2次元系における量子力学

§1. 2次元系における座標、運動量、シュレディンガー方程式と波動関数
§2. 2次元系の自由粒子の波動関数:2次元平面波
§3. 2次元の無限量子箱
§4. 2次元系における角運動量演算子と方向量子化
§5. 2次元回転運動のハミルトニアンとエネルギー量子化

Made by R. Okamoto (Emeritus Prof., Kyushu Inst. of Tech)
Filename=2dim-Quantum-summary20190604.ppt

§1.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

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

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

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

ハミルトニアンとシュレディンガー方程式

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

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

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

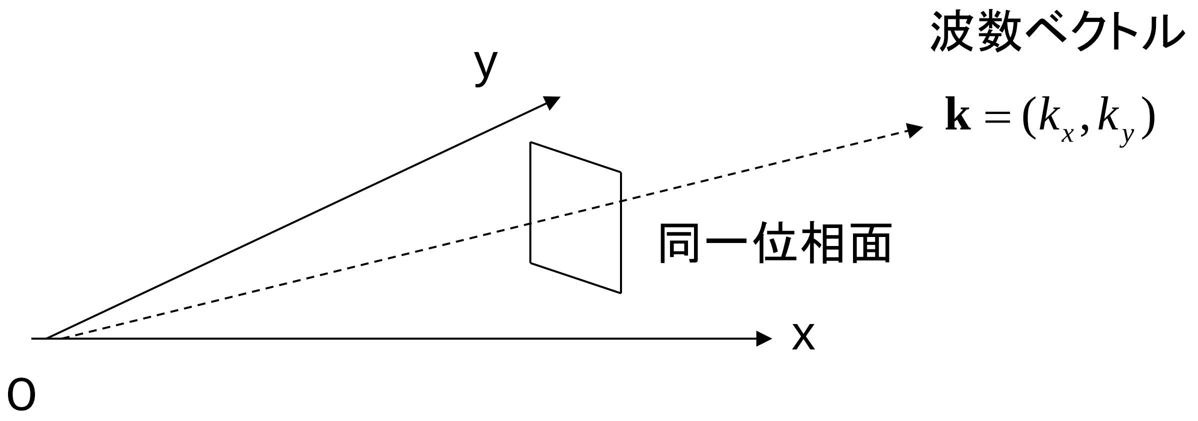
波動関数の規格化

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

§2. 2次元系の自由粒子の波動関数:2次元平面波

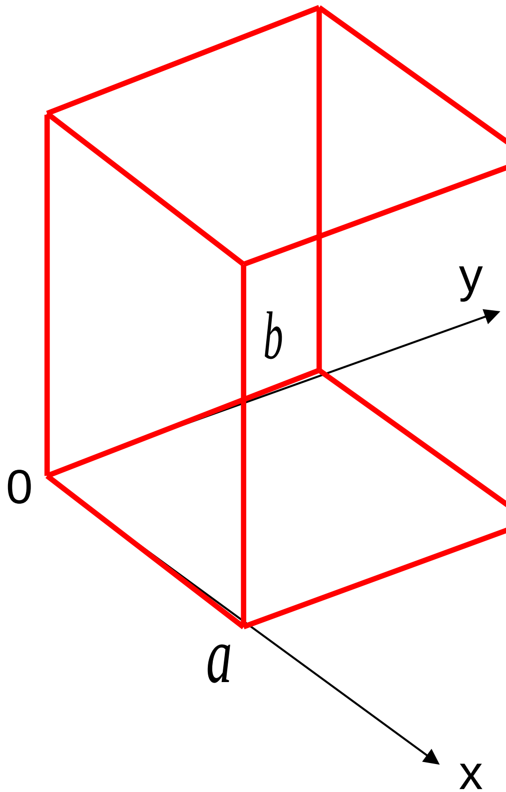
$$\Psi_{k_x k_y}(x, y; t) = \exp\left[\mathrm{i}\left(k_x x + k_y y - \omega t\right)\right] \;;\omega = E/\hbar$$

$$= \cos\left(k_x x + k_y y - \omega t\right) + \mathrm{i}\sin\left(k_x x + k_y y - \omega t\right)$$



§3. 2次元の無限量子箱

$$U(x,y)=\begin{cases}0 & (0<x<a, 0<y<b)\\ \infty & (他)\end{cases}$$



量子箱(井戸)ポテンシャル

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

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

$$\psi(x,y)=X(x)Y(y)$$

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

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

$$E_x+E_y=E$$

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

$$\to E_{n_x,n_y} \equiv \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n_x^2 + \frac{\hbar^2\pi^2}{2mb^2}n_y^2.$$

(a=b)の場合には、二つの量子数の異なる
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)。

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

$$E_{n_x,n_y} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(n_x^2 + n_y^2)$$

$$\to E_{1,2} = \frac{5\hbar^2\pi^2}{2ma^2} = E_{2,1}$$

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

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

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

§4.2次元系における角運動量演算子と方向量子化

ポテンシャルが，$V(x,y)=(1/2)m\omega^2(x^2+y^2)$のように，z軸のまわりに軸対称な場合に重要

角運動量演算子（のz成分）

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

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

$$\boxed{\hat{\ell}_z = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial \phi}}$$ **波動関数の方向依存性の大きさとしての角運動量**

固有値方程式 $\hat{\ell}_z \Phi_M(\phi) = M\hbar \cdot \Phi_M(\phi)$

角運動量の大きさは離散的である。

ディラック定数 $\hbar$ の整数倍

角度の周期性 $\Phi_M(\phi) = \Phi_M(\phi + 2\pi) \to M = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$

規格化 $\int_0^{2\pi} \Phi_M^*(\phi)\Phi_{M'}(\phi)d\phi = \delta_{MM'}, \to \Phi_M(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(\mathrm{i}M\phi)$

波動関数に対する、角度について周期性の要請の結果としての角運動量の量子化

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！

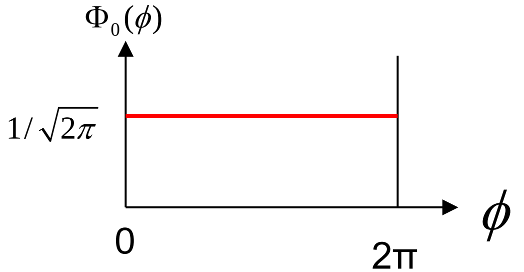
$$(M=0)\quad \Phi_0(\phi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

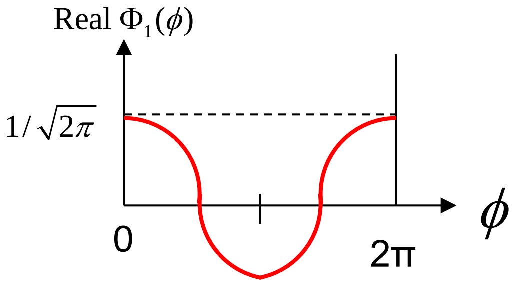
$$(M=\ 1)\quad \Phi_1(\phi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(i\phi)\qquad =\frac{1}{\sqrt{2\pi}}[\cos\phi+i\sin\phi]$$

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

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

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





§5. 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

$$K = \frac{1}{2}(m_1 v_1^2 + m_2 v_2^2) \quad [v_1 = r_1\omega,\ v_2 = r_2\omega]$$

$$= \frac{1}{2}(m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2)\omega^2 \quad \left[I \equiv m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2\right]$$

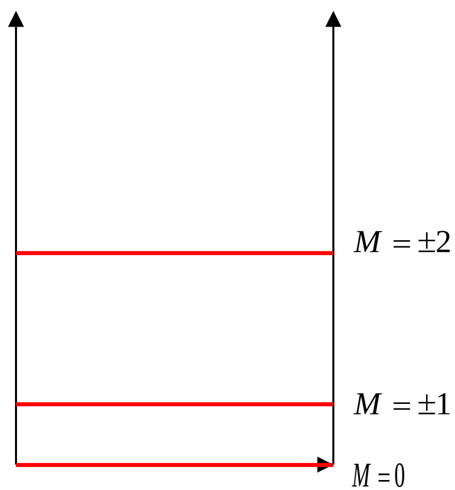
$$= \frac{\ell_z^2}{2I} \quad \left[\ell_z = \sum_{j=1}^{2}(x_j p_{jy} - y_j p_{jx}) = I\omega\right]$$

量子化

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

固有値

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



固有関数

$$\Phi_M(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(\mathrm{i}M\phi)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left[\cos(M\phi) + \mathrm{i}\sin(M\phi)\right]$$

実例：2原子分子の励起エネルギースペクトルなど