

量子化學 概念卡圖鑑

★★★★★

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

薛定諤方程 Schrödinger equation

程	角色 量子力學核心
ψ	本徵值 能量 E

子系統波函數與能量的基本方程，定為哈密頓算符作用於 ψ 等於能量乘

No. 002 ★★★★★☆

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

一維位能井 Particle in a box

量子數 n = 1, 2, 3...	零點能 E ₁ > 0
節點數 n - 1	能量比 1 : 4 : 9

最簡單的束縛模型，邊界條件使能量量子化，能量正比於 n² 與 1/L²，箱越小能階越疏。

No. 003 ★★★★★★

$$E_n = -\frac{13.6}{n^2} \text{ eV}$$

氫原子能階 Hydrogen energy levels

基態 -13.6 eV	n = 2 -3.4 eV
游離能 13.6 eV	簡併 n ² 重

單電子原子的精確能階，隨主量子數 n 增大而升高、間距變密，n → ∞ 時趨於游離。

No. 004 ★★

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$

量子諧振子 Quantum harmonic oscillator

量子數 v = 0, 1, 2...	零點能 ½ ħω
間距 等距 ħω	應用 分子振動

描述分子振動的基本模型，能階等距，能量為零點能 ½ ħω，是紅外光譜的

★★★★★☆

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

算符 Momentum operator

符	維度 一維 x
i ħ	厄米性 可觀測量

動量提升為量子算符，作用於波函數微分，與位置算符不對易。

位置算符 對易關係

No. 006 ★★★★★★

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

測不準原理 Uncertainty principle

共軛量 x 與 p	下限 ħ/2
後果 零點能存在	提出 海森堡 1927

位置與動量無法同時精確測定，乘積有下限，是量子世界不可消除的內稟限制。

關聯卡 零點能 波包 共軛變數

No. 007 ★★★☆☆☆

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

德布羅意波長 de Broglie wavelength

對象 所有物質	關係 λ ∝ 1/p
驗證 電子繞射	提出 1924

賦予物質粒子波動性，動量越大波長越短，是物質波概念與電子顯微鏡的理論起點。

No. 008 ★★

$$P(x) = |\psi(x)|^2$$

機率密度 Probability density

意義 找到粒子機率	性質 非負
歸一化 ∫ P dx = 1	提出 born 詮釋

波函數平方給出粒子在各處出現的機率，波恩詮釋讓抽象的 ψ 連上可測量結果。