[2次元矩形量子箱]2dim-quantum-box-qa100803tex

2次元矩形型（長方形）ポテンシャル箱（$-a/2 \leq x \leq a/2, -b/2 \leq y \leq b/2$）の中に閉じ込められた自由粒子のシュレディンガー方程式を解け。

(解答例) 2次元の場合には運動量演算子の x, y 成分は次のようになる。

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x},\ \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}. \tag{1}$$

対応して、2次元ポテンシャル $U(x, y)$ の下の粒子に対するシュレディンガー方程式は

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

となる。ここで、ポテンシャルが長方形をしていて（2次元量子箱または量子井戸）、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

$$U(x,y) = \begin{cases} 0 & (|x| < a/2, |y| < b/2) \\ \infty & (\text{その他の場合}). \end{cases} \tag{3}$$

とする。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 (<u>変数分離型</u>) になっている。

$$U(x,y) = V(x) + W(y). \tag{4}$$

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。

$$\psi(x,y) = X(x)\cdot Y(y). \tag{5}$$

この式をシュ-レディンガー方程式（2）に代入すると

$$\begin{aligned}
&\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)+V(x)+W(y)\right]X(x)Y(y) = EX(x)Y(y) \\
&\to -\frac{\hbar^2}{2m}[X"(x)Y(y)+X(x)Y"(y)]+[V(x)+W(y)]X(x)Y(y) = EX(x)Y(y).
\end{aligned} \tag{6}$$

ここで次の記号を用いた。

$$X" \equiv \frac{d^2X}{dx^2}, Y" \equiv \frac{d^2Y}{dy^2} \tag{7}$$

ここで式 (6) の両辺を XY で割って整理すると

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{X"(x)}{X(x)}+V(x)\right]+\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{Y"(y)}{Y(y)}+W(y)\right] = E. \tag{8}$$

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。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{X"(x)}{X(x)}+V(x)\right] = E_x \to -\frac{\hbar^2}{2m}X"(x)+V(x)X(x) = E_xX(x), \tag{9}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{Y"(y)}{Y(y)}+W(y)\right] = E_y \to -\frac{\hbar^2}{2m}Y"(y)+W(y)Y(y) = E_yY(y), \tag{10}$$

$$E_x + E_y = E. \tag{11}$$

ポテンシャル（3）に対応して、境界条件は次のようになる。

$$X(-a/2) = X(a/2) = 0,\, Y(-b/2) = Y(b/2) = 0. \tag{12}$$

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。

$$E_x \equiv E_{n_x} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n_x^2,\, (n_x = 1, 2, 3, \cdots), \tag{13}$$

$$E_y \equiv E_{n_y} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n_y^2,\, (n_y = 1, 2, 3, \cdots), \tag{14}$$

$$X(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \cos(\frac{n_x\pi x}{a}) & (n_x = 1, 3, 5, \cdots) \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin(\frac{n_x\pi x}{a}) & (n_x = 2, 4, 6, \cdots). \end{cases} \tag{15}$$

$$Y(y) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{b}} \cdot \cos(\frac{n_y\pi y}{b}) & (n_y = 1, 3, 5, \cdots) \\ \sqrt{\frac{2}{b}} \cdot \sin(\frac{n_y\pi y}{b}) & (n_y = 2, 4, 6, \cdots). \end{cases} \tag{16}$$

結局、2 次元の量子箱のエネルギー固有値と固有関数は

$$E_{n_x n_y} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2}),\, (n_x, n_y = 1, 2, 3, \cdots), \tag{17}$$

$$\psi_{n_x n_y}(x, y) = X_{n_x}(x)Y_{n_y}(y) \tag{18}$$

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

$$E_{n_x n_y} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(n_x^2 + n_y^2),\, (n_x, n_y = 1, 2, 3, \cdots) \tag{19}$$

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 <u>縮退（degeneration)</u> という。

$$E_{n_x=1,n_y=2} = \frac{5\hbar^2\pi^2}{2ma^2} = E_{n_x=2,n_y=1}. \tag{20}$$