1230：1Å³の箱の中にある電子のエネルギー値

（1220 の結論は，シュレーディンガー方程式を解いても同じ結果が得られます）

キーポイント：シュレーディンガーの方程式；波動関数；量子数；基底状態；励起状態；電子の運動エネルギー

空間に閉じ込められた電子の“行動”とエネルギーは下式の**シュレディンガー（Schrödinger）方程式**を解いて求めることができます（ここでは，詳細を省略します）.

$$E\psi(x,y,z) = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z)$$

この方程式を解くと，エネルギー（E）と電子の運動の様子（この表現は不正確ですがここではそのように受け止めてください）を表す**波動関数（ψ: wavefunction）**が得られます. ポテンシャルエネルギーを発生させる原子核等の電荷がありませんから，得られる E は運動エネルギーです.

一辺が L の立方体に入っている電子の（運動）エネルギーは,

$$E(n_x, n_y, n_z) = \left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right)\frac{h^2}{8mL^2}$$

で表されます. m は電子の質量で，n_x，n_y，n_z は**量子数（quantum number）**とよばれ，それぞれ独立に 1，2，3，・・の自然数をとります. $n_x = n_y = n_z = 1$ のとき最低のエネルギー状態です. この状態を**基底状態（ground state）**とよびますが，基底状態以外の状態はすべて基底状態よりエネルギーは高く，それらを**励起状態（excited states）**とよびます.

L = 1Å として基底状態のエネルギーを計算すると，1Å³ に閉じ込められた電子は約 10^4kJ/mol（10,080 kJ/mol）のエネルギーを有します.

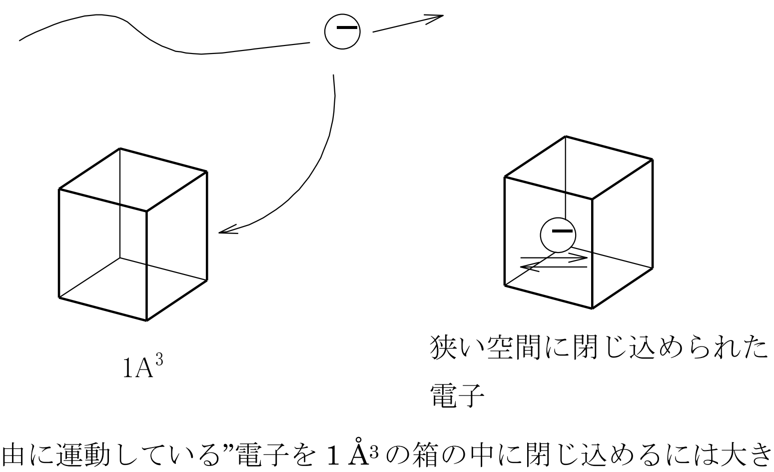

図 1. “自由に運動している”電子を 1 Å³の箱の中に閉じ込めるには大きなエネルギーが必要. 狭い空間に閉じ込められた電子は大きな運動エネルギーを持つ.

上の式から，立方体の一辺の長さ L を大きくすると電子の運動エネルギーは低下することがわかります．狭い空間にある電子は大きなエネルギーを持ち，そのエネルギーを低下させるため，電子はなるべく広がる傾向があるのです．