

第4回化学A演習レポート

提出日 2019 年 月 日

学年: 学科: クラス: 学籍番号 氏名

【注意】必要に応じて、電気素量 $1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$ 、電子の質量 $m_e = 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg}$ 、 $h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ Js}$ 、光の速度 $c = 3.00 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$ を用いよ。その他、必要な定数があれば、その旨明記して使用して良い。

問題1. 座標を x として、一次元のシュレディンガー方程式を記しなさい。

-解答-

1 次元のシュレディンガー方程式は、ポテンシャルエネルギーを U 、全エネルギーを E とすると、

$$-\frac{h^2}{8\pi^2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U\psi = E\psi \quad \cdots(2.1)$$

と表わされる。

問題2. 長さ a の一次元の箱 (ポテンシャルエネルギー: $U = 0$) の中に質量 m_e の電子が閉じ込められているとき、以下の設問に答えなさい。但し、式誘導については全て示すこと。

(A) 電子のとりうるエネルギー E_n を、量子数 n を用いて求めなさい。

-解答-

(2.1) 式において、 $U=0$ であるので、変形すると、

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -\left(\sqrt{\frac{8\pi^2m_e E}{h^2}}\right)^2 \psi(x)$$

と表わせる。ここで、この式の一般解は $C = \sqrt{\frac{8\pi^2m_e E}{h^2}} \quad \cdots(3.1)$ とおくと、

$$\psi(x) = A \sin Cx + B \cos Cx$$

とおける。また、界面条件より $x=0$ のとき

$$\psi(0) = A \sin 0 + B \cos 0 = B = 0$$

となり、同様に $x=a$ のときは、

$$\psi(a) = A \sin Ca = 0 \quad \cdots(3.2)$$

となる。ここで、 $A=0$ とすると、

$$\psi(x) = 0 \Rightarrow |\psi(x)|^2 = 0$$

となり、ボルの確率解釈より、箱の中に粒子が存在しなくなってしまう。

よって、 $A \neq 0$ となり、(3.2) 式より、

$$Ca = n\pi \Leftrightarrow C = \frac{n\pi}{a} \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

ここで、 $n=0$ とすると、 $\psi(x)=0$ となり不適となるので、

$$C = \frac{n\pi}{a} \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad \cdots(3.3)$$

したがって、(3.1) 式より、

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8m_e a^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad \cdots(3.4)$$

と、電子のとりうる電子エネルギー E_n が求められる。

(B) 規格化された電子の波動関数を求めなさい。

-解答-

(3.3)式より、シュレディンガー方程式の解は、

$$\Psi(x) = A \sin \frac{n\pi}{a} x$$

であるので、規格化条件より、

$$\begin{aligned} \int_0^a |\Psi(x)|^2 dx &= A^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi}{a} x \\ &= \frac{A^2 a}{2} = 1 \end{aligned}$$

$$\therefore A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$\therefore \Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x$$

- (C) 光励起により $n=1$ の準位にいる電子を $n=2$ の準位に励起する。箱の長さ 0.750 nm として、このときの光のエネルギーの大きさを J 単位で求めよ。

-解答-

光励起に必要なエネルギー ΔE は $E_2 - E_1$ なので、(3.4)式より

$$\begin{aligned} \Delta E &= E_2 - E_1 \\ &= \frac{h^2}{8m_e a^2} (2^2 - 1^2) \\ &= 3 \times \frac{(6.63 \times 10^{-34} \text{ Js})^2}{8 \times 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg} \times (0.750 \times 10^{-9} \text{ m})^2} \\ &= 3.22 \times 10^{-19} \text{ J} \end{aligned}$$

と求められる。

- (D) (C) で求めた光のエネルギーを eV 単位で、また、光の波長を nm 単位で、それぞれ求めなさい。

-解答-

1eV の定義は 1V の電位差がある自由空間内で電子 1 つが得るエネルギーである。

また、1J は 1V の電位差の中で 1C の電荷を動かすのに必要な仕事と定義されるので、以下の関係が成り立つ。

$$1\text{eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$$

したがって、(C) で求めた ΔE を eV 単位に直すと、

$$\Delta E = \frac{3.22 \times 10^{-19} \text{ J}}{1.602 \times 10^{-19} \text{ J/eV}} = 2.01 \text{ eV}$$

となる。次に、光と波長の関係は以下の式で表わされる。

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad \dots (3.5)$$

したがって、求める光の波長 λ は、

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ Js} \times 3.00 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}}{3.22 \times 10^{-19} \text{ J}} = 618 \text{ nm}$$

となる。