宿題４　　　　　　　　　　　　提出期限　５月７日

問１．分子モデルを用いてヘキサトリエン及びオクタテトラエンの第一励起状態の電子配置を示し、最初の電子遷移の波数と波長を求めよ。

問２．半径 a の円周上を運動するように制限された質量 m の粒子に対するシュレーディンガー方程式は次式で示される。

$$\frac{d^2\psi(\theta)}{d\theta^2}+\frac{2IE}{\hbar^2}\psi(\theta)=0 \qquad 0\le\theta\le 2\pi$$

ここに $I=ma^2$ は慣性モーメント、 θ は運動の角度を表す。解を

$$\psi(\theta)= Ae^{in\theta}$$

と置いて、これを直接上のシュレーディンガー方程式に代入してエネルギー固有値を求めよ。

境界条件 $\psi(\theta)=\psi(\theta+2\pi)$ を適応して $n=0,\pm1,\pm2,\cdots$ であることを示せ。（オイラーの公式を使うと良い）

波動関数を規格化せよ。

結果をベンゼンの自由電子モデルに適応し、基底状態と第一励起状態の電子配置を示し、最初の電子遷移の波数と波長を求めよ。ベンゼンの結合長は $a=140\ pm$ であり、π電子の数は６である。

問３．箱の中の粒子の問題を壁が $-a$ と a にあるとして解く。一般解を

$$\psi(x)=c_1e^{ikx}+c_2e^{-ikx}$$

と置いて、これを直接次のシュレーディンガー方程式に代入してエネルギー固有値を求めよ。

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)=0 \qquad -a\le x\le a$$

境界条件を適応して波動関数を求めよ（きちんと場合分けをすること）。

波動関数を規格化せよ。

全ての状態で位置の平均値が $\langle x\rangle=0$ と成ることを示せ。

全ての状態で運動量の平均値が $\langle p_x\rangle=0$ と成ることを示せ。

位置の二乗の平均値 $\langle x^2\rangle$ と分散及び標準偏差 σ_x を求めよ。

運動量の二乗の平均値 $\langle p_x^2\rangle$ と分散及び標準偏差 σ_{p_x} を求めよ。

これらの結果を基にして不確定性原理を示せ。