

1220：狭い空間に閉じ込められた電子のエネルギー

(不確定性関係から狭い空間に閉じ込められた粒子は大きな運動エネルギーを持つという結論が得られます。有機化学での不飽和結合間の共鳴の原因です)

キーポイント：運動エネルギーと運動量の曖昧さとの関係；不確定性関係；空間に閉じ込められた電子の運動エネルギー

電子（一般に粒子）を狭い空間に閉じ込めると常識では考えられないことが起こります。わかりやすくするため、一次元の空間（ x 軸上）を運動している電子をみましょう。

質量 m 、速度 u で運動する電子の運動エネルギー (T) は $(1/2)mu^2$ です。運動量 ($p = mu$) で書き直すと、 $(1/2m)p^2$ となります。“運動量の曖昧さ” (Δp) を用いて運動エネルギーを求めましょう。

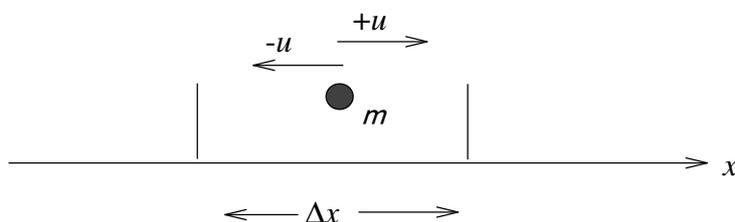


図 1. Δx の範囲を運動する質量 m の粒子。

運動の範囲を Δx 、運動量は曖昧さ Δp を含む（正しい値を p とすると $p \pm \Delta p$ の範囲にあるということ）ものとします。正しい値は、曖昧さの含む運動量を平均すると求められます。面白いことに、粒子は右向きの運動を左向きの運動が同じ確率で起こりますので、運動量を平均すると 0 となります ($p_{\text{aver}} = 0$)。

$$p^2 = (p_{\text{aver}} \pm \Delta p)^2 = (\Delta p)^2$$

この関係を用いると、

$$T = \frac{1}{2m}(\Delta p)^2$$

となります。これに不確定性原理の関係式を導入します。

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Rightarrow \quad \Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x}$$

$$T \geq \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2}$$

上式は粒子の運動範囲を狭くすると運動エネルギーは大きくなる ($\Delta x \rightarrow 0, T \rightarrow \infty$) ことを示しています。つまり、電子を狭い場所に閉じ込めるとおおきなエネルギーを必要になります。逆にいうと狭い空間に閉じ込められた電子は大きなエネルギーを持つことになり、この事実は有機化学で非常に重要です。