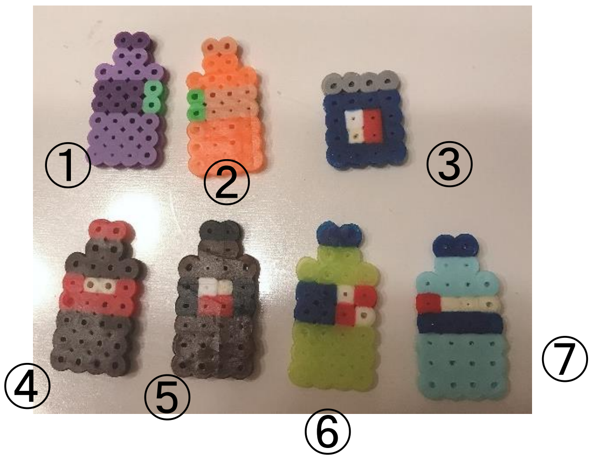
化学基礎
第4回オンライン講義

今日も動画に撮ってみます

阿部穣里　2020年6月3日

出席チャット欄：
『下のアイロンビーズの名前7つ』
＋自分の名前でお願いします。



娘のアイロンビーズ

質問
固有値は演算子ではないと
思っていたのですが
固有値であるEとの比較で
運動量pを演算子と見るのは
OKなのですか？

演算子マーク
ハットが重要なの。

対応をとって演算子を
定義することは可能です。

$$\frac{p^2}{2m} \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} = -\frac{\hat{p}^2}{2m}$$ OK!

でも固有値と演算子を
イコールで書いてはだめです！

$$\cancel{\frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}}$$ NG!

穴埋め講義にはipadのタッチペン使ってます

質問:　小テストはどういう点に注意して採点されているか
回答:　見た瞬間で採点します　(ほぼ完答20、半分回答10、ほぼ全滅5）

今年はオンラインなので、本当に充分な予習をしたかどうかの判定が不可能ですが
(対面時だと、小テストはガチで、満点だとアインシュタインのハンコが貰えます）

20点　10点　5点

レポートは、
しっかり読ませていただきます！

『〇〇は評価に関係しますか？』という質問からの考察

・その質問をすると、印象が下がる (大人の世界では自分で考えるべきことだから）

・評価だけが欲しいと言っているように感じる (例：金目当ての結婚）

・評価を忘れて努力し没頭すると、評価は上がる　(知識の理解、共有、尊敬)

・そもそも人の評価に合わせた生き方をすべきではない　(アドラー心理学、学校教育も悪い)

・日本の高等教育は世界トップ、大学教育をもっとよくすれば、スーパー人材の育成可

[12]シュレディンガー方程式の導出

定常波の微分方程式

$$\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2}=-\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2\Psi(x) \quad \dots①$$

ド・ブロイの式

$$p=mv=\frac{h}{\lambda} \quad \dots② \Rightarrow \frac{1}{\lambda}=\frac{p}{h} \quad \dots②'$$

エネルギー保存

$$E=\frac{1}{2}mv^2+U(x) \quad \dots③$$

$$(\because p=mv)$$

$$=\frac{p^2}{2m}+U(x)$$

$$\Rightarrow p^2=(E-U(x))2m \quad \dots③'$$

方針：①，②′，③′から λ, p, v を消去

①，②′より λ を消し、$\hbar=\dfrac{h}{2\pi}$ を代入すると

$$\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2}=-\left(\frac{2\pi p}{h}\right)^2\Psi(x)=-\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2\Psi(x) \quad \dots④$$

④，③′から p^2 を消去すると、

$$\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2}=-\frac{2m}{\hbar^2}(E-U(x))\Psi(x)$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2}+U(x)\Psi(x)=E\Psi(x)$$

$$\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U(x)\right]\Psi(x)=E\Psi(x)$$

$$\hat{H}\Psi(x)=E\Psi(x)$$

シュレディンガー方程式

また③と見比べると、$\dfrac{p^2}{2m}\Rightarrow-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}$ と変化

関数か数値　　演算子

$\hat{p}\equiv-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ とすると、

$$\frac{\hat{p}^2}{2m}=\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$ となるので

シュレディンガー方程式の

ハミルトニアンは $\hat{H}=\dfrac{\hat{p}^2}{2m}+U(x)$ と書ける。

[12]波動関数の性質

① $\Psi(x)$ は電子の何を表わすのか？

『位置xでの存在確率のようなもの？』

シュレディンガー方程式の解

$\Psi(x)$は負にもなるし、複素数にもなる

⇒ そのままでは確率に不適

$$\rho(x) \equiv \Psi^*(x)\Psi(x) = |\Psi(x)|^2$$

*は複素共役の意味

確率密度

単位量(1次元の場合、長さ)あたりの確率を表わす。

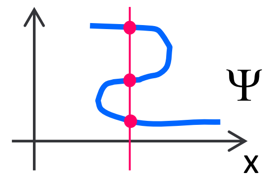
($\rho(x)dx$ で確率の次元)

② $\Psi(x)$ の条件

a) 規格化 …全空間で確率を足しあげると(積分すると)1になる。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x)\Psi(x)dx = 1$$

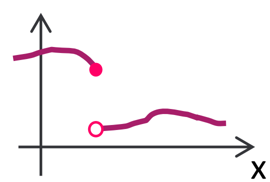
b) 一価性 …位置xが決まれば $\Psi(x)$ の値も1つに決まる。



$\Psi(x)$ ← こういうのはダメ

c) 有限性 …各位置で常に確率密度を有限にするためには、
$\Psi(x)$ 自身も常に有限
(発散してはダメ)

d) 連続性 … $\Psi(x)$は不連続ではいけない。



← こういうのはダメ

第2回レポートについて（20点分/100点）

第1回から第4回の内容
（シュレディンガー方程式の導出、波動関数の性質まで）
を復習し、自分の頭で様々な内容の関連性を編集し、
自分の言葉でアウトプットする。
小テストだけでなく、講義で扱った内容も含む。
教科書をはじめから読んでみよう。
既に数学的なところは一度手を動かしているので、
思いのほかよくわかると思います。
初日に配ったマインドマップも参考に。

注意

- 手書き、パソコンどちらでもよい。
- 締め切り：6月17日　10時半
- 締め切り遅れが厳重なので注意
- 未提出の場合、単位がない

補足

なぜ運動量演算子$\hat{p}$の定義

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

にマイナスが付くか？

時間に依存する
シュレディンガー方程式の導出(別のやり方)

進行波は $A\sin\left(kx-\omega t\right)$のように書ける

複素数の波はオイラーの定理を使い

$$\Psi\left(x,t\right) = A\exp\left(i\left(kx-\omega t\right)\right) \quad \text{…①}$$

と表す

波数kと波長、およびドブロイ波の条件より

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi p}{h} = \frac{p}{\hbar} \quad \text{…②}$$

周波数と振動数、
および光子のエネルギーの式より

$$\omega = \frac{2\pi}{T} = 2\pi\nu = \frac{2\pi E}{h} = \frac{E}{\hbar} \quad \text{…③}$$

②, ③を①に代入して

$$\Psi\left(x,t\right) = A\exp\left(i\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right)\right) \quad \text{…④}$$

④をx, tでそれぞれ偏微分した式から

$$\frac{\partial}{\partial x}\Psi\left(x,t\right) = i\frac{p}{\hbar}\Psi\left(x,t\right)$$

$$\therefore -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Psi\left(x,t\right) = p\Psi\left(x,t\right) \quad \text{…⑤}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi\left(x,t\right) = -i\frac{E}{\hbar}\Psi\left(x,t\right)$$

$$\therefore i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi\left(x,t\right) = E\Psi\left(x,t\right) \quad \text{…⑥}$$

⑤より運動量pを固有値に与える演算子は

$$\hat{p} \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

と定義すると自然。

エネルギー保存則より
Eの固有値を与える演算子は

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U \qquad \therefore i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi\left(x,t\right) = \hat{H}\Psi\left(x,t\right)$$

ポテンシャルや $\hat{H}$ が時間に依存しないときは

$$\hat{H}\Psi\left(x,t\right) = E\Psi\left(x,t\right)$$