

構造化学問題

10/13 §2 量子論の基礎

2.1 Schrödinger 方程式 (1926)

(量子論の基礎方程式)

古典:  $ma = F$

▷ keywords

波動力学

等価。

① 波動関数  $\psi(x)$

② Schrödinger eq.

③ ハミルトニアン (ハミルトン演算子):  $H$

④ エネルギー固有値:  $E$

余談

先生 ボルン

ハイゼンベルグ 行列力学

②に③を代入 → ①と④が求まる

▷ 波動関数の例

複素数

1次元 → 自由粒子の波動関数 (自由粒子 → 電子を想定すればいい)

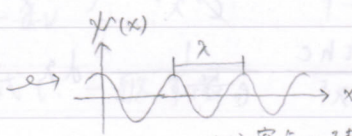
振幅

変わらない

$$\psi(x) = e^{i\frac{2\pi}{\lambda}x}$$

$$\psi(x) = \cos \frac{2\pi}{\lambda}x$$

cf. 古典的な波動



ex) 空気の疎密を基準にした音波

de Broglie の式

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

よって

$$\psi(x) = e^{i\frac{2\pi}{\lambda}px} = e^{i\frac{px}{\hbar}}$$

$\frac{1}{\hbar}$  とおく

▷ 波動関数の意味

Born の確率解釈 (1926)

" $\psi$  の絶対値の二乗  $|\psi|^2$  は粒子の存在確率に比例する"

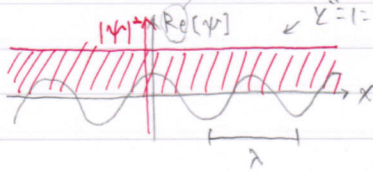
$\psi$ : 確率振幅

$|\psi|^2$ : 確率密度

ex. 1. 自由粒子 "実数" 意味。自由

"

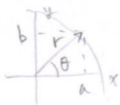
$\psi = e^{i\frac{2\pi}{\lambda}x}$  が正しいのである



$$|\psi(x)|^2 = |e^{i\frac{2\pi}{\lambda}x}|^2 = 1$$

$$e^{i\frac{2\pi}{\lambda}x} \times e^{-i\frac{2\pi}{\lambda}x}$$

絶対値だから可能。



Euler

$$e^{i\theta} \equiv \cos\theta + i\sin\theta \quad \begin{matrix} \cos\theta \\ \text{"a"} \\ \sqrt{a^2+b^2} \end{matrix} + i \begin{matrix} \sin\theta \\ \text{"b"} \\ \sqrt{a^2+b^2} \end{matrix} = \sqrt{a^2+b^2} e^{i\theta} = r e^{i\theta}$$