

問題 6

以下の文を読み、(①)から(⑨)に入る数値、式、あるいは語句を記せ。

$\text{H}-(\text{CH}=\text{CH})_k-\text{H}$ ($k=2$ の場合は、 $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$)のような直鎖状ポリエンの π 電子を、長さ L の一次元の箱形ポテンシャル場を運動する質量 m の粒子に対する波動方程式を用いて取り扱う。

$0 \leq x \leq L$ の範囲ではポテンシャルエネルギー $V=0$ とし、 $x < 0$ 及び $L < x$ の範囲で $V = \infty$ とする。その波動方程式は、 $0 \leq x \leq L$ の範囲で、 $\phi_n(x)$ を波動関数、 E_n をエネルギー固有値として、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi_n(x)}{dx^2} = E_n \phi_n(x) \quad (\text{ただし } \hbar = h/2\pi, n = 1, 2, 3, \dots)$$

と与えられる。境界条件は、 $\phi_n(0) = \phi(L) =$ (①) である。波動関数 $\phi_n(x)$ に対応する波長は $\lambda_n =$ (②) となる。これらの条件を満足する波動関数は、 $\phi_n(x) = (2/L)^{1/2} \times$ (③)、エネルギー固有値は、 $E_n =$ (④) と与えられる。

上の結果に基づくと、 $\text{H}-(\text{CH}=\text{CH})_k-\text{H}$ の最低励起エネルギー ΔE は、(⑤) 番目のエネルギー準位の電子を (⑥) 番目のエネルギー準位に励起するために必要なエネルギーである。ここで炭素-炭素結合の長さは全て等しいと仮定し、その値を a とおくと、 $L = (2k-1) \times a$ と近似できる。したがって、 ΔE は k に依存しない項 (⑦) と、 k に依存する項 (⑧) の積として、 $\Delta E =$ (⑦) \times (⑧) と表される。このことから鎖長が長くなると吸収スペクトルが (⑨) 側にシフトすることが理解できる。