

# 量子論と波動方程式

齋藤 雅明

量子化学研究室

email: masa.saitow@chem.nagoya-u.ac.jp

問題 1. 次の共役二重結合をもつ 1 価の有機色素分子は、分子鎖の長さに対応する  $k$  の値 ( $k = 0 \cdots 3$ ) が 1 増すごとに吸収する光の波長がおおよそ 100nm ずつ長くなることが知られている。この現象は、 $\pi$  電子を自由電子模型により取り扱うことで理解される。このとき以下の問いに答えよ。

1.(a) 長さ  $L$  の一次元の無限に高いポテンシャル中の電子の Schrödinger 方程式を解き、エネルギー準位を求めよ。電子質量は  $m_e$  とせよ。自由電子模型の場合、 $L$  は共役長に対応し、 $0.60 + 0.25k$  nm と与えられる。また  $\pi$  電子数は  $4 + 2k$  である。

1.(b)  $k = 0$  の色素分子に対して HOMO および LUMO の軌道エネルギーを求めよ。

1.(c) 光吸収による HOMO→LUMO 遷移を考える。 $k = 0$  のときの吸収エネルギーおよび吸収波長を求めよ。

1.(d)  $k = 1, 2, 3$  についても 1.(c) と同様の計算を行い、鎖長の増加に伴う吸収波長の変化を示せ。

問題 2. ポルフィリン化合物は様々な波長の可視光を吸収する。これは 26 個の  $\pi$  電子が分子平面全体に広がり、 $\pi$  共役するためである。この現象は  $\pi$  電子を二次元自由電子モデルで取り扱うことで理解できる。分子平面を正方形としたときの一边の長さを  $L(= 1.00$  nm) とし、以下の問いに答えよ。

2.(a) エネルギー準位が

$$E_{n_x n_y} = \frac{(n_x^2 + n_y^2)h^2}{8m_e L^2} \quad (n_x, n_y = 1, 2, \cdots) \quad (1)$$

と与えられることを示せ。

2.(b) HOMO→LUMO 遷移の吸収波長を求めよ。