2007年7月18日

2．井戸型ポテンシャル
Square well potential

2－3　球形井戸型ポテンシャル
Spherical square potential

　半径 r_0 の球内に制限される井戸型ポテンシャルのハミルトニアンは

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(r) \tag{2.3.1}$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

$$V(r) = \begin{cases} 0 & [0 \le r \le r_0] \\ \infty & [r_0 < r] \end{cases} \tag{2.3.2}$$

と表される。エネルギー固有値は

$$E_{n,l} = \frac{\hbar^2 u_{l,n}^2}{2mr_0^2}$$

波動関数は

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{2.3.3}$$

$$R_{nl}(r) = j_l\left(\frac{r u_{nl}}{r_0}\right) \tag{2.3.4}$$

である。ただし，u_{nl} は球ベッセル関数 $j_l(u)$ の n 番目の零点とする。$Y_{lm}(\theta,\varphi)$ は球面調和関数であり，

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi) \tag{2.3.5}$$

$$\Theta_{lm}(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos\theta) \tag{2.3.6}$$

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \tag{2.3.7}$$

で表される。球ベッセル関数は三角関数を使って

$$j_0(u) = \frac{\sin u}{u},$$

$$j_1(u) = \frac{\sin u - u\cos u}{u^2},$$

$$j_2(u) = \frac{(3-u^2)\sin u - 3u\cos u}{u^3},\ \cdots$$

などと表される。

－－

（付録２－３　球形井戸型ポテンシャル）

半径 r_0 の球形井戸型ポテンシャルのハミルトニアンは

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(r) \tag{A2.3.1}$$

$$r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$$

$$V(r)=\begin{cases}0 & [0 \le r \le r_0] \\ \infty & [r_0 < r]\end{cases} \tag{A2.3.2}$$

と表される。シュレーディンガー方程式は

$$\hat{H}\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z)$$

$$\Leftrightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(r)\right]\psi(r,\theta,\varphi)=E\psi(r,\theta,\varphi)$$

$$\Leftrightarrow \left\{-\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]+V(r)\right\}\psi(r,\theta,\varphi)=E\,\psi(r,\theta,\varphi)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V(r)\right]\psi=0 \tag{A2.3.3}$$

となる。

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi) \tag{A2.3.4}$$

とおき，式 (A2.3.3) に代入すると

$$\Theta(\theta)\Phi(\varphi)\frac{\partial^2R(r)}{\partial r^2}+\Theta(\theta)\Phi(\varphi)\frac{2}{r}\frac{\partial R(r)}{\partial r}+\frac{R(r)\Phi(\varphi)}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\right)+\frac{R(r)\Theta(\theta)}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Phi(\varphi)}{\partial\varphi^2}$$
$$+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V(r)\right]R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)=0$$

両辺を $R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ でわり， r^2 をかけると

$$\frac{r^2}{R(r)}\frac{\partial^2R(r)}{\partial r^2}+\frac{2r}{R(r)}\frac{\partial R(r)}{\partial r}-\frac{1}{\Theta(\theta)\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\right]+\frac{1}{\Phi(\varphi)\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Phi(\varphi)}{\partial\varphi^2}$$
$$+\frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[E-V(r)\right]=0$$

さらに，

$$\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left[r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right]+\frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[E-V(r)\right]=-\frac{1}{\Theta(\theta)\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\right]-\frac{1}{\Phi(\varphi)\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Phi(\varphi)}{\partial\varphi^2}$$

と書き直す。

この関係が任意の r，θ，φ に対して成り立つためには，両辺が定数でなければならない。定数 λ を導入し，

$$\begin{cases}\dfrac{1}{R(r)}\dfrac{d}{dr}\left[r^2\dfrac{\partial R(r)}{\partial r}\right]+\dfrac{2mr^2}{\hbar^2}\left[E-V(r)\right]=\lambda \\ \dfrac{1}{\Theta(\theta)\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\dfrac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\right]+\dfrac{1}{\Phi(\varphi)\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2\Phi(\varphi)}{\partial\varphi^2}=-\lambda\end{cases}$$

とする。

二つ目の式の両辺に $\sin^2\theta$ をかけると，

$$\frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\right]+\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{\partial^2\Phi(\varphi)}{\partial\varphi^2}=-\lambda\sin^2\theta$$

移項して

$$\frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\right]+\lambda\sin^2\theta=-\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{\partial^2\Phi(\varphi)}{\partial\varphi^2}$$

となる。

この関係が任意の θ，φ に対して成り立つためには，両辺が定数でなければならない。定数 m を導入し，

$$\frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left[\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\right]+\lambda\sin^2\theta=m^2$$

$$-\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}=m^2$$

とする。さらに $\lambda=l(l+1)$ として，

$$\frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left[\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\right]+l(l+1)\sin^2\theta=m^2$$

$$\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}=-m^2$$

変形すると

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left[\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\right]+\left[l(l+1)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\Theta(\theta)=0$$

$$\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}=-m^2\,\Phi(\varphi)$$

となる。

結局，解くべき方程式は，

$$\frac{1}{R(r)}\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{dR(r)}{dr}\right]+\frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[E-V(r)\right]=l(l+1)$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left[\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\right]+\left[l(l+1)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\Theta(\theta)=0$$

$$\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}=-m^2\,\Phi(\varphi)$$

である。

ここで動径部分に関する微分方程式

$$\frac{1}{R(r)}\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{dR(r)}{dr}\right]+\frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[E-V(r)\right]=l(l+1)$$

$$\Leftrightarrow\frac{r^2}{R(r)}\frac{d^2R(r)}{dr^2}+\frac{2r}{R(r)}\frac{dR(r)}{dr}+\frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[E-V(r)\right]=l(l+1)$$

$$\Leftrightarrow\frac{d^2R(r)}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr}+\left\{\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V(r)\right]-\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}R(r)=0$$

の解を求める。

$0 \le r \le r_0$ の範囲では

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr} + \left[\frac{2m}{\hbar^2}E - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R(r) = 0$$

となるが，

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\rho = kr = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} r \Leftrightarrow r = \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}}\rho$$

$$R(r) = S(\rho)$$

とすれば，

$$\frac{d^2S(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dS(\rho)}{d\rho} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]S(\rho) = 0$$

と変形できる。この微分方程式の解の基本系は，第 1 種球ベッセル関数

$$j_l(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} J_{l+1/2}(\rho)$$

および第 2 種球ベッセル関数

$$n_l(\rho) = (-1)^{l+1} j_{-l-1}(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} N_{l+1/2}(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} J_{-l+1/2}(\rho)$$

で与えられる。

$$j_0(z) = \frac{\sin z}{z},\ j_1(z) = \frac{\sin z - z\cos z}{z^2},\ j_2(z) = \frac{(3-z^2)\sin z - 3z\cos z}{z^3},\ \cdots$$

$$n_0(z) = -\frac{\cos z}{z},\ n_1(z) = -\frac{\cos z + z\sin z}{z^2},\ n_2(z) = -\frac{(3-z^2)\cos z + 3z\sin z}{z^3},\ \cdots$$

などから，特異性を持たず境界で連続な系列は，第 1 種球ベッセル関数に限定される。

　結局，動径部分の波動関数は

$$R(r) = j_l(\rho) = j_l(kr)$$

となる。$r = r_0$ で $R(r) = j_l(kr) = 0$ となるには，$u_{l,n}$ を球ベッセル関数 $j_l(u)$ の n 番目の零点であるとして，$kr_0 = u_{l,n}$ であればよい。

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

から，

$$E_l = \frac{\hbar^2 u_{l,n}^2}{2mr_0^2}$$

となる。

　なお，第 1 種球ベッセル関数のベキ級数展開は

$$j_n(\rho) = (2\rho)^n \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-1)^\nu (n+\nu)!}{\nu!(2n+2\nu+1)!}\rho^{2\nu} = 2^n \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-1)^\nu (n+\nu)!}{\nu!(2n+2\nu+1)!}\rho^{n+2\nu}$$

で与えられる。