

2次元系における量子力学

座標、運動量、シュレディンガー方程式と波動関数

2次元系の自由粒子の波動関数: 2次元平面波

2次元量子箱

角運動量演算子と方向量子化

2次元角運動量の固有関数の例

回転運動のハミルトニアンとエネルギー量子化

座標、運動量、シュレディンガー方程式と波動関数

座標演算子、運動量演算子と正準交換関係

$$\hat{x} = x, \quad \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}; [\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$$

$$\hat{y} = y, \quad \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}; [\hat{y}, \hat{p}_y] = i\hbar$$

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

ハミルトニアンとシュレディンガー方程式

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

$$\rightarrow \hat{H}\Psi(x, y; t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, y; t)$$

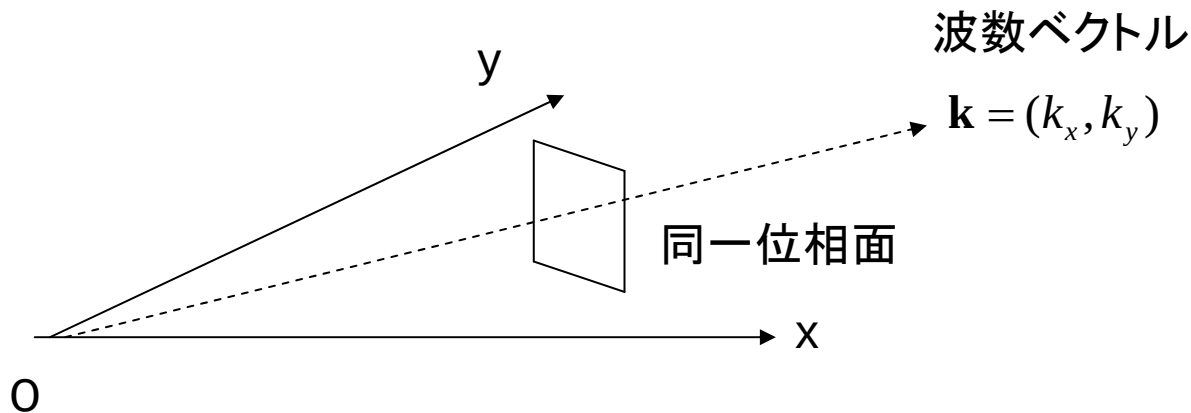
$$\rightarrow \hat{H}\psi(x, y) = E\psi(x, y); \Psi(x, y; t) = \psi(x, y) \exp(-iEt / \hbar)$$

波動関数の規格化

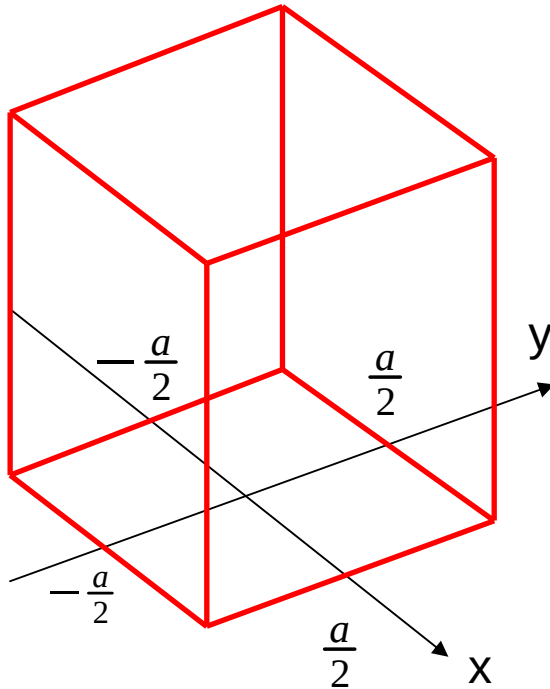
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx dy = 1$$

2次元系の自由粒子の波動関数: 2次元平面波

$$\begin{aligned}\Psi_{k_x k_y}(x, y; t) &= \exp\left[i(k_x x + k_y y - \omega t)\right] ; \omega = E / \hbar \\ &= \cos(k_x x + k_y y - \omega t) + i \sin(k_x x + k_y y - \omega t)\end{aligned}$$



2次元量子箱



量子箱(井戸)ポテンシャル $U(x, y) = \begin{cases} 0 & (|x| \leq a/2, |y| \leq a/2) \\ \infty & (|x| > a/2, |y| > a/2) \end{cases}$

シュレディンガー方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + U(x, y) \right] \psi(x, y) = E \psi(x, y)$$

変数分離型の解法 $\psi(x, y) = X(x)Y(y)$

$$U(x, y) = V(x) + W(y)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] X(x) = E_x X(x)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + W(y) \right] Y(y) = E_y Y(y)$$

($a=b$)の場合には、二つの量子数の異なる $E_x + E_y = E$

組み合わせでもエネルギーが

同じになることがある。(縮退、degeneracy)。

$$E_x = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n_x^2, E_y = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n_y^2, \quad (n_x, n_y = 1, 2, \dots)$$

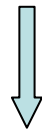
$$(n_x, n_y) = (2, 1) \leftrightarrow (n_x, n_y) = (1, 2)$$

$$\psi_{n_x n_y}(x, y) = X_{n_x}(x) Y_{n_y}(y)$$

角運動量演算子と方向量子化

角運動量演算子(のz成分)

$$\hat{\ell}_z \equiv \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$



$$\longleftarrow x = r \cos \phi, y = r \sin \phi$$

$$\hat{\ell}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

波動関数の方向依存性の大きさとしての角運動量

角運動量の大きさは離散的である。

プランク定数 $\hbar$ の整数倍

固有値方程式

$$\hat{\ell}_z \Phi_M(\phi) = M \hbar \cdot \Phi_M(\phi)$$

角度の周期性

$$\Phi_M(\phi) = \Phi_M(\phi + 2\pi) \rightarrow M = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

規格化

$$\int_0^{2\pi} \Phi_M^*(\phi) \Phi_{M'}(\phi) d\phi = \delta_{MM'}, \rightarrow \Phi_M(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(iM\phi)$$

2次元角運動量の固有関数の例

量子系では対称な軸のまわりの回転は観測されない！

(→対称な軸のまわりには回転しない)

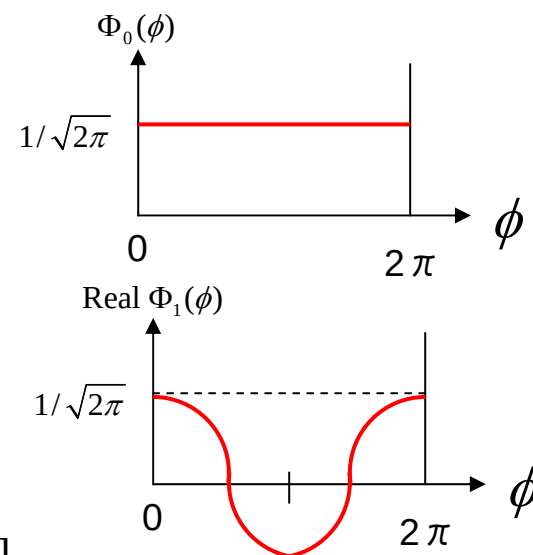
$$(M = 0) \quad \Phi_0(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$(M = 1) \quad \Phi_1(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(i\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} [\cos \phi + i \sin \phi]$$

$$(M = -1) \quad \Phi_{-1}(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-i\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} [\cos \phi - i \sin \phi]$$

$$(M = 2) \quad \Phi_2(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(i2\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} [\cos 2\phi + i \sin 2\phi]$$

$$(M = -2) \quad \Phi_{-2}(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-i2\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} [\cos 2\phi - i \sin 2\phi]$$



回転運動のハミルトニアンとエネルギー量子化

古典物理学における
剛体の運動エネルギー

$$\begin{aligned}
 K &= \frac{1}{2}(m_1 v_1^2 + m_2 v_2^2) \quad [v_1 = r_1 \omega, v_2 = r_2 \omega] \\
 &= \frac{1}{2}(m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2) \omega^2 \quad [I \equiv m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2] \\
 &= \frac{\ell_z^2}{2I} \quad \left[\ell_z = \sum_{j=1}^2 x_j p_{jy} - y_j p_{jx} = I \omega \right]
 \end{aligned}$$

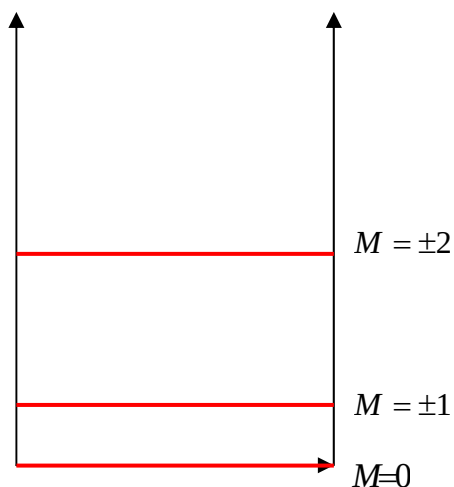
$$\hat{H} = \frac{\hat{\ell}_z^2}{2I} \quad (I: \text{慣性モーメント})$$

固有値

$$E_{|M|} = \frac{\hbar^2 M^2}{2I} \quad M = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

固有関数

$$\Phi_M(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(iM\phi)$$



実例: 2原子分子の励起エネルギースペクトルなど