=1,2,3,\cdots$$

(2) (x, y, z) = (a/2, a/4, a/2) および (a/2, 3a/4, a/2)

(3) $8/a^3$　(4) 6

【解説】

（1）3つの辺の長さがすべて等しい立方体ですから、$\left(\frac{2}{a}\right)^{3/2}$ となることに注意しましょう。

（2）1次元の箱で学んだように、量子数nが大きくなるにつれて、節の数はn-1個と多くなります。波動関数はsin関数ですから、節と節の中点が極大になります。n=1では、a/2で、n=2では、a/4と3a/4の2か所で、極大になります。問題の3次元の立方体の場合には、(1, 2, 1)において、x軸、z軸上では、a/2、y軸上では、a/4と3a/4で極大かつ最大になりますので、同じ最大値をとる座標は解答のように2か所あります。

（3）各点での存在確率は波動関数の2乗で求められますから、（1）の波動関数を2乗します。そして、（2）で求めた座標では、sin関数部分は1になりますから、解答のように最大値が求まります。

（4）3種の異なる数字の順列です。3×2×1から6通りと求まります。