

P.13 参考1 Schrödingerの波動方程式とは何か? → B1~B10も参照

化学における

構造

性質

反応

電子が

決定的役割

(原子・分子)

⇒ この電子のエネルギー・位置・ふるまいを記述する基礎方程式がSchrödinger方程式。

• Schrödinger方程式: $H\psi = E\psi$

$$\left[\begin{array}{l} \psi: \text{波動関数 (一般名)} \\ E: \text{エネルギー} \\ H: \text{ハミルトニアン (演算子)} \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{原子: 原子軌道} \\ \text{分子: 分子軌道} \\ \text{結晶: 結晶軌道} \end{array}$$

• B6 右上について (理由)

位置と運動量を同時に確定できないため

∴ 不確定性原理

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$$

(Δx : 位置の不確定さ, Δp : 運動量の不確定さ)

- $\Delta x \rightarrow 0$ のとき, $\Delta p \rightarrow \infty$
(位置を確定させると、運動量は確定できない)
- $\Delta p \rightarrow 0$ のとき, $\Delta x \rightarrow \infty$
(同様)

ただし、運動量や運動エネルギーの平均値(期待値)は一定の値をとる。

• B5 上方について

$x = A_0$ のとき

$$\left\{ \begin{array}{l} \cdot v = 0 \rightarrow p = mv = 0, T = \frac{1}{2}mv^2 = 0 \\ \cdot V = \frac{1}{2}kA_0^2 \\ \cdot E = T + V = \frac{1}{2}kA_0^2 \end{array} \right.$$

すなわち、古典論では、位置と運動量が同時に確定。

→ これは巨視的世界での話。微視的世界ではそうはいかない。