

なぜ1次元の問題を考えるのか？

何と言っても、

1. 数学的な取り扱いが容易で、
2. 量子力学の要請や定理が解析的な表現で求められる

というのが、大きな理由である。

(あえて、) 1次元の問題の応用を考えるとすれば.....

「1次元の無限に深い井戸型ポテンシャルに閉じ込められた粒子」の示すエネルギー準位は、 $E_n = h^2 \pi^2 n^2 / (2ma^2)$ で表される。重要なのは、エネルギー準位が井戸の幅 a に依存するということ。下図に示す β カロテンのように、 π 電子共役系では電子は局在化せずに比較的自由に動き回ることができる。しかし、決して共役系から外へは出て行くことができない。そこで、この π 電子を「1次元の無限に深い井戸型ポテンシャルに閉じ込められた電子」とみなせば、この電子のエネルギー準位は上式で表されるだろう。以上の近似を認めれば、「 π 電子共役系をもつ分子は可視光（もしくは、紫外光）を吸収する。このとき、吸収する光の波長（波長の逆数はエネルギーに比例する）と π 電子共役系の長さには相関がある」という事実を（定性的ではあるが）説明できる。

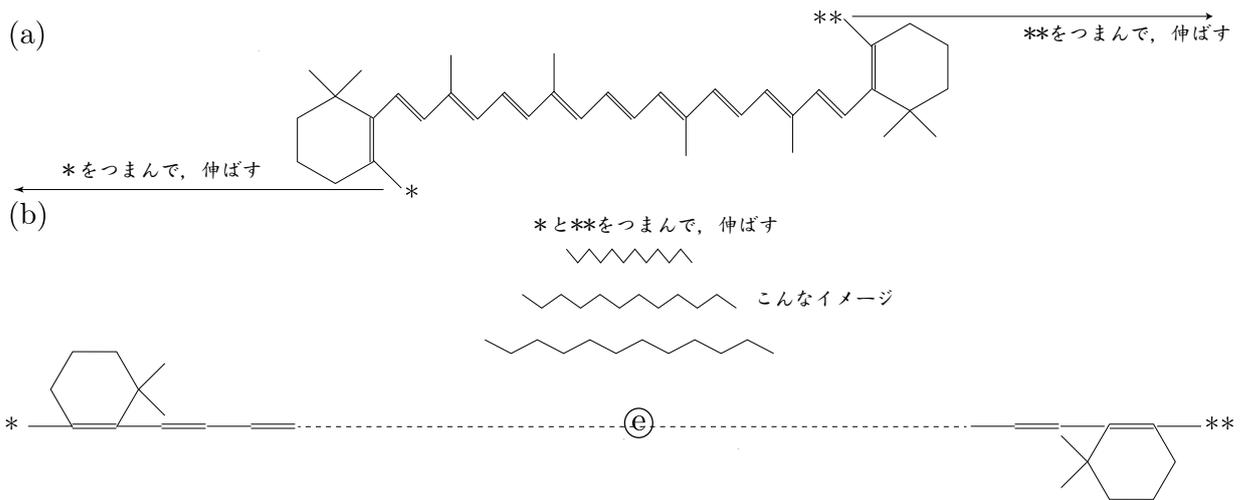


図 9.1 (a) β カロテンの構造式（慣例に従って水素原子は省略した。また、屈曲点が炭素原子を表す）、(b) β カロテンの * と ** をつまんで、左右に伸ばすと、この系は近似的に「1次元井戸型ポテンシャルに閉じ込められた電子」とみなせる。

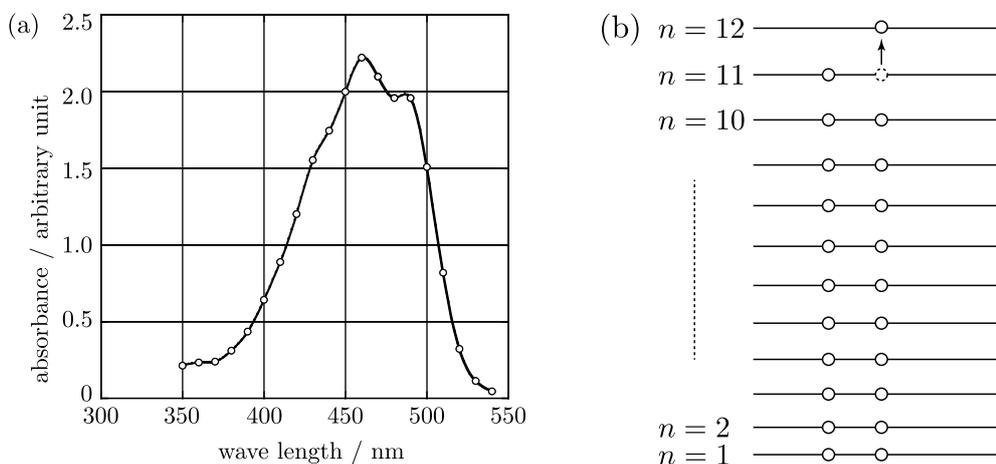


図 9.2 (a) β カロテンの吸収スペクトル、(b) エネルギー準位への電子の配置と光の吸収に伴う電子の励起

吸収波長が π 電子共役系の長さに依存することを確認するために、共役二重結合の長さを変えた分子で実験してみると.....

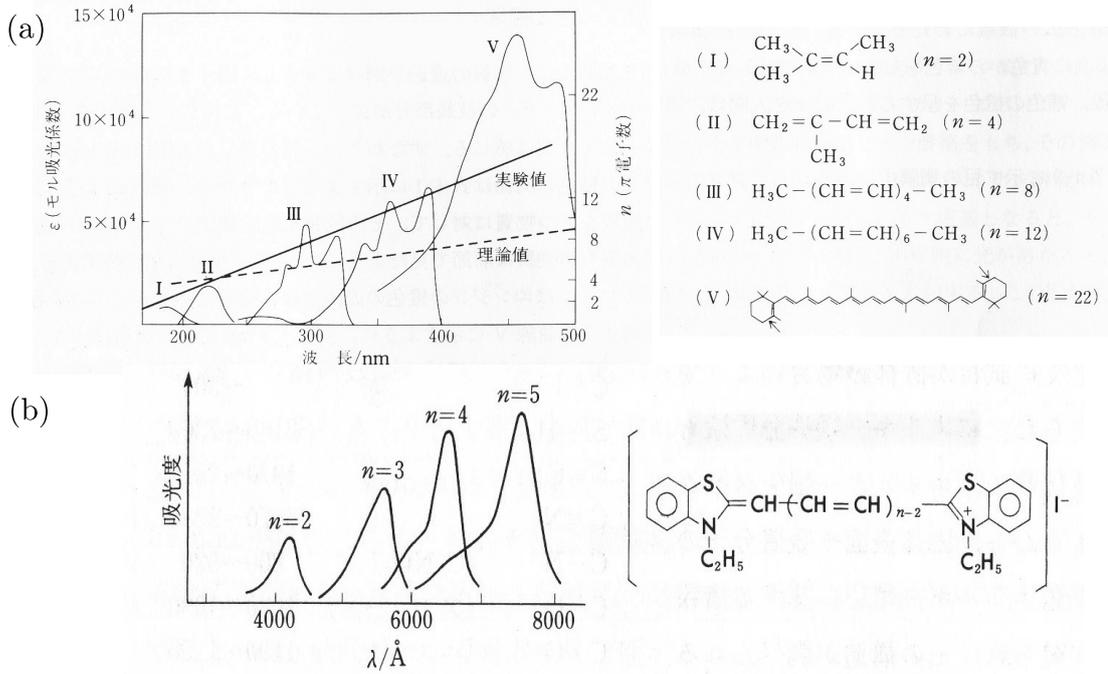


図 9.3 共役二重結合の長さとの吸収波長：(a) エチレンおよびポリエン誘導体の吸収スペクトルとその吸収極大波長の π 電子数依存性 [田中政志, 佐野充, 原子分子の現代化学, 学術図書出版 より抜粋 (ただし, 少しだけ改変した)], (b) ベンゾチアゾール系シアニン色素 (メタノール溶液) の吸収スペクトル [大野公一, 量子物理化学, 東京大学 より抜粋]

植物は全てを知っている.....

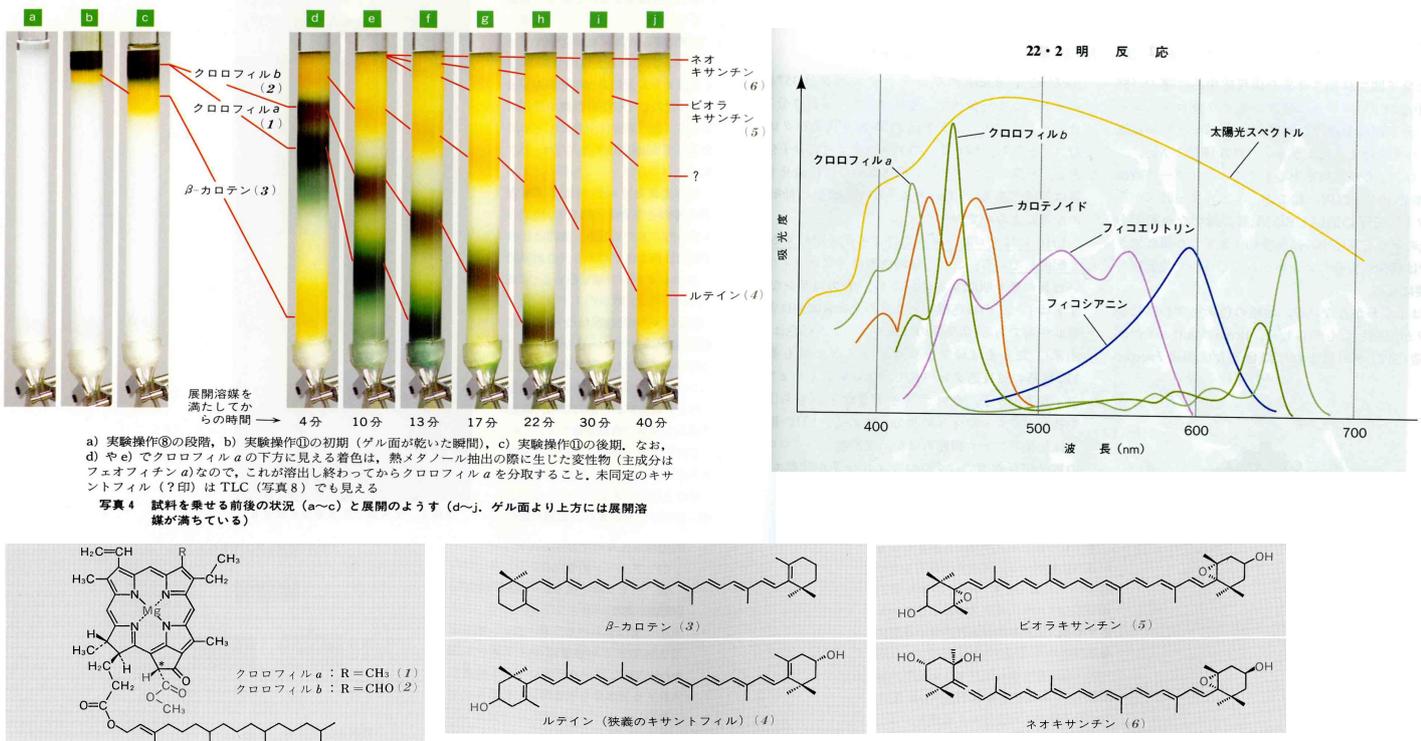


図 9.4 (左) 植物から抽出した色素をゲルクロマトグラフィーで分離したようすと色素の構造式 [日本化学会編, 楽しい化学の実験, 東京化学同人 より抜粋], (右) 太陽光スペクトルと種々の色素の吸収スペクトル [ヴォート, 基礎生化学, 東京化学同人 より抜粋]: 太陽から地球へ降り注ぐ太陽光は, さまざまな波長が入り交じった白色光である。これを, 取りこぼさなく吸収するためには, たった一種類の色素では不足である。なぜなら, その色素が吸収できる光は, 色素の π 電子共役系の長さで決まってしまうからである。それでは, その波長以外の太陽光成分を「取りこぼして」しまう。そこで, 植物はさまざまな色素を持ち, 太陽光を取りこぼさなく吸収する準備をしている。