構造化学(月曜1限)(山崎担当)

問題1 金属であるカリウムの仕事関数を2.49 eVとすると、どの波長領域の電磁波を照射すると光電効果が観測されるか。特定の波長を数字で示して、その波長より長い波長か、短い波長かを明記して、解答すること。

$$
\begin{aligned}
h\nu &= E_e + W > W \\
\nu &= \frac{c}{\lambda} \\
\lambda &< \frac{hc}{W} \\
&< \frac{6.63\times10^{-34}\times3.00\times10^{8}}{2.49\times1.60\times10^{-19}}\,\mathrm{m} \\
&< 498\ \mathrm{nm}
\end{aligned}
$$

498nm以下の青色や紫色の可視線から紫外線より短い波長領域である。

問題2 シュレディンガーの波動方程式からエネルギー固有値を計算するための一般式を導け。ただし、ハミルトニアンはルで示すこと。

(講義での導き方)

波動方程式より

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = 0$$

変数分離

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t)$$

$\varphi(t) = Ae^{i\omega t}$ とおくと、波動方程式は

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{\omega^2}{v^2}\psi = 0$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2\psi = 0 \qquad (1)$$

一方、古典力学のエネルギー保存より

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + U(x)$$

ドボロイの波長であらわすと

$$E = \frac{h^2}{2m}\frac{1}{\lambda^2} + U(x)$$

$$\frac{1}{\lambda^2} = \frac{2m}{h^2}\left(E - U(x)\right) \qquad (2)$$

(2)を(1)に代入する

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(E - U(x)\right)\psi = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi$$

一次元のシュレディンガーの波動方程式を導いた。

三次元は同様に

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(x,y,z)\right)\psi=E\psi$$

（別の導き方（いろいろにある））
波動方程式の解より

$$\psi(x)=Ae^{2\pi i(\vec{\sigma}\cdot\vec{x}-ft+\delta)}$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial x}=2\pi i\sigma_x\psi$$

運動量

$$p_x\psi=h\sigma_x\psi=-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

古典力学の運動エネルギー

$$KE=\frac{p_x^2+p_y^2+p_z^2}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$

エネルギー保存より

$$KE+PE=E$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(x,y,z)\right)\psi=E\psi$$

シュレディンガー方程式を導いた。

問題 3 一次元の井戸型ポテンシャル$(0\le x\le a)$でのシュレディンガーの波動方程式が次のように表されるとき、以下の問いに答えよ。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}=E\psi$$

(1) 固有関数が$\psi(x)=C\sin kx$ （C は定数で正の実数、k は正の実数)で表されるとき、境界条件$\psi(0)=\psi(a)=0$と規格化条件を用いて、係数 C を決定せよ。
境界条件

$$0=\psi(a)$$

$$0=C\sin(ka)$$

$$k=\frac{n\pi}{a},n\in\mathbb{N}$$

規格化

$$1=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\psi dx$$

$$1=C^2\int_0^a\sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx$$

$$1=C^2\frac{a}{2}$$

$$C=\pm\sqrt{\frac{2}{a}}$$

したがって、$\psi(x)=\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi x}{a}, n\in\mathbb{N}$

(2) (1)で得られた n=2 の波動関数について、電子の存在確率が最も高い位置 x を求めよ。

存在確率が最も高い位置は$\left|\psi(x)\right|^2$が最大
つまり、

$$\left|\sin\frac{n\pi x}{a}\right|=1$$

$n=2$のとき、

$$x_{\max}=\frac{1}{4}a,\frac{3}{4}a$$

#####