

## 5.9/2017 学修相談実施報告

来室学生

三回生 男子 一名

計一名

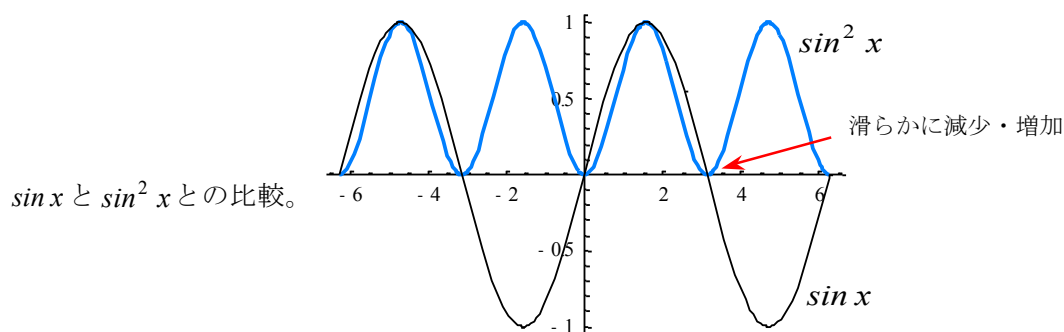
### 質問内容

1. 無機化学の教科書の説明で、1次元の箱の中の粒子の運動を量子論的に取り扱い、*Schrödinger*の波動方程式の解から、固有エネルギー、固有関数を求めるところがあるが、まだ十分に分からないので、波動方程式とその解の求め方について教えてほしい。
2. 演習問題で、1次元の箱の中の粒子を電子とし、箱の長さを共役系色素分子の長さに等しくおき、その分子の電子エネルギー準位を、量子数を用いて(数値) $\times n^2$ で表わした後、 $n=11$ から $n=12$ へ光の吸収遷移が起こるとするとき、光の波長を求める計算問題があるが、計算を見てほしい。

### 回答内容

1. *Schrödinger*の波動方程式について、式の形、式の解き方、解の意味を、1次元の箱の中の粒子を例に説明した。説明の概要は2016年10月31日の学修相談実施報告にあるものと同様である。

解として得られた固有関数の規格化と波動関数の自乗のもつ意味についてより詳しく説明し、規格化定数は $\int \sin^2 x \cdot dx$ の積分ができれば容易に求められるので、その積分は自分でやっておくように言った。また波動関数(正弦関数)と存在確率を表わす波動関数の自乗の形( $\sin x$ と $\sin^2 x$ )を描いて、存在確率の極大、極小点の位置を確認し、極小点では値がゼロからV字型に変化するのではなく、滑らかに減少・増加することを注意点として補足した。



なお、波動関数の形について正確を期すため、この報告には下の図と説明を付け加えてあります。

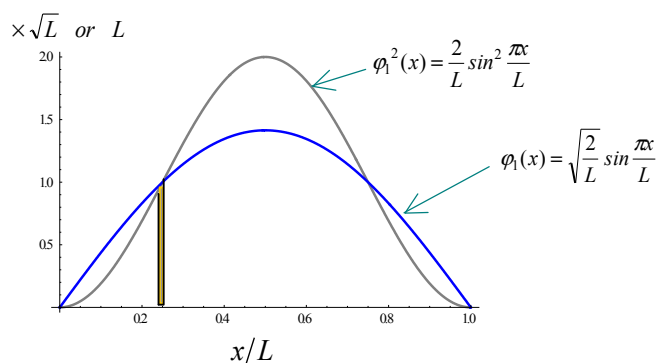


図 最低エネルギー準位の波動関数と確率分布関数  
一次元の箱の中の粒子

2. エネルギー準位は量子数を  $n$  とすると式(1)で与えられるので、求める数値は式(1)のカッコ内の値を、 $L$  に適当な値を用いて、求めればよい、

$$E = \frac{n^2 h^2}{8m_e L^2} = \left( \frac{6.626 \times 10^{-34}}{8 \times 9.019 \times 10^{-31} \times L^2} \right) \times n^2 \quad (1)$$

なお、エネルギーは、SI 単位系を一貫して用いておれば、J で求められることは自明だが、実際に式(1)の単位が J であることを確かめた方がよい。もちろん、 $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$  ではない。

$$\left[ \frac{(\text{J} \cdot \text{s})^2}{\text{kg} \cdot \text{m}^2} \right] = \left[ \frac{\text{J}^2}{\text{kg} \cdot \text{m}^2 / \text{s}^2} \right] = \left[ \frac{\text{J}^2}{\text{J}} \right] = [\text{J}] \quad (1')$$

式(1')の左辺が右辺のように書けることは、 $\text{kg} \cdot \text{m}^2 / \text{s}^2$  が運動エネルギーの単位(J)に相当する事に気が付けば簡単、と補足した。

式(1)の  $L$  を与えられた共役系色素分子に対して求め、 $n=11$  から  $n=12$  への遷移に相当するエネルギーから、学生は光の波長を正しく計算できていた。

以上