

2017 年度 構造化学 (中田) Quiz 6 回

ここは最もわかりにくいところだから復習してね!!

1. 波動関数、状態などと呼ぶ(波動関数はこの世のすべてを表す関数である)
2. E :エネルギー固有値 Ψ :エネルギー固有状態 エネルギー固有関数、エネルギー固有ベクトル (文脈でわかるときは単に固有値、固有状態、固有関数、固有ベクトルともよぶ)
3. Ψ_0 : 基底状態 E_0 : 基底状態のエネルギー
4. Ψ :励起状態 E :励起状態
5. H の行列要素を H_{ij} とすると $H_{ij} = H_{ji}^*$ となるもの。*は複素共役
6. x を H の規格化された固有関数、 λ を固有値とすると、 $x^t H x = \lambda x^t x = \lambda$ 一方 $x^t H^\dagger x = \lambda^* x^t x$ となる。これらは等しいため $\lambda = \lambda^*$ となる。
7. x, y を固有関数(固有ベクトル) λ_x, λ_y を対応する固有関数とする。
 $y^t H x = \lambda_x y^t x = \lambda_y y^t x$ より $\lambda_x \neq \lambda_y$ のときは $y^t x = 0$ の必要がある。
8. エ ル ミ ー ト 。 $\Psi(x), \Phi(x)$ を 任 意 の 波 動 関 数 と し て
$$\int \Psi^*(x)(\hat{p}\Phi(x))dx = [\Psi^*(x)\Phi(x)]_{-\infty}^{\infty} - \int \Phi^*(x)(\hat{p}\Psi(x))dx$$
が成立し、部分積分したところは境界条件で無限遠で0となる。
9. $\int \Psi^* H \Psi dx$
10. $|\Psi(x)|^2 dx$
11.
$$\frac{\Psi(x)}{\sqrt{\int \Psi^*(x)\Psi(x)dx}}$$
12. 粒子の存在確率が全空間で1(または有限)となる。
13. Ψ, Φ を波動関数とし、 μ, λ を複素数とする。そのとき $\mu\Psi + \lambda\Phi$ も波動関数。
14. $\{c_i\}_{i=1, \dots, \infty}$ を複素数として $\Psi = \sum_{i=0}^{\infty} c_i \Phi_i$ と表される
15. Ψ が Φ_i のどれかにジャンプする(波束の収縮)。その確率は $\Psi = \sum_{i=0}^{\infty} c_i \Phi_i$ と表される時 $|c_i|^2$ となる

$$16.\Psi=\sum_{i=0}^{\infty}c_i\Phi_i\text{としたとき}\langle E\rangle=\sum_{i=1}^{\infty}|c_i|^2E_i$$