

量子力学2008：まとめテスト（2）

担当：星健夫、TA：谷川雅一

注：答案用紙 6 枚、計算用紙 1 枚。答案用紙 1 枚目には問題 1 を、2 枚目には問題 2 を、以下同様にして、全部で 6 枚提出せよ。答案用紙は、必ず 6 枚とも提出すること（計算用紙は回収しない）。

1 （解答用紙 1 枚目に解答せよ）

2 次元自由電子について、長さ L に対して、

$$\phi(x+L, y) = \phi(x, y), \phi(x, y+2L) = \phi(x, y) \quad (1)$$

の周期的境界条件を置く。シュレーディンガー方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \phi = \varepsilon \phi \quad (2)$$

となる。

(a) デカルト座標 $((x, y)$ 座標) で変数分離すると、波動関数は、2 つの整数 $((n_x, n_y)$ とおく) で指定される状態となる。対応する波動関数とエネルギー準位 $\varepsilon = \varepsilon(n_x, n_y)$ を書け。

(b) エネルギーを低い方から、 $E_1, E_2, \dots$ と名付ける。エネルギー準位 $E_1, E_2, \dots, E_5$ を書け。それぞれのエネルギー準位について、縮退度（いくつの波動関数が含まれるか）を書け。

2 （解答用紙 2 枚目に解答せよ）

レポート課題（問題番号 1 2）で取り上げた元素について、(a) 電子配置（例： $(1s)^2(2s)^1$ ）(b) その元素が含まれる物質や工業製品、(c) その他、本科目でならった知識を基礎とした解説、を記憶している範囲で書け。

注：該当レポートを提出していない者は、本問題は採点対象とならない。

3 （解答用紙 3 枚目に解答せよ）

電子の質量を m 、電子の電荷量の絶対値を e 、真空の誘電率を ε_0 、プランク定数を $\hbar$ と書く。必要なら、以下の値を使え； $m \approx 10^{-30}\text{kg}$, $\hbar \approx 10^{-34}\text{Js}$, $4\pi\varepsilon_0 \approx 10^{-10}\text{C}/(\text{Vm})$, $e^2 \approx 3 \times 10^{-38}\text{C}^2$, $1\text{ eV} \approx 2 \times 10^{-19}\text{J}$ 。

(a) 次式で定義される物理量 X が長さの次元をもつように、 a, b, c を定めよ。

$$X = m^a \hbar^b \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \right)^c$$

さらに、 X のだいたいの値を SI 単位で答えよ。

(b) 次式で定義される物理量 Y がエネルギーの次元をもつように、 p, q, r を定めよ。

$$Y = m^p \hbar^q \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \right)^r$$

さらに、 Y のだいたいの値を eV 単位で答えよ。

(c) 本問題で求めた長さ X 、エネルギー Y は、本科目でもたびたび登場した量である。どのような量であるか。

4 (解答用紙 4 枚目に解答せよ)

次の文章にある (a) (f) にあてはまる数値を書け。また、(A) (E) にあてはまる語句を、下記の語句欄からそれぞれ選べ。

原子番号 Z の原子は Z 個の電子をもつ。このうち、価電子 (最外殻電子) の個数を Z_v 個、内殻電子の個数を $Z_c (\equiv Z - Z_v)$ と書くことにする。内殻電子が原子核を完全に遮蔽すると考えると、イオン化エネルギーの近似式 I は、

$$I = \frac{mZ_v^2}{2\hbar^2n^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 = A \left(\frac{Z_v}{n} \right)^2. \quad (1)$$

と考えることができる。ここで、電子の質量を m 、電子の電荷量の絶対値を e 、真空の誘電率を ϵ_0 、プランク定数を $\hbar$ とした。 $A \approx 13.6\text{eV}$ はエネルギー定数である。このエネルギーに負号をつけたもの ($-I$) が、価電子 1 個あたりのエネルギーに相当する。

例えば、Be 原子では $n =$ (a)、 $Z =$ (b)、 $Z_v =$ (c) である。原子核は (d) 価の正電荷をもつが、(A) 電子の負電荷により完全遮蔽されると考えると、有効原子数 Z_v の水素類似原子モデルに帰着され、上式が導かれる。Be 原子では、上式での I は、 A の (e) 倍になる。

上式から、イオン化エネルギーは、周期律表の右側の元素ほど (B) なり、下側の元素ほど (C) なることが予想され、これは現実のイオン化エネルギーの傾向を説明する。ただし、絶対値は実験と大きく異なる。たとえば、Li 原子と F 原子のイオン化エネルギーをそれぞれ $I(\text{Li})$ 、 $I(\text{F})$ と書くと、上式から両者の比は、 $I(\text{F})/I(\text{Li}) =$ (f) となるはずだが、実験値での比はずっと小さい ($I(\text{Li}) = 5.39\text{eV}$ 、 $I(\text{F}) = 17.42\text{eV}$)。この矛盾の原因の一つとして、上式では価電子同士の (D) を無視していることが考えられる。(D) を考慮すると、 $I(\text{F})$ は上式の値より (E) なるはずである。

[語句] 価、内殻、大きく、小さく、運動エネルギー、クーロンエネルギー、

5 (解答用紙 5 枚目に解答せよ)

(a) ダイヤモンド構造について、充填率を計算せよ。

(b) ダイヤモンド構造について、(001)、(110)、(111)、(200) を描け。ただし、基本周期よりも多く周期を描くこと。原子の位置は黒点や白点など、原子の有無がはっきりとわかるようにすること。

6 (解答用紙 6 枚目に解答せよ)

同一原子における s, p_x, p_y, p_z 波動関数を、それぞれ、

$$\Psi_s(\mathbf{r}), \Psi_x(\mathbf{r}), \Psi_y(\mathbf{r}), \Psi_z(\mathbf{r}) \quad (1)$$

と書くことにする。これらは、規格化直交波動関数である。

sp^3 混成軌道の波動関数のうち、2 つは、

$$\phi_1(\mathbf{r}) = A \{ \Psi_s(\mathbf{r}) + \Psi_x(\mathbf{r}) + \Psi_y(\mathbf{r}) + \Psi_z(\mathbf{r}) \} \quad (2)$$

$$\phi_2(\mathbf{r}) = B \{ -\Psi_s(\mathbf{r}) + \Psi_x(\mathbf{r}) + \Psi_y(\mathbf{r}) + C\Psi_z(\mathbf{r}) \} \quad (3)$$

と書くことができる。これらが、規格化直交波動関数となるように A, B, C を決めよ。ただし、 $A, B > 0$ とする。

注：配布したプリント及び、下記書籍の持ち込みを認める；原康夫・岡崎誠「工科系のための現代物理学」裳華房。原島鮮「初等量子力学」裳華房。小出昭一郎「量子力学 I」裳華房。プリントや教科書には、書き込みがしてあっても良い。また、A 4 用紙 2 枚の「まとめメモ」の持ち込みを認める (裏面使用可。手書きでもコピーでも可)。答案と一緒に「まとめメモ」を提出しても良い (内容によっては、加対象となる。返却する)。

以上。