物理学演習II　第12回　箱の中の粒子

2015年12月18日　　担当：佐藤 純

問題1 **[3次元の閉じ込め運動]**

3辺の長さが a, b, c の直方体に閉じ込められた質量 m の粒子を考える．(下図参照)
すなわち，ポテンシャル

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0 & (0 < x < a,\ \ 0 < y < b,\ \ 0 < z < c) \\ \infty & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

中を運動する質量 m の粒子を考える．

(1-1) 運動量 $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ で運動する質量 m の古典的粒子の運動エネルギーを求めよ．

$E = \dfrac{|\vec{p}|^2}{2m} = \boxed{\dfrac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}}$

(1-2) 箱の内部において，この粒子の波動関数 $\psi(x,y,z)$ が満たすべき Schrödinger 方程式を書け．

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x) = E\psi(x)}$$

(1-3) 波動関数を

$$\psi(x,y,z) = X(x)Y(y)Z(z)$$

と変数分離したとき，$X(x)$，$Y(y)$，$Z(z)$ が満たす方程式を求めよ．

$\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = \dfrac{\partial^2}{\partial x^2}\{X(x)Y(y)Z(z)\} = X''(x)Y(y)Z(z)$

$\dfrac{\partial^2}{\partial y^2}\psi(x) = \dfrac{\partial^2}{\partial y^2}\{X(x)Y(y)Z(z)\} = X(x)Y''(y)Z(z)$

$\dfrac{\partial^2}{\partial z^2}\psi(x) = \dfrac{\partial^2}{\partial z^2}\{X(x)Y(y)Z(z)\} = X(x)Y(y)Z''(z)$ より，

$-\dfrac{\hbar^2}{2m}(X''YZ + XY''Z + XYZ'') = EXYZ$ なので，両辺を XYZ で割って，

$-\dfrac{\hbar^2}{2m}\left(\dfrac{X''}{X} + \dfrac{Y''}{Y} + \dfrac{Z''}{Z}\right) = E$ となる．ここで，

(x だけの関数)+ (y だけの関数)+ (z だけの関数)=定数なので，左辺各項は全て定数となる．

$-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{X''}{X} = E_x, \qquad \boxed{-\dfrac{\hbar^2}{2m}X''(x) = E_x X(x)}$

$-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{Y''}{Y} = E_y, \qquad \boxed{-\dfrac{\hbar^2}{2m}Y''(x) = E_y Y(x)}$

$-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{Z''}{Z} = E_z, \qquad \boxed{-\dfrac{\hbar^2}{2m}Z''(x) = E_z Z(x)} \qquad (E = E_x + E_y + E_z)$

(1-4) 一次元閉じ込め $(0 < x < a)$ の場合の Schrödinger 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) = E\psi(x)$$

の解

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x, \qquad E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2 \qquad (n = 1, 2, 3, \cdots)$$

を用いて，3 次元閉じ込めの場合の波動関数 $\psi(x,y,z)$ およびエネルギー E を決定せよ．

$$X(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n_x\pi}{a}x,\qquad E_x=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n_x^2\qquad (n_x=1,2,3,\cdots)$$
$$Y(y)=\sqrt{\frac{2}{b}}\sin\frac{n_y\pi}{b}y,\qquad E_y=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mb^2}n_y^2\qquad (n_y=1,2,3,\cdots)$$
$$Z(z)=\sqrt{\frac{2}{c}}\sin\frac{n_z\pi}{c}z,\qquad E_z=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mc^2}n_z^2\qquad (n_z=1,2,3,\cdots)$$

より，

$$\boxed{\psi(x)=\frac{2^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{abc}}\left(\sin\frac{n_x\pi}{a}x\right)\left(\sin\frac{n_y\pi}{b}y\right)\left(\sin\frac{n_z\pi}{c}z\right)}$$

$$\boxed{E=\frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{a^2}+\frac{n_y^2}{b^2}+\frac{n_z^2}{c^2}\right)\qquad (n_x,n_y,n_z=1,2,3,\cdots)}$$

(1-5) $a=b=2c$ の場合に，基底状態エネルギー，第 1 励起エネルギー，第 2 励起エネルギーを求め，それぞれの縮退度を述べよ．

$a=b=2c$ であるので，余分な定数部分を前にくくり出すと，

$$E_{n_x,n_y,n_z}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\frac{1}{4c^2}\left(n_x^2+n_y^2+4n_z^2\right)$$

となるので，$n_x,n_y,n_z=1,2,3,\cdots$ に対し，$n_x^2+n_y^2+4n_z^2$ が小さい順に並べればよい．異なる量子数の組 (n_x,n_y,n_z) に対して同じエネルギーを与えるとき，それらの状態は縮退している，という．

基底状態：$(n_x,n_y,n_z)=(1,1,1),\quad n_x^2+n_y^2+4n_z^2=6$

第 1 励起状態：$(n_x,n_y,n_z)=(2,1,1),(1,2,1)$
$n_x^2+n_y^2+4n_z^2=9$
$\Rightarrow$ 2 重縮退

第 2 励起状態：$(n_x,n_y,n_z)=(2,2,1)$
$n_x^2+n_y^2+4n_z^2=12$
$\Rightarrow$ 縮退なし

第 3 励起状態：$(n_x,n_y,n_z)=(3,1,1)(1,3,1)$
$n_x^2+n_y^2+4n_z^2=14$
$\Rightarrow$ 2 重縮退