２次元系の量子力学 filename=quantum-2dim090603.tex

1　２次元系の量子力学を区別して取り上げる理由

1. 教育的であること：2 次元系は 1 次元系に比べてすこし複雑ではあるが、3 次元系に比べて数学的取り扱いが容易で、1 次元系ではあらわれなかった量子力学の基本法則の特徴が現れること。[2],[3],[4]
2. 2 次元系の量子力学の技術的応用が可能になってきたこと：1980 年代後半以来、ナノセンチメートル程度の微細加工の半導体技術により、固体素子中に井戸型ポテンシャル障壁を作りこむことが可能になった。[4, 5]
3. 系の次元の違いによる新しい物理現象の発現（新しい概念の発見）の可能性、または運動の自由度の制限による量子揺らぎの重要性

2　ハミルトニアンとシュレーディンガー方程式

2 次元空間においてポテンシャル $U(x,y)$ 中を運動する粒子の古典力学のハミルトニアン H はデカルト座標で、運動量 $p_x = m\dot{x}, p_y = m\dot{y}$ を用いて、

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2\right) + U(x,y) \tag{2.1}$$

となる。これを量子化する, すなわち

$$p_x \to \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x},\ p_y \to \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} \tag{2.2}$$

するとハミルトニアン演算子 $\hat{H}$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + U(x,y) \tag{2.3}$$

が得られる。ポテンシャル $U = U(x,y;t)$ の中を運動する粒子の時間に依存したシュレーディンガー方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(x,y;t)\right)\Psi(x,y;t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,y;t)}{\partial t} \tag{2.4}$$

と与えられる。特に、ポテンシャルが時間に陽に依存しない場合、$U = U(x,y)$、波動関数は空間部分と時間部分に変数分離される。

$$\Psi(x,y;t) \quad = \quad \psi(x,y)\ \mathrm{e}^{-iEt/\hbar}. \tag{2.5}$$

波動関数の空間部分 $\psi(x.t)$ は、時間に依存しないシュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(x,y)\right)\psi(x,y) = E\psi(x,y) \tag{2.6}$$

を満たす。

3　波動関数の確率解釈と規格化

デカルト座標における波動関数の規格化は、1 次元系におけるそれを拡張して、領域 $(x,y)-(x+dx,y+dy)$ に粒子が観測される確率は $|\Psi(x,y;t)|^2dx\ dy$ に比例する。x,y 座標における波動関数の規格化条件は

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,y;t)\Psi(x,y;t)\ dx\ dy=1, \tag{3.1}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,y)\psi(x,y)\ dx\ dy=1 \tag{3.2}$$

と与えられる。

4　2 次元系における自由粒子の波動関数

2 次元における自由粒子の解は平面波である。規格化定数を除いて

$$\begin{aligned}\Psi(x,y;t) &= \exp[i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)],\ (E=\hbar\omega) &(4.1)\\ &= \exp[i(k_xx+k_yy-\omega t)] &(4.2)\\ &= \cos(k_xx+k_yy-\omega t)+i\sin(k_xx+k_yy-\omega t) &(4.3)\end{aligned}$$

と表される。時間依存部分を除いた部分 $\psi(x,y)=\exp[i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})]$ を平面波であるということも多い。

5　ポテンシャル内に閉じ込められた粒子

今、ポテンシャルが次のように、変数 x,y の関数 $V(x),W(y)$ の和の形（変数分離型）になっている。

$$U(x,y)=V(x)+W(y). \tag{5.1}$$

ポテンシャルの関数形に対応して、波動関数も次のように、変数分離型で求める。

$$\psi(x,y)=X(x)\cdot Y(y). \tag{5.2}$$

この式を 2 次元のシュレーディンガー方程式（2.6）に代入すると

$$\begin{aligned}&[-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2})+V(x)+W(y)]X(x)Y(y)=EX(x)Y(y)\\ &\rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}[X^{"}Y+XY^{"}]+[V(x)+W(y)]XY=EXY. &(5.3)\end{aligned}$$

ここで次の記号を用いた。

$$X^{"}\equiv\frac{d^2X}{dx^2},Y^{"}\equiv\frac{d^2Y}{dy^2} \tag{5.4}$$

ここで式 (5.3) の両辺を XY で割って整理すると

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{X^{"}(x)}{X(x)}+V(x)]+[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{Y^{"}(y)}{Y(y)}+W(y)]=E. \tag{5.5}$$

任意の x, y の値に対して左辺の 2 つの部分の和が常に定数 E に等しくなるためには左辺の 2 つの部分はともに定数でなければならない。その定数をそれぞれ E_x, E_y とすると次の式が成り立つ。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}X^{"}(x)+V(x)X(x)=E_xX(x), \tag{5.6}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}Y^{"}(y)+W(y)Y(y)=E_yY(y), \tag{5.7}$$

$$E_x+E_y=E. \tag{5.8}$$

5.1 無限量子井戸に閉じ込められた粒子

1 次元系における無限量子井戸内の粒子と同様に、2 次元の量子井戸内の粒子の運動を量子力学的に取り扱う。ここで、ポテンシャルが長方形（矩形）で、x 方向の長さを a,y 方向の長さを b とし、この形をしたポテンシャルを

$$U(x,y)=\begin{cases} 0 & (0\le x\le a, 0\le y\le b) \\ \infty & (\text{その他の場合}). \end{cases} \tag{5.9}$$

とする。ポテンシャル（5.9）に対応して、境界条件は次のようになる。

$$X(0)=X(a)=0,\ Y(0)=Y(b)=0. \tag{5.10}$$

1 次元量子井戸の場合と同様にして、エネルギー固有値と（規格直交化された）固有関数は次のようになる。

$$E_x\equiv E_{n_x}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n_x^2,\ (n_x=1,2,3,\cdots), \tag{5.11}$$

$$E_y\equiv E_{n_y}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mb^2}n_y^2,\ (n_y=1,2,3,\cdots), \tag{5.12}$$

$$X_{n_x}(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}sin\left(\frac{\pi n_x}{a}x\right), \tag{5.13}$$

$$Y_{n_y}(y)=\sqrt{\frac{2}{b}}sin\left(\frac{\pi n_y}{b}x\right). \tag{5.14}$$

結局、2 次元の量子箱の中に閉じ込められた粒子のエネルギー固有値と固有関数は

$$E_{n_xn_y}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2m}(\frac{n_x^2}{a^2}+\frac{n_y^2}{b^2}),\ (n_x,n_y=1,2,3,\cdots), \tag{5.15}$$

$$\psi_{n_xn_y}(x,y)=X_{n_x}(x)Y_{n_y}(y). \tag{5.16}$$

となる。特に、正方形ポテンシャルの場合（$a = b$）には, エネルギー固有値は

$$E_{n_x n_y} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}(n_x^2 + n_y^2),\ (n_x, n_y = 1, 2, 3, \cdots), \tag{5.17}$$

となり、次の例のように、異なる（n_x, n_y）の値に対してエネルギー固有値が同じになる。これを 縮退または縮重（degeneration) という。

$$E_{n_x=1,n_y=2} = \frac{5\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} = E_{n_x=2,n_y=1}. \tag{5.18}$$

このように、1 次元系では現れなかった縮退という性質が 2 次元系では現れる。

5.2 2 次元等方調和振動子

ルトニアンが次のような 2 次元等方調和振動子を考える:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2) \tag{5.19}$$

このハミルトニアンは変数 x,y について分離されているので、それぞれ x, y についてのハミルトニアン $\hat{H}_x, \hat{H}_y$ を定義する。

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y, \tag{5.20}$$

$$\hat{H}_x \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \tag{5.21}$$

$$\hat{H}_y \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2. \tag{5.22}$$

これらの部分系のハミルトニアンはあきらかに交換する：

$$[\hat{H}_x, \hat{H}_y] = 0 \tag{5.23}$$

したがって、これらの部分系はそれぞれ 1 次元系の調和振動子となる。部分系のハミルトニアンの固有関数を $\psi_{n_x}(x), \psi_{n_y}(y)$、固有値を、$\hbar\omega(n_x + 1/2), (n_x = 0, 1, 2, \cdots), \hbar\omega(n_y + 1/2), (n_y = 0, 1, 2, \cdots)$ とすると、

$$\hat{H}_x\psi_{n_x}(x) = \hbar\omega(n_x + \frac{1}{2})\psi_{n_x}(x), \tag{5.24}$$

$$\hat{H}_y\psi_{n_y}(y) = \hbar\omega(n_y + \frac{1}{2})\psi_{n_y}(y) \tag{5.25}$$

が成立する。このとき、全系の波動関数を $\psi(x, y)(= \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y))$ とすれば、シュレーディンガー方程式

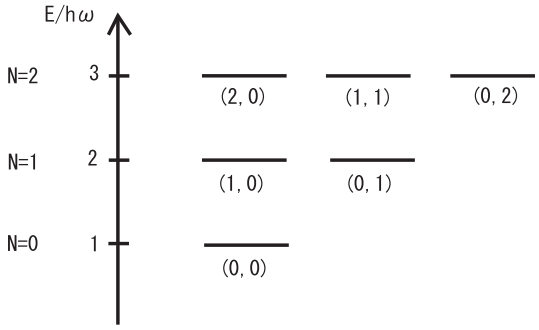
$$\hat{H}\psi(x, y) = E\psi(x, y) \tag{5.26}$$

が成立する。ただし、全系のエネルギー E は

$$E = \hbar\omega(n_x + \frac{1}{2}) + \hbar\omega(n_y + \frac{1}{2}), \tag{5.27}$$

$$= \hbar\omega(n_x + n_y + 1) \tag{5.28}$$

となる。この結果は、全系の状態を指定する量子数の組 (n_x, n_y) が異なっていても、量子数の和 $n_x + n_y (\equiv N)$ が同じであれば、エネルギーは同じである。すなわち, 縮退していることを意味する。　　今、与えられた N に対して、図に示



されているように、組み合わせ $(n_x, n_y) = (N, 0), (N-1, 1), (N-2, 2), \cdots, (0, N)$ という $N+1$ 重の縮退がある。

6　極座標を用いた演算子と波動関数の表現

6.1　ラプラス演算子、ハミルトニアンの表現

ラプラス演算子 ∇^2 は、2 次元運動の場合、平面極座標を用いても以下のように表される。

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \quad (\text{デカルト座標（直交直線座標）}) \tag{6.1}$$

$$= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (x = r\cos\phi, y = r\sin\phi\text{:平面極座標}) \tag{6.2}$$

$$= \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (x = r\cos\phi, y = r\sin\phi\text{:平面極座標}) \tag{6.3}$$

以上の関係式は変数変換のため以下の微分係数の計算結果を用いれば得られる。

$$x = r\cos\phi, y = r\sin\phi, (-\infty < x < \infty, -\infty < y < \infty), \tag{6.4}$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}, \tan\phi = \frac{y}{x}, (0 \leqq r < \infty, 0 \leqq \phi \leqq 2\pi), \tag{6.5}$$

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{1}{2}(x^2 + y^2)^{\frac{1}{2}-1} \times 2x = \frac{x}{r} = \cos\phi, \tag{6.6}$$

$$\frac{\partial r}{\partial y} = \frac{1}{2}(x^2 + y^2)^{\frac{1}{2}-1} \times 2y = \frac{y}{r} = \sin\phi. \tag{6.7}$$

以上の結果を用いて、以下のように、微分演算子が書き直される。

$$\frac{\partial}{\partial x}(\frac{y}{x}) = \frac{\partial}{\partial x}\tan\phi = \frac{\partial\phi}{\partial x}\frac{d\tan\phi}{d\phi} \rightarrow -\frac{y}{x^2} = \frac{1}{\cos^2\phi}\frac{\partial\phi}{\partial x} \tag{6.8}$$

$$\rightarrow \frac{\partial\phi}{\partial x} = -\frac{\sin\phi}{r}, \tag{6.9}$$

$$\frac{\partial}{\partial y}(\frac{y}{x}) = \frac{\partial}{\partial y}\tan\phi = \frac{\partial\phi}{\partial y}\frac{d\tan\phi}{d\phi} \rightarrow \frac{1}{x} = \frac{1}{\cos^2\phi}\frac{\partial\phi}{\partial y} \rightarrow \frac{\partial\phi}{\partial y} = \frac{\cos\phi}{r} \tag{6.10}$$

$$\rightarrow \quad \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\phi} = \cos\phi\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{6.11}$$

$$\rightarrow \quad \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\phi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\phi} = \sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{6.12}$$

6.2 （参考）演算子による置き換えについて *

粒子が 2,3 次元運動を行う場合には複数組の座標系を選択できる。しかし、座標の選択と量子化の手順においては注意が必要である。演算子による置き換えで量子化を行う場合はデカルト座標で行うべきである。

2 次元空間においてポテンシャル $U(x,y)$ 中を運動する粒子の古典力学のハミルトニアン H は極座標 (r,ϕ) では対応する一般化運動量 $p_r = m\dot{r}, p_\phi = mr^2\dot{\phi}$ を用いて、

$$H = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) + U(r\cos\phi, r\sin\phi) = \frac{1}{2m}(p_r^2 + \frac{p_\phi^2}{r^2}) + U(r\cos\phi, r\sin\phi) \tag{6.13}$$

となる。これを量子化する、すなわち

$$p_r \rightarrow \hat{p}_r = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r}, \tag{6.14}$$

$$p_\phi \rightarrow \hat{p}_\phi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{6.15}$$

と置き換えると、ラプラス演算子は

$$\boldsymbol{\nabla}^2 = (\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}) \tag{6.16}$$

となる。これは後述の式（6.2）または（6.3）で与えられるラプラス演算子とは明らかに異なる。実は式（6.2）または（6.3）で与えられるラプラス演算子を用いた結果が実験結果との一致を与える。2 次元以上の系における演算子への置き換えによる量子化は、デカルト座標系で行わなければならない。

すなわち、運動量の x, y 軸成分を、1 次元系と同様に、微分演算子に置き換える：、

$$p_x \rightarrow \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \tag{6.17}$$

$$p_y \rightarrow \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} \tag{6.18}$$

これらの演算子は 1 次元系と同様に、正準交換関係

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar, \tag{6.19}$$

$$[\hat{y}, \hat{p}_y] = i\hbar, \tag{6.20}$$

$$[\hat{x}, \hat{y}] = [\hat{x}, \hat{p}_y] = [\hat{y}, \hat{p}_x] = [\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0 \tag{6.21}$$

を満たす。極座標などへの変換が必要ならば、その後に変換すればよい。この事実には、単に実験にあうかどうかということと独立に、数学的に深い根拠があることが知られている。

関連したことは角度演算子、位相演算子、エネルギー大きさ演算子などに現れる。[6],[7],[8] 演算子が定義される領域に制限がある場合、すなわち有界（bounded）な場合に起こり、物理量に対応する演算子のエルミート性（自己共役性）と作用素としての波動関数の振る舞いに関連している。例えば、半径の場合にすでに注意したように、座標はマイナス無限大からプラス無限大まで定義されるが。半径はゼロから無限大まで定義される。角度はゼロから始り、π または 2π まで変化する。また粒子数はゼロから始まり、エネルギーには最低値がある。

6.3 極座標における波動関数の規格化

極座標における波動関数の規格化は以下のようになる。領域 $(r, \phi) - (r+dr, \phi+d\phi)$ に粒子が観測される確率は $|\Psi(r, \phi; t)|^2 r\ dr\ d\phi$ に比例する。極座標における波動関数の規格化条件は

$$\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \Psi^*(r, \phi; t)\Psi(r, \phi; t) r\ dr\ d\phi = 1 \tag{6.22}$$

と与えられる。ここで、被積分関数として変数 r も追加的因子になることと変数の可動領域が $(0 \leqq r < \infty,\ 0 \leqq \phi \leqq 2\pi)$ であることに注意する。前者の事情が現れる理由は、2 重積分における面積要素が変数変換によりヤコビアン（Jacobian）がつくこと、すなわち $dxdy = rdrd\phi$ となることにある。

一般に多変数関数は変数の組を変換することにより、変数分離型など簡単に表現できる場合がある。2 変数 (x, y) から別の 2 変数 (r, ϕ) に変換する場合には次のようにヤコビアン（Jacobian）という関数行列式が必要となる。

$$dxdy = Jdrd\phi, \tag{6.23}$$

$$J \equiv \frac{D(x, y)}{D(r, \phi)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial r} \\ \frac{\partial x}{\partial \phi} & \frac{\partial y}{\partial \phi} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \cos\phi & \sin\phi \\ -r\sin\phi & r\cos\phi \end{vmatrix} = r. \tag{6.24}$$

この事情を直観的に理解するには極座標における面積要素が 2 辺の大きさ $dr, rd\phi$ をもつ近似的な四角形の面積であることを使えばよい。さらに、波動関数 Ψ は変数変換がなされる場合には一般には関数形が変化するが、表現が煩雑になるので同じ関数記号を使用した。

7　2次元系における角運動量演算子

古典力学の場合と事情が異なり、量子力学においては角運動量は非常に重要な役割を果たす。ここでは、まず xy 面上の運動を考える。古典力学における角運動量の z 成分は運動量（p_x, p_y）を用いて $\ell_z = xp_y - yp_x$ のように与えられる。極座標 $(r, \phi), x = r\cos\phi, y = r\sin\phi$ を採用すると $\ell_z = mr^2\dot{\phi}$ と表される。

量子力学においては運動量演算子を用いて角運動量演算子（の直交直線座標表示）の z 成分 $\hat{\ell}_z$ は

$$\hat{\ell}_z = \frac{\hbar}{i}(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}). \tag{7.1}$$

となる。角運動量演算子の z 成分 $\hat{\ell}_z$ を平面極座標 (r, ϕ) を用いて表わしてみよう。変数変換のための微分係数の計算結果, (6.11), (6.12) を用いると

$$\begin{aligned} \hat{\ell}_z &= \frac{\hbar}{i}[r\cos\phi\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) - r\sin\phi\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)] \\ \to \hat{\ell}_z &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}. \end{aligned} \tag{7.2}$$

と表される。角運動量演算子は角度に依存する波動関数に作用することを想定すれば、量子力学における角運動量は波動関数の角度についての変化率の大きさを意味する。

角運動量演算子の z 成分 $\hat{\ell}_z$ の固有値方程式の一般解、規格化定数を求めてみよう。

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Phi(\phi)}{\partial\phi} = \alpha\Phi(\phi). \tag{7.3}$$

指数関数の性質を考えて

$$\Phi(\phi) \quad = N\exp(i\frac{\alpha\phi}{\hbar}), (N : \text{規格化定数}) \tag{7.4}$$

固有関数の規格化を行うことにより規格化定数を決める。

$$1 = \int_0^{2\pi} |\Phi(\phi)|^2 d\phi = N^2\int_0^{2\pi} d\phi \tag{7.5}$$

$$\to N = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \tag{7.6}$$

角度についての波動関数の一価性より

$$\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi) \to 1 = \exp(i\frac{2\pi\alpha}{\hbar}) \tag{7.7}$$

$$\to \alpha = \Lambda\hbar, (\Lambda = 0, \pm1, \pm2, \cdots). \tag{7.8}$$

このように、角運動量は $\hbar$ を単位とする離散的な値しか許されないことになる。（角運動量の量子化）。また固有関数を角運動量の量子化を考慮して、$\Phi_\Lambda(\phi)$ と記

すと、$\Lambda \neq \Lambda'$ の場合の、その直交性は

$$\int_0^{2\pi} \Phi_\Lambda^*(\phi)\Phi_{\Lambda'}(\phi)d\phi = \frac{[\mathrm{e}^{i(\Lambda'-\Lambda)\phi}]_0^{2\pi}}{i2\pi(\Lambda'-\Lambda)} = 0 \tag{7.9}$$

となる。結果をまとめると、

$$\Phi_\Lambda(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(i\Lambda\phi), (\Lambda = 0, \pm1, \pm2, \cdots.) \tag{7.10}$$

$$\hat{\ell}_z\Phi_\Lambda(\phi) = \Lambda\hbar\ \Phi_\Lambda(\phi), \tag{7.11}$$

$$\int_0^{2\pi} \Phi_\Lambda^*(\phi)\Phi_{\Lambda'}(\phi)d\phi = \delta_{\Lambda\Lambda'}. \tag{7.12}$$

ただし、クロネッカーの記号は $\delta_{\Lambda\Lambda'} = 1(\Lambda = \Lambda'), 0(\Lambda \neq \Lambda')$ と定義される。

また、今後の議論に有用と思われる関係式

$$\frac{\partial^2\Phi_\Lambda(\phi)}{\partial\phi^2} = -\Lambda^2\ \Phi_\Lambda(\phi) \tag{7.13}$$

も記しておく。 特に、角運動量の値がゼロ $(\Lambda = 0)$ の場合には、

$$\Phi_{\Lambda=0}(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \tag{7.14}$$

となり、固有関数は等方的となる。古典物理学においては、角運動量がゼロになるのは粒子が静止しているか、位置ベクトル $\boldsymbol{r}$ と運動量ベクトル $\boldsymbol{p}$ が平行になっている場合である。しかし、量子力学においては、角度変数についての微分係数がゼロの場合、すなわち方位の変化に対して、波動関数が変化しない、すなわち力学系の運動を決めるポテンシャルが軸対称である場合には角運動量がゼロになる。この2次元系での議論は、量子系においては対称軸の周りの回転は不可能（＝観測されない）ことの一例である。この点について、古典力学では物体の形状が軸対称でも非軸対称でも回転運動は可能であることと極めて対照的である。

8　2次元系における中心力ポテンシャルの下の運動 *

今、ポテンシャル $U(x, y)$ が原点からの距離に依存し、角度にはよらない (中心力ポテンシャル) 場合を考える：$U = U(r)$.

8.1　中心力ポテンシャルをもつシュレーディンガー方程式とその解

この場合、シュレーディンガー方程式は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) + U(r)\right]\psi = E\psi \tag{8.1}$$

と表される。角運動量演算子の z 成分を用いると、2 次元系のハミルトニアンは次のようにも表される。

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\hat{\ell}_z^2}{\hbar^2 r^2}\right)+U(r) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hat{\ell}_z^2}{2mr^2}+U(r) \end{aligned} \tag{8.2}$$

式（8.1）において、波動関数を変数分離型、$\psi = R(r)\Phi(\phi)$ として求める。微分演算を実行すると

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(R^{''}+\frac{R^{'}}{r})\Phi + UR\Phi - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Phi^{''}}{r^2}R = ER\Phi. \tag{8.3}$$

ここで次の微分係数記号を用いた。

$$R^{'} \equiv \frac{dR}{dr}, R^{''} \equiv \frac{d^2R}{dr^2}, \Phi^{''} \equiv \frac{d^2\Phi}{d\phi^2} \tag{8.4}$$

式（8.3）の両辺を $R\Phi$ で割ると

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{R^{''}}{R}+\frac{R^{'}}{rR}+U(r)\right]-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\Phi^{''}}{\Phi} = E \tag{8.5}$$

となる。ここで、左辺第一項は r だけの関数であり、右辺は定数項である。変数 r を固定して、独立に変数 ϕ を変化させたとき、上式が恒等式として成立するためには左辺第二項 $\Phi^{''}/\Phi$ が定数でなければならない。この定数を $-\Lambda^2$ とおく。（Λ^2 とおけば、角度の周期関数にはならないから。）

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -\Lambda^2\Phi. \tag{8.6}$$

この関数 Φ は角運動量演算子の z 成分 $\hat{\ell}_z$ の固有関数と同時固有関数になっている。その理由は $[\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_z^2] = 0$ となり、対応する演算子が交換可能であることによる。すると式（8.5）は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{R^{''}}{R}+\frac{R^{'}}{rR}+U(r)\right]+\frac{\hbar^2}{2mr^2}\Lambda^2 = E \tag{8.7}$$

と書ける。角運動量演算子の固有関数 $\Phi(\phi)$ の表現を用いると全体の波動関数は

$$\psi(x,y) = R(r)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(i\Lambda\phi),\ (\Lambda = 0, \pm1, \pm2, \cdots) \tag{8.8}$$

と表され。動径波動関数 $R(r)$ は次の微分方程式の解として与えられる。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(R^{''}+\frac{R^{'}}{r})+\left[U(r)+\frac{\hbar^2\Lambda^2}{2mr^2}\right]R(r) = ER(r). \tag{8.9}$$

8.2 円形量子井戸

中心力ポテンシャルのもっとも単純な場合として、有限円形ポテンシャル

$$U(r) = \begin{cases} -U_0 & (0 < r < a) \\ 0 & (r > a) \end{cases} \tag{8.10}$$

の中の粒子の運動を考える。これは、人工２次元円形原子の問題の場合と考えてよい。また、これは球形の原子に対するシュレーディンガー方程式を解くことと類似の問題である。

今、束縛状態, すなわち、エネルギー $E < 0$ の場合を考える。井戸内における波数を k, 井戸外における減衰する定数（"波数"）を γ とおく。すなわち

1. ポテンシャルの内側:領域 I$(0 < r < a)$ の場合

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - U_0 (< 0) \tag{8.11}$$

$$\rightarrow k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}(U_0 + E)}. \tag{8.12}$$

2. ポテンシャルの外側:領域 II$(r > a)$ の場合

$$E = -\frac{\hbar^2 \gamma^2}{2m} (< 0) \tag{8.13}$$

$$\rightarrow \gamma = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}(-E)}. \tag{8.14}$$

となる。したがって、領域 I における動径波動関数が満たすべき微分方程式は

$$R_I^{''} + \frac{R_I^{'}}{r} - \frac{\Lambda^2}{r^2} R_I = -k^2 R_I \quad (0 < r < a), \tag{8.15}$$

同様に、領域 II における動径波動関数が満たすべき微分方程式は

$$R_{II}^{''} + \frac{R_{II}^{'}}{r} - \frac{\Lambda^2}{r^2} R_{II} = \gamma^2 R_{II} \ (r > a) \tag{8.16}$$

となる。ここで、$R'(r) \equiv dR(r)/dr, R^{''}(r) \equiv d^2R(r)/dr^2$ である。変数と関数の変換を行う。これらの微分方程式（8.21）, (8.22) はいずれも数学の特殊関数論におけるベッセル（Bessel) の微分方程式に属することがわかっているので、その解と性質はよく分かっている。[1]

1. ポテンシャルの内側:領域 I$(0 < r < a)$ の場合ベッセル微分方程式の解を求めるために、変数と関数の変換を行う。

$$kr \equiv s \ \rightarrow r = \frac{s}{k}, \ \frac{\partial}{\partial r} = k\frac{\partial}{\partial s}, \tag{8.17}$$

$$R_I(r) = R_I(\frac{s}{k}) \equiv u(s). \tag{8.18}$$

式（8.21）に（8.17)、(8.18）を代入すると

$$u^{''}(s)+\frac{u'(s)}{s}+(1-\frac{\Lambda^2}{s^2})u(s)=0\ (u'(s)\equiv du(s)/ds,\ u^{''}(s)\equiv d^2u(s)/ds^2) \tag{8.19}$$

となる。これは数学の特殊関数論における ベッセル（Bessel) の微分方程式 であることがわかっているので、その解は、Λ 次のベッセル関数 $J_\Lambda(s)$ と、ノイマン関数 $N_\Lambda(s)$ であることが分かっている。[1] 2 階の微分方程式であるから一般解は二つの積分定数 A_Λ, B_Λ を用いて、

$$u_\Lambda(s)=A_\Lambda\cdot J_\Lambda(s)+B_\Lambda\cdot N_\Lambda(s) \tag{8.20}$$

とかける。ところが、原点 $(r\to 0)$ において、$N_\Lambda(s)$ は発散すること [1] がわかっているので、$B_\Lambda=0$ としなければならない。結局

$$R_I(r)(=u_\Lambda(s))=A_\Lambda\cdot J_\Lambda(s)\ (0<r<a) \tag{8.21}$$

となる。

2. ポテンシャルの外側:領域 I$(r>a)$ の場合

$$R_{II}^{''}+\frac{R_{II}^{'}}{r}-(\frac{\Lambda^2}{r^2})R_{II}(r)=\gamma^2R_{II}(r)\ (r>a) \tag{8.22}$$

となる。領域 I の場合と同様に、変数と関数の変換を行う：

$$\gamma r \ \equiv\ t\ \to r=\frac{t}{\gamma},\ \frac{\partial}{\partial r}=\gamma\frac{\partial}{\partial t}, \tag{8.23}$$

$$R_{II}(r)\ =\ R_{II}(\frac{r}{\gamma})\equiv v(t). \tag{8.24}$$

ここで、式（8.22）に（8.23)、(8.24）を代入すると

$$v^{''}(t)+\frac{v'(t)}{t}-(1+\frac{\Lambda^2}{t^2})v(t)=0\ (v'(t)\equiv dv(t)/dt,\ v^{''}(t)\equiv d^2v(t)/dt^2) \tag{8.25}$$

となる。これは数学の特殊関数論における 変形ベッセル（Bessel) の微分方程式 であることがわかっているので、その解は、Λ 次の、第一種変形ベッセル関数 $I_\Lambda(t)$ と 第二種変形ベッセル関数 $K_\Lambda(s)$ となる。[1] 2 階の微分方程式であるから一般解は二つの積分定数 C_Λ, D_Λ を用いて、

$$R_{II}(r)(=v_\Lambda(t))=C_\Lambda\cdot I_\Lambda(t)+D_\Lambda\cdot K_\Lambda(t) \tag{8.26}$$

と表される。ここで、$I_\Lambda(t)$ は無限遠方 $r\to\infty$ で発散する。[1] したがって、係数 C_Λ はゼロでなければならない。結局

$$R_{II}(r)(=v_\Lambda(t))=D_\Lambda\cdot K_\Lambda(t)\ (r>a) \tag{8.27}$$

となる。

次に、二つの領域の境界において、波動関数はなめらかに接続しなければならないので、波動関数とその動径 r についての微分係数が等しいという境界条件を置く。まず、境界において波動関数が等しいので、

$$\begin{aligned} R_I(a) &= R_{II}(a), && (8.28)\\ \rightarrow A_\Lambda \cdot J_\Lambda(ka) &= D_\Lambda \cdot K_\Lambda(\gamma a) && (8.29)\\ \rightarrow J_\Lambda(ka)A_\Lambda &- K_\Lambda(\gamma a)D_\Lambda = 0. && (8.30) \end{aligned}$$

また、波動関数の動径微分係数が等しいので、

$$\begin{aligned} \frac{dR_I}{dr}(a) &= \frac{dR_{II}}{dr}(a), && (8.31)\\ \rightarrow k \cdot A_\Lambda \cdot J_\Lambda^{'}(ka) &= \gamma \cdot D_\Lambda \cdot K_\Lambda^{'}(\gamma a) && (8.32)\\ \rightarrow k \cdot J_\Lambda^{'}(ka)A_\Lambda &- \gamma \cdot K_\Lambda^{'}(\gamma a)D_\Lambda = 0. && (8.33) \end{aligned}$$

ここで、動径についての微分係数をもとめる際に、変数変換に注意する。式（8.30）,(8.33) は係数 A_Λ, D_Λ についての連立１次方程式とみなせるので、行列と列ベクトルの積の形に書きなおす。

$$\begin{bmatrix} J_\Lambda(ka) & -K_\Lambda(\gamma a) \\ k \cdot J_\Lambda^{'}(ka) & -\gamma \cdot K_\Lambda^{'}(\gamma a) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_\Lambda \\ D_\Lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (8.34)$$

ここで、線形代数学の定理より、自明な解（$A_\Lambda = D_\Lambda = 0$）以外の解が存在するためには係数行列の行列式がゼロでなければならないので、

$$\begin{aligned} 0 &= \begin{vmatrix} J_\Lambda(ka) & -K_\Lambda(\gamma a) \\ k \cdot J_\Lambda^{'}(ka) & -\gamma \cdot K_\Lambda^{'}(\gamma a) \end{vmatrix} \\ &= -J_\Lambda(ka) \cdot \gamma \cdot K_\Lambda^{'}(\gamma a) + k \cdot J_\Lambda^{'}(ka) \cdot K_\Lambda(\gamma a). \quad (8.35) \end{aligned}$$

束縛エネルギー $E(-U_0 < E < 0)$ に対して、式 (8.35) を満たす解が求まれば、束縛状態が存在することになる。一般には, この式の解は解析的には求まらないが、次のような手順で数値的に求めることができる。例えば、波数 k, γ は、式（8.12)、(8.14）で示されるように、エネルギー E の関数であることを考慮して、式（8.35）の右辺をある関数 $F_\Lambda(E)$ と置く。

$$F_\Lambda(E) \equiv -J_\Lambda(ka) \cdot \gamma \cdot K_\Lambda^{'}(\gamma a) + k \cdot J_\Lambda^{'}(ka) \cdot K_\Lambda(\gamma a). \quad (8.36)$$

エネルギー E を横軸にとり、縦軸に関数 $F_\Lambda(E)$ をとる。与えられる定数 a, U_0 の値について、Λ の値ごとに、適当な分割精度で $E(-U_0 < E < 0)$ の値を代入して、関数の値を計算し、グラフを描く。グラフが横軸と交わる（ゼロ点が存在する）場合にはそのときのエネルギーの値が束縛エネルギーになり、横軸とまじわらない場合には束縛状態は存在しないことになる。

関数の微分係数を数値的に求めるのは計算精度が落ちる場合があるので、次のように特殊関数の微分係数についての公式 [1]（の 159 および 174 ページなど）を用いる。

参考文献

[1] 例えば、森口、宇田川, 一松、岩波数学公式 III, 岩波書店. 特に、６章、６．３図、６．４図。

[2] 山内恭彦、武田　尭、「大学演習　量子物理学」、裳華房、1974 年。

[3] 有馬朗人、「量子力学」、朝倉書店、1994 年。

[4] 齋藤理一郎、「量子物理学」、培風館、1995 年。

[5] 川路伸治「二次元電子と磁場」、朝倉書店、2007 年。

[6] 江沢　洋「量子と場」、角運動量のパラドックス、ダイヤモンド社。

[7] メシア「量子力学２」、5 ページ脚注他、東京図書。

[8] 岩波講座現代物理学の基礎「量子力学 III」、特に 16 章（演算子と状態）