61908697 佐々木良輔

(1)

まず 1 次元の周期境界条件

$$\psi(x+L) = \psi(x) \tag{1}$$

を考える. 一次元の Schrödinger 方程式はポテンシャル $V(x) = 0$ のとき (2) 式である.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = \varepsilon\psi(x) \tag{2}$$

この解は定数 A, B を用いて以下のようになる.

$$\psi(x) = A\ \mathrm{e}^{ikx} + B\ \mathrm{e}^{-ikx} \tag{3}$$

$$k = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \tag{4}$$

(1) 式から

$$A\mathrm{e}^{ik(x+L)} + B\mathrm{e}^{-ik(x+L)} = A\mathrm{e}^{ikx} + B\mathrm{e}^{-ikx} \tag{5}$$

$$A\mathrm{e}^{ikx}(1-\mathrm{e}^{ikL}) = B\mathrm{e}^{-ikx}(\mathrm{e}^{-ikL}-1) \tag{6}$$

これが任意の A, B について成立するため

$$\mathrm{e}^{\pm ikL} = 1 \tag{7}$$

$$\therefore\ k_nL = 2\pi n \qquad (n\in\mathbb{Z}) \tag{8}$$

を満たす. したがって解 $\psi(x)$ は離散的な値を取るのでそれを $\psi_n(x)$ とすると

$$\psi_n(x) = C\ \mathrm{e}^{ik_nx} \tag{9}$$

となる. ここで $n\in\mathbb{Z}$ としたことから A, B を C と置き直した. またエネルギー固有値 ε_n は

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2k_n^2}{2m} \tag{10}$$

$$= \frac{2\pi^2\hbar^2n^2}{mL^2} \tag{11}$$

となる.

次に 3 次元での周期境界条件

$$\begin{cases} \psi(x+L,y,z) = \psi(x,y,z) \\ \psi(x,y+L,z) = \psi(x,y,z) \\ \psi(x,y,z+L) = \psi(x,y,z) \end{cases} \tag{12}$$

を考える. 波動関数に変数分離形, すなわち

$$\psi(x,y,z) = X(x)Y(y)Z(z) \tag{13}$$

を仮定すると各方向について 1 次元と全く同様の議論を行えばいいので波動関数は

$$\psi(x,y,z) = C\ \mathrm{e}^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} \tag{14}$$

$$= C\ \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{15}$$

ただし

$$\begin{cases} k_x = \dfrac{2\pi}{L} n_x \\ k_y = \dfrac{2\pi}{L} n_y \\ k_z = \dfrac{2\pi}{L} n_z \end{cases} \tag{16}$$

$$\boldsymbol{k} = (k_x, k_y, k_z) \tag{17}$$

である. また各方向でのエネルギー固有値 ε_x, ε_y, ε_z は (10) と同様に

$$\begin{cases} \varepsilon_x = \dfrac{2\pi^2\hbar^2 n_x^2}{mL^2} \\ \varepsilon_y = \dfrac{2\pi^2\hbar^2 n_y^2}{mL^2} \\ \varepsilon_z = \dfrac{2\pi^2\hbar^2 n_z^2}{mL^2} \end{cases} \tag{18}$$

となるので, エネルギー固有値 ε は

$$\varepsilon = \frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2}(n_x^2 + x_y^2 + n_z^2) \tag{19}$$

となる.