2007年7月18日

２．井戸型ポテンシャル
Square well potential

２－２　直方体井戸型ポテンシャル
Rectangular square well potential

三次元の直方体井戸型ポテンシャルのハミルトニアンは

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(x,y,z) \tag{2.2.1}$$

$$V(x,y,z) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z) \tag{2.2.2}$$

$$\begin{cases} V_x(x) = V_y(y) = V_z(z) = 0 & [0 \le x \le a, 0 \le y \le b, 0 \le z \le c] \\ V_x(x) = V_y(y) = V_z(z) = \infty & [\text{otherwise}] \end{cases} \tag{2.2.3}$$

と表される。エネルギー固有値は

$$E_{\xi\eta\varsigma} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{\xi^2}{a^2} + \frac{\eta^2}{b^2} + \frac{\zeta^2}{c^2}\right) \quad [\xi,\eta,\varsigma = 1,2,3,\cdots] \tag{2.2.4}$$

波動関数は

$$\psi_{\xi\eta\varsigma}(x,y,z) = \begin{cases} \sqrt{\frac{8}{abc}}\sin\frac{\xi\pi x}{a}\sin\frac{\eta\pi y}{b}\sin\frac{\varsigma\pi z}{c} & [0 \le x \le a, 0 \le y \le b, 0 \le z \le c] \\ 0 & [\text{elsewhere}] \end{cases} \tag{2.2.5}$$

である。

－－－

（付録２－２　直方体井戸型ポテンシャル）

三次元の直方体井戸型ポテンシャルのハミルトニアンは

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(x,y,z) \tag{A2.2.1}$$

$$V(x,y,z) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z) \tag{A2.2.2}$$

$$\begin{cases} V_x(x) = V_y(y) = V_z(z) = 0 & [0 \le x \le a, 0 \le y \le b, 0 \le z \le c] \\ V_x(x) = V_y(y) = V_z(z) = \infty & [\text{otherwise}] \end{cases} \tag{A2.2.3}$$

と表される。シュレーディンガー方程式は

$$\begin{aligned} &\hat{H}\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \\ &\Leftrightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(x,y,z)\right]\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \end{aligned} \tag{A2.2.4}$$

となる。

$$\psi(x,y,z) = X(x)Y(y)Z(z) \tag{A2.2.5}$$

とおき，式 (A2.2.4) に代入すると

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[Y(y)Z(z)\frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2}+X(x)Z(z)\frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2}+X(x)Y(y)\frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2}\right]$$
$$+V(x,y,z)X(x)Y(y)Z(z)=EX(x)Y(y)Z(z)$$

両辺に $-\dfrac{2m}{\hbar^2 X(x)Y(y)Z(z)}$ をかけると

$$\frac{1}{X(x)}\frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2}+\frac{1}{Y(y)}\frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2}+\frac{1}{Z(z)}\frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2}-\frac{2m}{\hbar^2}V(x,y,z)=-\frac{2m}{\hbar^2}E$$
$$\Leftrightarrow\frac{1}{X(x)}\frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2}+\frac{1}{Y(y)}\frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2}+\frac{1}{Z(z)}\frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2}-\frac{2m}{\hbar^2}\left[V_x(x)+V_y(y)+V_z(z)\right]=-\frac{2m}{\hbar^2}E$$
$$\Leftrightarrow\frac{1}{X(x)}\frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2}+\frac{1}{Y(y)}\frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V_x(x)-V_y(y)\right]=-\frac{1}{Z(z)}\frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2}+\frac{2m}{\hbar^2}V_z(z)$$

上の式の左辺は x と y だけの関数，右辺は z だけの関数である。したがって上の式が任意の x，y，z に対して成立するためには，両辺が定数でなければならない。この定数を $\dfrac{2mE_z}{\hbar^2}$ とおくと，次の二つの方程式が得られる。

$$\frac{1}{X(x)}\frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2}+\frac{1}{Y(y)}\frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V_x(x)-V_y(y)\right]=\frac{2mE_z}{\hbar^2} \quad \text{(A2.2.6)}$$

$$-\frac{1}{Z(z)}\frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2}+\frac{2m}{\hbar^2}V_z(z)=\frac{2mE_z}{\hbar^2} \quad \text{(A2.2.7)}$$

さらに，式 (A2.2.6) を移項して，

$$\frac{1}{X(x)}\frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-E_z-V_x(x)\right]=-\frac{1}{Y(y)}\frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2}+\frac{2m}{\hbar^2}V_y(y)$$

を得る。この式の左辺は x だけの関数，右辺は y だけの関数だから，前と同様に両辺を定数 $\dfrac{2mE_y}{\hbar^2}$ とおいて，

$$\frac{1}{X(x)}\frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-E_z-V_x(x)\right]=\frac{2mE_y}{\hbar^2} \quad \text{(A2.2.8)}$$

$$-\frac{1}{Y(y)}\frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2}+\frac{2m}{\hbar^2}V_y(y)=\frac{2mE_y}{\hbar^2} \quad \text{(A2.2.9)}$$

式 (A2.2.8) を変形して，

$$\frac{1}{X(x)}\frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-E_y-E_z-V_x(x)\right]=0 \quad \text{(A2.2.10)}$$

となるが，

$$E=E_x+E_y+E_z \quad \text{(A2.2.11)}$$

とすれば，式 (A2.2.10) は

$$\frac{1}{X(x)}\frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E_x-V_x(x)\right]=0 \quad \text{(A2.2.12)}$$

と書ける。また，式 (A2.2.9), (A2.2.7) から，

$$\frac{1}{Y(y)}\frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E_y-V_y(y)\right]=0 \quad \text{(A2.2.13)}$$

$$\frac{1}{Z(z)}\frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E_z-V_z(z)\right]=0 \tag{A2.2.14}$$

前節の結果を参考にして，波動関数は

$$\psi_{\xi\eta\varsigma}(x,y,z)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{8}{abc}}\sin\dfrac{\xi\pi x}{a}\sin\dfrac{\eta\pi y}{b}\sin\dfrac{\varsigma\pi z}{c} & \left[0\le x\le a, 0\le y\le b, 0\le z\le c\right]\\ 0 & \left[\mathrm{elsewhere}\right]\end{cases} \tag{A2.2.15}$$

エネルギー固有値は

$$E_{\xi\eta\varsigma}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{\xi^2}{a^2}+\frac{\eta^2}{b^2}+\frac{\zeta^2}{c^2}\right) \tag{A2.2.16}$$

$$\xi,\eta,\varsigma=1,2,3,\cdots$$

となる。