

化学第2中間試験問題

2013年12月5日 担当 石川

注意:教科書、ノート参照不可。電卓、計算尺(関数電卓・グラフ電卓・プログラム電卓も)使用可。スマートフォン等の電卓機能は使用不可。電卓貸借禁。電卓を使わない場合には計算の有効桁数は1桁でよい。

0, 以下の問題において、致命的な間違い(ワープロミスでなく、解答不能な状況になるもの、与えられた数値が常識的におかしいもの)を見付けた場合は、何が間違っているかを指摘するとともに、問題文を正しいと考える形態に修正し、修正した問題に対する解答を記せ。

1, 光子に関する次の問に答えよ。

- (1)波長 663nm、出力 1mW のレーザーポインターから 1 秒間に放出される光子数をもとめよ。
- (2)C-C 単結合の平均結合エンタルピーは約 361kJmol^{-1} である。これ以上のエネルギーが結合に与えられたら結合が切れると仮定して、この結合の切断に最低限必要な光の波長をもとめよ。

2, 自由空間を進む粒子を考える。

- (1) $\Psi = A\sin kx + B\cos kx$ と、 $\Psi = Ce^{ikx} + De^{-ikx}$ が、共に自由空間のシュレディンガー方程式を数学的に満足する関数であることを代入して確認せよ。また、粒子のエネルギーをもとめよ。
- (2)座標軸を負の方向に進行する粒子を表す波動関数を、理由も含めて選択せよ。また、運動量をもとめよ。
- (3)(2)で選択した波動関数の最低エネルギー値を求めよ。ただし、空間は無限に広がっているものとする。

3、1次元の無限に深い井戸型ポテンシャルを考える。井戸の中には質量 m の粒子が存在している。井戸の幅は L で井戸の一端の座標を原点に取る。井戸の内側ではポテンシャル $V=0$ で、井戸の外側では、 $V=\infty$ である。

- (1)井戸の内側のシュレディンガー方程式と壁における境界条件を記せ。
- (2)シュレディンガー方程式を解いて、(規格化されていなくてよい) 波動関数および許されるエネルギーをもとめよ。
- (3)井戸の幅が 1nm (1 ナノメートル) で中に閉じ込められた粒子は電子であるとする。この時の最低エネルギーを計算せよ。
- (4) $L=1\text{m}$ 、 $m=1\text{kg}$ で、量子数 $n=1$ の場合の粒子の古典的な速度(古典力学に従った粒子であると仮定した時の粒子の速度)をもとめよ。このような状態を実現できるか議論せよ。
- (5) $L=1\text{m}$ 、 $m=1\text{kg}$ で、古典的な粒子の速度が 3m/秒 の場合に、井戸の中での存在確率密度分布が実質的に均一とみなせる理由を説明せよ。

4, 不確定性原理に関する次の問に答えよ。。

- (1)問 3 の(3)と同じ状態の電子を考える。この時位置の不確定性は井戸の幅に等しく、運動量の不確定性は右に進む電子と左に進む電子の運動量の差に等しいとする。不確定性原理より、電子の最低の運動エネルギーをもとめよ。
- (2)原子の典型的な大きさは 0.1nm で、その中に電子が束縛されている。原子核の典型的な大きさは 10fm (フェムトメートル) で陽子または中性子が束縛されている。原子と原子核内の粒子を 1次元井戸型ポテンシャルに束縛されている粒子と近似して(3次元でなく1次元として考える)、不確定性関係を使って、原子中の電子を束縛しているポテンシャルエネルギーと原子核中の陽子(もしくは中性子)を束縛しているポテンシャルエネルギーの大まかな比をもとめよ。

参考資料。

$$\hbar=1.05\times10^{-34}JS$$

$$h=6.63\times10^{-34}JS$$

$$c=3.00\times10^8ms^{-1}$$

$$k_B=1.38\times10^{-23}JK^{-1}$$

$$m_e=9.11\times10^{-31}kg$$

$$m_p=1.67\times10^{-27}kg$$

$$m_n=1.67\times10^{-27}kg$$

$$N_A=6.02\times10^{23}mol^{-1}$$

$$e=1.60\times10^{-19}C$$

$$1cal=4.2J$$

$$E=mc^2$$

$$\lambda=h/p$$

$$E=h\nu$$

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

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dx}=p\psi$$

$$\Delta p\Delta q\geq\frac{1}{2}\hbar$$

$$k=\frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\text{ミリ} : m=10^{-3}$$

$$\text{マイクロ} : \mu=10^{-6}$$

$$\text{ナノ} : n=10^{-9}$$

$$\text{ピコ} : p=10^{-12}$$

$$\text{フェムト} : f=10^{-15}$$

$$\psi_v(y)=N_vH_v(y)e^{-\frac{y^2}{2}}$$

$$y=\frac{x}{\alpha} \quad \alpha=\left(\frac{\hbar^2}{mk}\right)^{1/4}$$

$$H_v=(-y)^ve^{y^2}\frac{d^v}{dy^v}(e^{-y^2})$$

$$N_v=\frac{1}{(\alpha\pi^{1/2}2^vv!)^{1/2}}$$

$$E=\left(v+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad \omega=\left(\frac{k}{m}\right)^{1/2}$$