2010 Dec. 6

量子力学 I (上田正仁) Homework.1

３次元空間における無限に高い井戸型ポテンシャル

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0 & (0 < x < L \text{ かつ } 0 < y < L \text{ かつ } 0 < z < L) \\ \infty & \text{それ以外} \end{cases} \tag{1}$$

に閉じ込められた電子の運動を考え, 系のエネルギー E が一定の定常状態の波動関数を求める.

問題 1 電子の質量を m とすると, その古典的なエネルギーは

$$\frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right) + V(x,y,z) \tag{2}$$

と表せる. 量子化の手続きを行い, ハミルトニアンを求め, エネルギー E の定常状態のシュレーディンガー方程式を導け.

問題 2 シュレーディンガー方程式を解くために, 波動関数を次のように変数分離する: $\Psi(x,y,z) = \phi_1(x)\phi_2(y)\phi_3(z)$. これを代入し, 少し変形するとシュレーディンガー方程式は以下の形になることを示せ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\phi_1''(x)}{\phi_1(x)} + \frac{\phi_2''(y)}{\phi_2(y)} + \frac{\phi_3''(z)}{\phi_3(z)}\right) = E, \tag{3}$$

ただし $\phi_1''(x) = d^2\phi_1(x)/dx^2, \ldots$ である.

問題 3 さて, 上の方程式の左辺の第 1,2,3 項はそれぞれ x, y, z のみの関数であり, 右辺が定数なので左辺の第 1,2,3 項それぞれが定数にならなければならない. この定数を $E_1, E_2, E, 3$ とすれば, 問題の方程式は以下の３つの方程式に帰着される

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi_1''(x) = E_1\phi_1(x), \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\phi_2''(y) = E_2\phi_2(y), \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\phi_3''(z) = E_3\phi_3(z), \tag{4}$$

ただし $E = E_1 + E_2 + E_3$. $x = 0, L$ または $y = 0, L$ または $z = 0, L$ で波動関数が 0 になるという境界条件の下でこれらを解き, 可能な E_1, E_2, E_3 を全て求めよ. (解の全体にかかる定数は決定しなくてよい.)

問題 4 以上の手続きを踏まえ, この系の定常状態として可能な波動関数 $\Psi(x,y,z)$ を規格化を含めて全て書き下し, 各波動関数のエネルギーが, 3 つの自然数 (正の整数) n_1, n_2, n_3 によって

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2\right) \tag{5}$$

と表されることを示せ.

Key Point ポテンシャルが 0 であるが, エネルギーが 0 となるような状態は存在せず, 最低のエネルギーは有限である (**零点エネルギー**). また, 全てのエネルギーが定常状態として可能という訳では無く, 可能なエネルギーは離散的になっている, これらは量子力学に特有の現象である. 可能なエネルギーは必ずしも状態と一対一に対応する訳ではなく, 複数の状態が同じエネルギーを持つことがある (例えば $(n_1, n_2, n_3) = (2,1,1), (1,2,1), (1,1,2)$). このような系には**縮退がある**という.