量子力学の公式

光子

光子のエネルギー　$E = h\nu$　　ただし h は Plank(プランク) 定数、ν は光の振動数

光子の運動量の大きさ　$p = \dfrac{h}{\lambda}$　　ただし λ は光の波長

光の振動数 ν と波長 λ の関係　$c = \nu\lambda$　　ただし c は真空中の光速度

電子

電子波の波長　$\lambda = \dfrac{h}{p}$　　ただし h はプランク定数、p は電子の運動量の大きさ

電子波の振動数　$\nu = \dfrac{E}{h}$　　ただし h はプランク定数、E は電子の運動エネルギー

Compton(コンプトン) 散乱

コンプトン効果による散乱 X 線の振動数　$\nu' = \dfrac{\nu}{1 + \frac{\mathrm{h}\nu}{\mathrm{mc}^2}(1 - \cos\theta)}$

ただし ν は入射 X 線の振動数、m は電子の質量、θ は X 線の散乱角

Schrödinger(シュレディンガー) 表示の量子力学

シュレディンガー方程式　$i\hbar\dfrac{\partial\psi}{\partial t} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\left(\dfrac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \dfrac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) + U\psi$　　［注］$i = \sqrt{-1}$、$\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$

ただし ψ は波動関数であり、時間 t と空間の直交座標 x, y, z の関数　すなわち　$\psi = \psi(t, x, y, z)$
m は電子の質量、$U = U(t, x, y, z)$ はポテンシャル エネルギー
定常状態においては、U は時間 t に依存せず空間座標のみの関数　すなわち　$U = U(x, y, z)$

電子の存在確率　$P = \displaystyle\int_V \psi^*\psi\, dV$　　ただし ψ^* は ψ の複素共役、V は空間の体積

ハミルトニアン　$H = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\left(\dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial y^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + U$

ハミルトニアンを用いて表記したシュレディンガー方程式　$i\hbar\dfrac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi$

ポテンシャルエネルギー U が時間 t に依存しないときの波動関数　$\psi(t, x, y, z) = \phi(t)\, u_n(x, y, z)$

ポテンシャルエネルギー U が時間 t に依存しないときのシュレディンガー方程式

$i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\phi(t) = E_n\phi(t)$　　ただし E_n はエネルギー固有値（実数）、$(n = 1, 2, 3, \cdots)$

$Hu_n(x, y, z) = E_n u_n(x, y, z)$　　ただし H はハミルトニアン、$u_n(x, y, z)$ は固有関数、$(n = 1, 2, 3, \cdots)$

定常状態の波動関数　$\psi = c\, e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\, u_n(x, y, z)$　　ただし c は任意定数

重ね合わせの原理　$\psi(t, x, y, z) = \displaystyle\sum_{n=1}^{\infty} A_n(t)\, u_n(x, y, z)$　　ただし $u_n(x, y, z)$ は固有関数

［注］任意の状態を表す波動関数 ψ は複数の固有状態 $u_n(x, y, z)$ の重ね合わせで表せる。

固有関数の直交条件　$\displaystyle\int_V u_m^*(x,y,z)u_n(x,y,z)\,dxdydz = 0$　$(m,n=1,2,3,\cdots)$　ただし　$m \neq n$

固有関数の規格化条件　$\displaystyle\int_V u_n^*(x,y,z)u_n(x,y,z)\,dxdydz = 1$　$(n=1,2,3,\cdots)$　ただし V は空間の体積

量子力学系の状態の時間的変化　$\displaystyle A_n(t) = \int_V u_n^*(x,y,z)\psi(t,x,y,z)\,dxdydz$　ただし V は空間の体積

エネルギー期待値　$\displaystyle\langle E\rangle = \int_V \psi^*(t,x,y,z)H\psi(t,x,y,z)\,dxdydz$　ただし H はハミルトニアン

エネルギー固有値を用いて表記すると　$\displaystyle\langle E\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} A_n^*(t)A_n(t)E_n$

運動量の演算子　$\displaystyle p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x},\quad p_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y},\quad p_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$

位置座標と運動量の交換関係

$xp_x - p_x x = i\hbar,\quad yp_y - p_y y = i\hbar,\quad zp_z - p_z z = i\hbar$

$yp_x - p_x y = 0,\quad zp_x - p_x z = 0,\quad xp_y - p_y x = 0,\quad zp_y - p_y z = 0,\quad xp_z - p_z x = 0,\quad yp_z - p_z y = 0$

角運動量の演算子　$\displaystyle L_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right),\quad L_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right),\quad L_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$

角運動量成分間の交換関係

$L_xL_y - L_yL_x = i\hbar L_z,\quad L_yL_z - L_zL_y = i\hbar L_x,\quad L_zL_x - L_xL_z = i\hbar L_y$

角運動量成分と角運動量の二乗との交換関係

$L_xL^2 - L^2L_x = 0,\quad L_yL^2 - L^2L_y = 0,\quad L_zL^2 - L^2L_z = 0$

不確定性原理　$\Delta x\cdot\Delta p_x \geq \hbar,\quad \Delta y\cdot\Delta p_y \geq \hbar,\quad \Delta z\cdot\Delta p_z \geq \hbar$

ただし $\Delta x,\ \Delta y,\ \Delta z$ は位置座標の不確定性、$\Delta p_x,\ \Delta p_y,\ \Delta p_z$ は運動量成分の不確定性

粒子のスピン s

スピン s とは $\displaystyle\hbar = \frac{h}{2\pi}$ を単位として測った粒子自身のもつ固有の角運動量のこと。

$s = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots$　整数値　$\longrightarrow$　ボース粒子 (ボソン)

$\displaystyle s = \frac{1}{2},\ \frac{3}{2},\ \cdots$　半奇数値　$\longrightarrow$　フェルミ粒子 (フェルミオン)

[例] 電子はスピン $\frac{1}{2}$ のフェルミ粒子であり、光子はスピン 1 のボース粒子である。

電子スピンを入れた波動関数　$\psi = \psi(t,x,y,z,s)$　ただし s は電子スピン

電子のスピン状態には、上向き $(+)$ と下向き $(-)$ の二つの状態がある。すなわち　$s = \pm\frac{1}{2}$

二電子系の波動関数　$\Psi = \Psi(t,\ x_1,y_1,z_1,s_1,\ x_2,y_2,z_2,s_2)$

ただし x_1,y_1,z_1,s_1 は電子 1 の位置座標とスピン、x_2,y_2,z_2,s_2 は電子 2 の位置座標とスピン

二電子系の波動関数の反対称性　$\Psi(t,\ x_1,y_1,z_1,s_1,\ x_2,y_2,z_2,s_2) = -\Psi(t,\ x_2,y_2,z_2,s_2,\ x_1,y_1,z_1,s_1)$

[注] フェルミ粒子に属する電子の場合、スピンを含めた座標変数を入れ換えたとき、波動関数の符号因子が逆転する。$\longrightarrow$ 反対称性

[注] 二つ以上の電子が同時に同一の物理的状態を占有できないことの根源は、フェルミ粒子の波動関数 Ψ がもつ反対称性に由来する。$\longrightarrow$ Pauli(パウリ) の排他律