量子力学 I 演習 問題 (第 9 回)

樋口 さぶろお*

1997 年 12 月 18 日

[9-1]　3 次元の箱型ポテンシャル

質量 m の量子力学的粒子が, 3 辺が $a \times b \times c$ の箱に閉じ込められている. すなわち 3 次元のポテンシャル

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

のもとで運動している.

1. Hamiltonian の固有状態と固有値を求めよ.

Hint. 変数分離.

2. 粒子が, 上で求めた固有状態の 1 つにあるときに, 箱の壁 $x = a$ が受ける圧力を求めよ.

Hint. $dE = -pdV$.

3. $L := a = b = c$ とする. エネルギーの固有値の大きさが E と $E+dE$ の間にある準位の数を $\rho(E)dE$ とかく. 準位密度 $\rho(E)$ を評価せよ.

*`hig@rice.c.u-tokyo.ac.jp`, URL: `http://rice.c.u-tokyo.ac.jp/~hig/`, Room: Komaba 16-809B, Phone: (03)54.54.67.35

[9-2]　1 次元井戸型ポテンシャル

1 次元の粒子が, ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & (x < 0) \\ 0 & (0 < x < L) \\ 0 < V_0 < \infty & (x > L) \end{cases} \tag{1}$$

のもとで運動している. 束縛状態を考えよう.

1. 基底状態, 第 1,2,3 励起状態が存在するとして, その波動関数の様子を直観的に描け.

2. 以下の手順に従って, 束縛状態がいくつあるかを厳密に考えよう. まず, 境界条件を考慮すると, 領域 I $(0 < x < L)$, 領域 II $(x > L)$ それぞれで, Schrödinger 方程式の解が

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = A\sin(kx), \tag{2}$$

$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = B\exp(-\kappa x) \tag{3}$$

であることを示せ. ただし Hamiltonian の固有値は

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = V_0 - \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}. \tag{4}$$

3. $x = L$ での接続条件 $\psi_{\mathrm{I}}(L) = \psi_{\mathrm{II}}(L)$, $\psi'_{\mathrm{I}}(L) = \psi'_{\mathrm{II}}(L)$ から, 条件

$$kL\cot(kL) = -\kappa L \tag{5}$$

を導け.

4. (4) から κL を kL で表す式をもう一つ作れ.

5. 縦軸を κL, 横軸を kL にとり, 許される k の値を 2 つのグラフの交点として示せ.

[9-3]　回転対称井戸型ポテンシャル

質量 m の量子力学的粒子が, 2 次元空間を, ポテンシャル

$$V(x,y) = \begin{cases} 0 & (x^2 + y^2 < a^2) \\ +\infty & (x^2 + y^2 \geq a^2) \end{cases}$$

のもとで運動している.

1. Hamiltonian の固有状態を求める．波動関数が動径部分 $R(r)$ と角度部分 $\Theta(\theta)$ の積でかけるとして，$\Theta(\theta)$ の満たす方程式をみちびけ (Θ が，ある演算子の固有状態であるという式になる)．ただし，Laplacian の極座標表示は

$$\nabla^2 = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2}. \tag{6}$$

2. 角度部分の線型独立な解が $\Theta_n(\theta) \sim \exp(in\theta)$, $n \in \mathbb{Z}$ であることを示せ．

3. 角度部分が $\Theta_n(\theta)$ であるときに動径部分 $R(r)$ の満たす方程式を考える．波動関数と座標 r を適当に定数倍すると Bessel の微分方程式

$$\frac{1}{z}\frac{d}{dz}z\frac{d}{dz}f(z) + \left(1 - \frac{n^2}{z^2}\right)f(z) = 0$$

に帰着することを示せ．

4. Bessel の微分方程式の解で，$z = 0$ で発散しないものが Bessel 関数 $J_n(z)$ である．Bessel 関数の $z > 0$ なる零点を $0 < \gamma_{n1} < \gamma_{n2} < \cdots < \gamma_{nk} < \cdots$ とする．固有関数が，規格化を除いて，n, k により

$$\Psi_{n,k}(x, y) \propto J_n(\gamma_{nk} r/a) \exp(in\theta)$$

となることを示し，エネルギー固有値を γ_{nk} を用いてかけ．