来室学生

二回生　　男子　二名

計二名

質問内容

１．無機化学の教科書の一つとして使われている無機化学演習問題集の例題で、1 次元の箱の中の粒子の運動を量子論的に取り扱い、*Schrödinger*の波動方程式の解から、固有エネルギー、固有関数を求めるところがあるが、全く分からない。 そもそも*Schrödinger*の波動方程式が分からない。

回答内容

１．これまでに、原子の電子構造のところで*Schrödinger*の波動方程式については、ある程度習っているのではないかと思うが、ニュートンの運動方程式（古典論）と対比しながら、粒子の二重性、ド・ブロイ波とその波長$\lambda = h/mv$について簡単に説明し、大まかに言えば、粒子の存在している領域とその粒子のド・ブロイ波の波長が同じ程度になれば、ニュートンの運動方程式に代わり新しい力学の方程式が必要になる。 その方程式が*Schrödinger*の波動方程式で、形式的には、古典論のエネルギー保存則（1次元の場合）式(1)において

$$E = （運動エネルギー）+（位置エネルギー）$$
$$= \frac{1}{2}mv_x^2 + V(x) = \frac{1}{2m}p_x^2 + V(x) \qquad (1)$$

運動量を運動量の演算子式(2)で置き換え、

$$p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \qquad (2)$$

位置座標はそのままにして得られる式（3）を、エネルギーを与える演算子と考え、

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \qquad (3)$$

定常状態では粒子の運動は式(4)を満たす関数$\Psi(x)$で表される。　E はそのエネルギーである。

$$\left\{-\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right\}\Psi(x) = E\Psi(x) \;\Rightarrow\; H\Psi = E\Psi \qquad (4)$$

式(4)を*Schrödinger*の波動方程式と呼んでいる。

式(4)は2階の微分方程式になっているので、関数$\Psi(x)$を一義的に決めるには２つ条件（境界条件）が要る。　関数$\Psi(x)$を波動方程式の固有関数（波動関数）、Eを固有値と呼んでいる、３次元への拡張は容易、と説明。

以上の説明の後、具体的に例題の解答の式をフォローさせ、完全に理解できるまで自分で式を確かめさせた。

なお、波動関数の解釈は、その自乗を粒子の存在確率とするので、式(５)を満たし、

$$\int \Psi(x)^2 dx = 1 \qquad (5)$$

異なる固有値に対する固有関数は直交しているので式(６)を満たす。

$$\int \Psi_n(x) \cdot \Psi_m(x) dx = \delta_{nm} \qquad (6)$$

式(６)を自分で確かめてはどうか、と回答した。　波動関数の形とド・ブロイ波の関係を、箱の中の粒子では、箱の長さがド・ブロイ波の波長の半整数倍、水素原子の電子軌道の円周はド・ブロイ波の波長の整数倍になっていることなどを補足した。

テキストでは、この例題の前に、ボーア軌道の考え方で水素原子の電子エネルギー準位や軌道半径等が半古典的に求められていて、その後、箱の中の粒子が量子論的に取り扱われているので、そのギャップが理解の妨げになっているのかもしれないと思った。

以上