物理学演習II　第14回　3次元の閉じ込め，期待値，不確定性関係

2018年1月19日　　担当：佐藤 純

問題1 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，箱の中では $V = 0$, 外では $V = \infty$ のポテンシャル V 中を運動する質量 m の粒子を考える．

(1-1) 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 方程式は

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

である．波動関数を

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

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

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

より，

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(X''YZ + XY''Z + XYZ''\right) = EXYZ$$

なので，両辺を XYZ で割って，

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{X''}{X}+\frac{Y''}{Y}+\frac{Z''}{Z}\right) = E$$

となる．ここで，

$$(x\,\text{だけの関数}) + (y\,\text{だけの関数}) + (z\,\text{だけの関数}) = \text{定数}$$

なので，左辺各項は全て定数となる．

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{X''}{X} = E_x, \quad \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}X''(x) = E_x X(x)}$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{Y''}{Y} = E_y, \quad \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}Y''(x) = E_y Y(x)}$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{Z''}{Z} = E_z, \quad \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}Z''(x) = E_z Z(x)}$$
$$(E = E_x + E_y + E_z)$$

(1-2) 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，

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

(1-3) $b=c=2a$ の場合に，基底状態エネルギー，第 1, 2, 3 励起エネルギーを求め，それぞれの縮退度を述べよ．

$b=c=2a$ であるので、余分な定数部分を前にくくり出すと、

$$\begin{aligned}E_{n_x,n_y,n_z}&=\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\left(\frac{\pi}{a}\right)^2n_x^2+\left(\frac{\pi}{b}\right)^2n_x^2+\left(\frac{\pi}{c}\right)^2n_x^2\right\}\\&=\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\left(\frac{\pi}{a}\right)^2n_x^2+\left(\frac{\pi}{2a}\right)^2n_x^2+\left(\frac{\pi}{2a}\right)^2n_x^2\right\}\\&=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{2a}\right)^2\left(4n_x^2+n_y^2+n_z^2\right)\end{aligned}$$

となる．分数にすると計算が面倒なので分数にならないように前に $\left(\frac{\pi}{2a}\right)^2$ をくくりだす．
$n_x,n_y,n_z=1,2,3,\cdots$ に対し、$\boxed{4n_x^2+n_y^2+n_z^2}$ が小さい順に並べればよい。
(i) まず，全部 1 のときが一番小さい．$(n_x,n_y,n_z)=(1,1,1)$．
$4n_x^2+n_y^2+n_z^2=4+1+1=6$ である．$E_{111}=6e$.
(ii) 次に，どこかひとつだけ 2 にするのだが，n_x を 2 にしてしまうと，
$(n_x,n_y,n_z)=(2,1,1)$ より $4n_x^2+n_y^2+n_z^2=16+1+1=18$ と一気に増えてしまう．
そこで，n_y だけ 2 にして $(n_x,n_y,n_z)=(1,2,1)$ とすると $4n_x^2+n_y^2+n_z^2=4+4+1=9$ となり，18 より小さく出来る．これが 2 番目に小さいエネルギーである．$n_z=2$ としても同様で，結局 $E_{121}=E_{112}=9e$ が次に小さいエネルギーとなる．
(iii) この次は，$(n_x,n_y,n_z)=(2,1,1),(1,2,2),(1,3,1)$ などが考えられるが，$4n_x^2+n_y^2+n_z^2$ を計算すると $E_{211}=18e$, $E_{122}=12e$, $E_{131}=14e$ となる．

以上より，エネルギーを小さい順に並べると

$$\begin{aligned}&E_{111}=6e,\\&E_{121}=E_{112}=9e,\\&E_{122}=12e,\end{aligned}$$

$$E_{131} = E_{113} = 14e,$$
$$E_{211} = 18e,$$

となる．

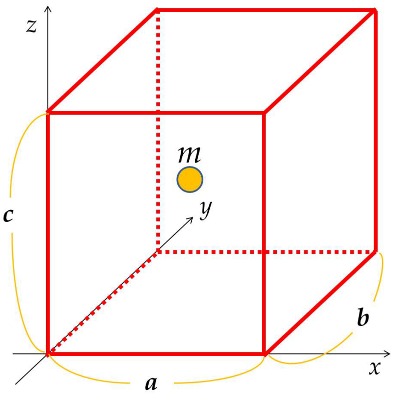
異なる量子数の組 (n_x, n_y, n_z) に対して同じエネルギーを与えるとき，それらの状態は縮退している，という．

基底状態：$E_{111} = 6e$ $\Rightarrow$ 縮退なし

第 1 励起状態：$E_{121} = E_{112} = 9e$ $\Rightarrow$2 重縮退

第 2 励起状態：$E_{122} = 12e$ $\Rightarrow$ 縮退なし

第 3 励起状態：$E_{131} = E_{113} = 14e$ $\Rightarrow$2 重縮退



問題 2 1 次元の領域 $0 < x < a$ に閉じ込められた質量 m の粒子の波動関数は

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

で表される．

(2-1) 位置 $\hat{x}$ と運動量 $\hat{p}_x$ の期待値 $\langle \hat{x} \rangle$, $\langle \hat{p}_x \rangle$ を求めよ．

$$\begin{aligned}
\langle \hat{x} \rangle &= \int_0^a \Psi_n^*(x) \hat{x} \Psi_n(x) \mathrm{d}x = \frac{2}{a} \int_0^a x \sin^2 \left(\frac{n\pi}{a} x \right) \mathrm{d}x \\
&= \frac{2}{a} \int_0^a x \frac{1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{a} x\right)}{2} \mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{a} \int_0^a x \mathrm{d}x - \frac{1}{a} \int_0^a x \cos \left(\frac{2n\pi}{a} x \right) \mathrm{d}x,
\end{aligned}$$

$$\int_0^a x \mathrm{d}x = \left[\frac{1}{2} x^2 \right]_0^a = \frac{1}{2} a^2,$$

$$\begin{aligned}
&\int_0^a x \cos \left(\frac{2n\pi}{a} x \right) \mathrm{d}x = \frac{a}{2n\pi} \int_0^a x \left\{ \sin \left(\frac{2n\pi}{a} x \right) \right\}' \mathrm{d}x \\
&= \frac{a}{2n\pi} \left[x \sin \left(\frac{2n\pi}{a} x \right) \right]_0^a \\
&\quad - \frac{a}{2n\pi} \int_0^a \sin \left(\frac{2n\pi}{a} x \right) \mathrm{d}x = 0
\end{aligned}$$

より，$\langle \hat{x} \rangle = \dfrac{a}{2}$ を得る．

$$
\begin{aligned}
\langle \hat{p}_x \rangle &= \int_0^a \Psi_n^*(x) \hat{p}_x \Psi_n(x) \mathrm{d}x \\
&= (-\mathrm{i}\hbar) \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \left\{ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right\} \mathrm{d}x \\
&= (-\mathrm{i}\hbar) \frac{2}{a} \frac{n\pi}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \mathrm{d}x \\
&= (-\mathrm{i}\hbar) \frac{2}{a} \frac{n\pi}{a} \frac{1}{2} \int_0^a \sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) \mathrm{d}x \\
&= (-\mathrm{i}\hbar) \frac{2}{a} \frac{n\pi}{a} \frac{1}{2} \frac{a}{2n\pi} \left[-\cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) \right]_0^a \\
&= 0
\end{aligned}
$$

より，$\langle \hat{p}_x \rangle = 0$ を得る．

(2-2) 位置 $\hat{x}$ と運動量 $\hat{p}_x$ の 2 乗の期待値 $\langle \hat{x}^2 \rangle$, $\langle \hat{p}_x^2 \rangle$ を求めよ．

$$
\begin{aligned}
\langle \hat{x}^2 \rangle &= \int_0^a \Psi_n^*(x) \hat{x}^2 \Psi_n(x) \mathrm{d}x = \frac{2}{a} \int_0^a x^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \mathrm{d}x \\
&= \frac{2}{a} \int_0^a x^2 \frac{1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)}{2} \mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{a} \int_0^a x^2 \mathrm{d}x - \frac{1}{a} \int_0^a x^2 \cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) \mathrm{d}x,
\end{aligned}
$$

$$
\int_0^a x^2 \mathrm{d}x = \left[\frac{1}{3} x^3 \right]_0^a = \frac{1}{3} a^3,
$$

$$
\begin{aligned}
&\int_0^a x^2 \cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) \mathrm{d}x \\
&= \frac{a}{2n\pi} \int_0^a x^2 \left\{ \sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) \right\}' \mathrm{d}x \\
&= \frac{a}{2n\pi} \left[x^2 \sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) \right]_0^a \\
&\quad - \frac{a}{2n\pi} \int_0^a 2x \sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) \mathrm{d}x \\
&= \left(\frac{a}{2n\pi}\right)^2 \int_0^a 2x \left\{ \cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) \right\}' \mathrm{d}x \\
&= \left(\frac{a}{2n\pi}\right)^2 \left[2x \cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) \right]_0^a \\
&\quad - \left(\frac{a}{2n\pi}\right)^2 \int_0^a 2 \cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) \mathrm{d}x \\
&= \left(\frac{a}{2n\pi}\right)^2 2a
\end{aligned}
$$

より，$\langle \hat{x}^2 \rangle = \dfrac{1}{3} a^2 - \left(\dfrac{a}{2n\pi}\right)^2 2 = \dfrac{a^2}{3} - \dfrac{a^2}{2n^2\pi^2}$ を得る．

$$
\begin{aligned}
\langle \hat{p}_x^2 \rangle &= \int_0^a \Psi_n^*(x) \hat{p}_x^2 \Psi_n(x) \mathrm{d}x \\
&= (-\mathrm{i}\hbar)^2 \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \left\{ \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right\} \mathrm{d}x \\
&= \frac{2\hbar^2}{a} \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \mathrm{d}x \\
&= \frac{2\hbar^2}{a} \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \frac{1}{2} \int_0^a \left\{ 1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) \right\} \mathrm{d}x \\
&= \frac{2\hbar^2}{a} \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \frac{1}{2} a \\
&= \left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2
\end{aligned}
$$

より，$\langle \hat{p}_x^2 \rangle = \left(\dfrac{n\pi\hbar}{a}\right)^2$ を得る．

(2-3) 位置の不確かさ Δx と運動量の不確かさ Δp_x が

$$
\Delta x = \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2}, \qquad \Delta p_x = \sqrt{\langle \hat{p}_x^2 \rangle - \langle \hat{p}_x \rangle^2}
$$

で求まるとき，

$$
\Delta x \cdot \Delta p_x > \hbar/2
$$

となることを示せ．

$$
\begin{aligned}
(\Delta x \cdot \Delta p_x)^2 &= (\Delta x)^2 (\Delta p_x)^2 \\
&= \left(\langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2\right) \left(\langle \hat{p}_x^2 \rangle - \langle \hat{p}_x \rangle^2\right) \\
&= \left(\frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2n^2\pi^2} - \left(\frac{a}{2}\right)^2\right) \left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2 \\
&= \left(\frac{a^2}{12} - \frac{a^2}{2n^2\pi^2}\right) \left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2 \\
&= \hbar^2 \left(\frac{n^2\pi^2}{12} - \frac{1}{2}\right)
\end{aligned}
$$

ここで，$n \geq 1, \pi > 3$ より，

$$
(\Delta x \cdot \Delta p_x)^2 > \hbar^2 \left(\frac{1^2 3^2}{12} - \frac{1}{2}\right) = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2
$$

であるが，$\Delta x, \Delta p_x \geq 0$ なので，$\Delta x \cdot \Delta p_x > \hbar/2$ が示された．