[2 次元矩形量子箱]2dim-quantum-box-qa140521.tex

2 次元矩形型無限量子箱（$0 \le x \le a, 0 \le y \le b$）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。ただし，1 次元無限量子箱（$0 \le x \le a$) の解、固有エネルギーと波動関数をそれぞれ，$E_n = (\hbar^2\pi^2/2ma^2)n^2$, $\psi_n(x) = \sqrt{2/a} \cdot \sin(n\pi x/a)$, $n = 1, 2, \cdots$ であるとする．

(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。

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

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

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

である。今、ポテンシャル内部を考えればよく、ハミルトニアンが変数x, yの和の形（変数分離型）になっている。従って、波動関数は次のように、変数分離型で求める。

$$\psi(x, y) = X(x) \cdot Y(y). \tag{4}$$

この式をシュ-レディンガー方程式（2）に代入すると

$$\begin{aligned} &\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\right]X(x)Y(y) = E \cdot X(x)Y(y) \\ &\to -\frac{\hbar^2}{2m}[X"Y + XY"] = E \cdot XY. \end{aligned} \tag{5}$$

ここで次の記号を用いた。

$$X" \equiv \frac{d^2X}{dx^2}, Y" \equiv \frac{d^2Y}{dy^2} \tag{6}$$

ここで式 (5) の両辺を XY で割って整理すると

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{X"}{X}\right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{Y"}{Y}\right] = E. \tag{7}$$

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。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{X"(x)}{X(x)}\right] = E_x \to -\frac{\hbar^2}{2m}X"(x) = E_xX(x), \tag{8}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{Y"(y)}{Y(y)}\right] = E_y \to -\frac{\hbar^2}{2m}Y"(y) = E_yY(y), \tag{9}$$

$$E_x + E_y = E. \tag{10}$$

ポテンシャル（3）に対応して、境界条件は次のようになる。

$$X(0) = X(a) = 0,\, Y(0) = Y(b) = 0. \tag{11}$$

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。

$$E_x \equiv E_{n_x} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n_x^2,\, (n_x = 1, 2, 3, \cdots), \tag{12}$$

$$E_y \equiv E_{n_y} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mb^2}n_y^2,\, (n_y = 1, 2, 3, \cdots), \tag{13}$$

$$X_{n_x}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right), (n_x = 1, 2, 3, \cdots), \tag{14}$$

$$Y_{n_y}(y) = \sqrt{\frac{2}{b}} \cdot \sin\left(\frac{n_y \pi y}{b}\right), (n_y = 1, 2, 3, \cdots). \tag{15}$$

結局、2次元の量子箱のエネルギー固有値と固有関数は

$$E_{n_x n_y} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2}\right),\, (n_x, n_y = 1, 2, 3, \cdots), \tag{16}$$

$$\psi_{n_x n_y}(x, y) = X_{n_x}(x) Y_{n_y}(y) \tag{17}$$

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

$$E_{n_x n_y} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(n_x^2 + n_y^2),\, (n_x, n_y = 1, 2, 3, \cdots) \tag{18}$$

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（degeneration）という。

$$E_{n_x=1, n_y=2} = \frac{5\hbar^2\pi^2}{2ma^2} = E_{n_x=2, n_y=1}. \tag{19}$$