基礎理論化学Ａ　試験問題　　　　　**次のうち５問を選択して解答せよ。**

(再2号)

１．運動量の演算子が $\hat{p} = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial q}$ **で表されると仮定すると、エネルギーに対する演算子が１次元では** $\hat{\mathcal{H}} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2} + U(x)$ **で表されることを示せ。また、シュレディンガー方程式** $\hat{\mathcal{H}}\psi(x) = E\psi(x)$ **から、エネルギー固有値は** $E = \int\psi(x)\hat{\mathcal{H}}\psi(x)\,dx \Big/ \int\psi(x)^2 dx$ **で求められることを導け。**

２．１次元箱の中の粒子のシュレディンガー方程式を解き、エネルギー固有値が $E = n^2h^2/8ma^2$ **に、固有関数が** $\psi(x) = A\sin\dfrac{n\pi x}{a}$ **になることを示せ。**

３．エルミート多項式 $H_n(\xi)$ 　$(n = 0-3)$ **を求めよ。ただし、**

$$H_n(\xi) = (2\xi)^n - \frac{n(n-1)}{1!}(2\xi)^{n-2} + \cdots + (-1)^r\frac{n(n-1)\cdots(n-2r+1)}{r!}(2\xi)^{n-2r} + \cdots$$

である。またそれを使って調和振動子の波動関数 $\psi_n(\xi) = NH_n(\xi)e^{-\xi^2/2}$ $(n = 0-3)$ **を図示せよ。**

４．不確定性原理 $\Delta x\cdot\Delta p_x \geq h/4\pi$ **を変数変換して、** $\Delta E\cdot\Delta t \geq h/4\pi$ **を証明せよ。また、Na 原子の励起状態の寿命は 10 ns** (10×10^{-9} **sec)である。このスペクトル線のエネルギー幅はいくらになるか。J および** cm^{-1} **の単位で答えよ。ただし、** $h = 6.6\times10^{-34}$ Jsec， **1 J =** 5.0×10^{22} cm^{-1} **である。**

５． $\hat{A} = -ih\begin{vmatrix} i & j & k \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix}$ **を展開して** $\hat{A}_x, \hat{A}_y, \hat{A}_z$ **を求めよ。また、次の計算を続行して** $\{\hat{A}_x, \hat{A}_y\} = ih\hat{A}_z$ **を示せ。**

$$\begin{aligned} &\hat{A}_x(\hat{A}_y\psi) - \hat{A}_y(\hat{A}_x\psi) \\ &= -\hbar^2\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(z\frac{\partial\psi}{\partial x} - x\frac{\partial\psi}{\partial z}\right) + \hbar^2\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(y\frac{\partial\psi}{\partial z} - z\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) \\ &= \cdots\cdots \end{aligned}$$

６．次の計算を続行して $\hat{A}^2$ **と** $\hat{A}_z$ **が交換することを示せ。**

$$\begin{aligned} \{\hat{A}^2, \hat{A}_z\} &= \hat{A}^2\hat{A}_z - \hat{A}_z\hat{A}^2 \\ &= \{\hat{A}_x{}^2, \hat{A}_z\} + \{\hat{A}_y{}^2, \hat{A}_z\} \qquad (\because \hat{A}^2 = \hat{A}_x{}^2 + \hat{A}_y{}^2 + \hat{A}_z{}^2) \\ &= \cdots\cdots \end{aligned}$$