

# 势阱模型及其在有机物着色 研究中的应用

顾 樵

(西北大学物理系, 陕西, 西安)

**摘要**——利用势阱模型研究了量子生物学中有机物的着色问题。

**关键词**——势阱模型, 量子生物学, 有机物着色。

## 1. 引 言

量子力学的一个基本问题是研究无限深势阱中的电子的波动性<sup>[1]</sup>。按照通常的方法, 通过求解这一问题的薛定谔方程, 可以得到电子的量子化能谱

$$E_n = \frac{h^2 n^2}{8mL^2}, \quad (n=1, 2, 3, \dots) \quad (1)$$

式中  $L$  是势阱的宽度,  $m$  是电子的质量,  $h$  是普朗克常数。

本文介绍一种简便方法, 该方法毋须求解薛定谔方程, 也能得到式(1)的结果。本文还利用这种方法研究了量子生物学中有机物的着色问题。

## 2. 势 阱 模 型

为求出无限深势阱中电子的能谱, 首先注意到电子的德布罗意公式

$$mv = \frac{h}{\lambda}, \quad (2)$$

式中  $v$  是电子的速度,  $\lambda$  是电子的德布罗意波长。由于势阱无限深, 电子不能逸出, 也就是, 阱壁正好是电子波的节点。因此, 无限深势阱中电子波的行为类似于激光谐振腔中的电磁场<sup>[2]</sup>, 即波长  $\lambda$  满足驻波条件

$$L = \frac{\lambda}{2} n, \quad (n=1, 2, 3, \dots) \quad (3)$$

在阱内, 电子只有动能, 于是总能量为

$$E = \frac{1}{2} mv^2. \quad (4)$$

由式(2)、(3)消去  $\lambda$ , 求解  $v$ , 再代入式(4), 即得式(1). 这一方法比求解薛定谔方程要简单得多, 利用这种方法还可以近似求解线性谐振子和氢原子的量子化能谱.

分别将线性谐振子和氢原子的总能量用纯势能表示, 即

$$E = \frac{1}{2} m \omega^2 x_0^2 \quad (5)$$

$$E = -\frac{e}{r_0} \quad (6)$$

式(5)中的  $m$ 、 $\omega$  和  $x_0$  分别是振子的质量、圆频率和最大位移, 式(6)中的  $e$  和  $r_0$  分别是电子的电荷和离核的最短距离. 相应的驻波条件分别为

$$2x_0 = \frac{\lambda}{2} n, \quad (n=1, 2, 3, \dots), \quad (7)$$

$$r_0 = \frac{\lambda}{2} n. \quad (n=1, 2, 3, \dots). \quad (8)$$

将式(2)、(4)分别与式(5)、(7)和(6)、(8)联立, 得到线性谐振子和氢原子的能谱

$$E_n = \frac{\pi}{4} \hbar \omega n, \quad (9)$$

$$E_n = -\frac{8m e^4}{h^2 n^2}. \quad (10)$$

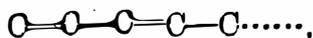
式(9)、(10)分别反映了线性谐振子和氢原子量子化能谱的本质特点, 即分别正比于  $n$  和  $(-\frac{1}{n^2})$ .

上述诸例表明, 势阱模型的出发点是德布罗意公式, 而能谱量子化则基于驻波条件. 这种方法与求解薛定谔方程在本质上是一致的, 它的优点是求解过程简便, 量子化概念直观. 但局限性是只能反映能谱对量子数  $n$  的依赖性, 因此只适用于一维电子波情况.

势阱模型对于研究量子生物系统能谱特别有用. 在量子生物学中, 许多蛋白质和核酸的薛定谔方程非常复杂, 无法严格求解. 但这些问题往往是一维的, 搞清能谱对  $n$  的依赖性能够有效地解决许多问题, 因此势阱模型可望在量子生物学中获得应用.

### 3. 有机物着色问题

用上述势阱模型研究有机物的着色问题时, 可考察共轭链<sup>[3]</sup>



这里  $\text{O}=\text{O}$  键与  $\text{C}-\text{C}$  键交替出现. 在  $\text{C}=\text{C}$  的两个键中, 一个为  $\sigma$  键, 另一个为  $\pi$  键.  $\pi$  键所对应的两个  $\pi$  电子可以沿着共轭链移动(但不能离开端面), 因而与金属中的自由电子相似. 共轭链中的  $\pi$  电子可以视为一维无限深势阱中的自由电子, 因此可以用上述势阱模型研究  $\pi$  电子的能级. 设共轭链的长度为

$$L = Nl, \quad (11)$$

式中  $N$  和  $l$  分别是基团  $\text{O}=\text{O}-\text{O}$  的数目和长度, 整个共轭链有  $2N$  个  $\pi$  电子, 其中一个电子的能谱由式(1)给出. 根据泡利原理, 每个能级上可以填充不同自旋取向的两个  $\pi$  电子, 那么  $2N$  个  $\pi$  电子可以填充  $N$  个能级.

现在考察共轭链的吸收谱。根据无限深势阱的选择定则  $\Delta n = \pm 1$ , 可以得到吸收谱诸峰的中心频率

$$\nu_n = \frac{1}{h} (E_n - E_{n-1}) = \frac{h}{8ml^2} \frac{2n-1}{N^2}, \quad (12)$$

这里利用了式(1)和(11)。从而相应的中心波长为

$$\lambda_n = \frac{8mcl^2}{h} \frac{N^2}{2n-1}, \quad (13)$$

式中  $c$  为光速。在一般情况下可取  $l = 0.288 \text{ nm}$ , 再注意到  $n$  的变化范围, 式(13)可具体化为

$$\lambda_n = 27.14 \frac{N^2}{2n-1} (\text{nm}), \quad (2 \leq n \leq N). \quad (14)$$

根据式(14)对有机物的着色问题可作如下解释:

(1) 有机物的着色一般是由共轭链中  $\pi$  电子的特殊性质决定的。

(2) 当外光源(例如日光)照在共轭链上时, 如果共轭链的  $\text{C}=\text{C}-\text{C}$  数目  $N$  确定, 则吸收谱诸峰的位置便确定, 由式(14)可以算出这些吸收峰的中心波长为  $\lambda_2 = 90.47 N^2 \text{ nm}$ ,  $\lambda_3 = 54.28 N^2 (\text{nm})$ ,  $\lambda_4 = 38.63 N^2 (\text{nm})$ , ..... 那么人们所看到的有机物就呈现与上述吸收峰互补的颜色。

(3) 在一般情况下, 不同共轭链的  $\text{C}=\text{C}-\text{C}$  数目  $N$  有所不同, 从而吸收谱诸峰的位置发生变化, 这样不同共轭链在外光源照射下便呈现不同的颜色。

(4) 许多有机物(特别是生命系统)是由多种不同的共轭链组成的, 例如不同的花瓣呈现不同的颜色, 甚至同一片花瓣的不同部位也呈现不同的颜色, 其主要原因是这些花瓣由各种不同的共轭链组成。

验证上述理论计算的实验工作正在进行。

### 参 考 文 献

- [1] Ландау Л. Д. and Лифшиц Е. М., 量子力学(非相对论理论), 严肃译, 人民教育出版社, 1980, p.79.  
 [2] 顾樵, 红外研究, 8(1989), 123.  
 [3] 永田亲义, 量子生物学入门, 陶宗晋、江寿平译, 上海科学技术出版社, 1979, p.7

# POTENTIAL WELL MODEL AND ITS APPLICATIONS IN STUDY OF ORGANISM COLORING

GU QIAO

*(Department of Physics, Northwest University, Xi'an, Shaanxi, China)*

## ABSTRACT

By using the potential well model, study on the organism coloring is presented in terms of quantum biology.