一次元無限大ポテンシャル箱：potential-infinite-0qa100208.tex)
次のような一次元無限大ポテンシャル箱（井戸）の中の粒子（質量 m）について，以下の問に答えよ。ただし、プランク定数 h により $\hbar \equiv h/2\pi$ を定義する

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 < x < a) \\ \infty & (x \leq 0, x \geq a). \end{cases}$$

1. 井戸型ポテンシャルの内部におけるシュレディンガー方程式とその一般解を記せ。
2. 波動関数についての境界条件のもとで, 井戸型ポテンシャルの内部における、n 番目のエネルギー固有値 E_n を求めよ。
3. n 番目のエネルギー固有値 E_n に対応する波動関数 $\psi_n(x)$ を求めよ。
4. エネルギー量子化の効果の大きさは何に依存するか述べよ。

（解答例）

1. 井戸型ポテンシャルの内部では、シュレディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi = E\psi(x). \tag{1}$$

と書ける。井戸型ポテンシャルの内部では、エネルギーは非負値であると考えてよいので、シュレディンガー方程式より

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x),\ k \equiv \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{2}$$

となる。この一般解は

$$\psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx) \tag{3}$$

となる。

2. 境界条件 $\psi(0) = 0, \psi(a) = 0$ より

$$0 = A, \tag{4}$$

$$0 = A\cos(ka) + B\sin(ka), \tag{5}$$

$$\rightarrow \quad A = 0,\ ka = n\pi,\ (n = 1, 2, \cdots) \tag{6}$$

ゆえに, エネルギーは

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2, (n = 1, 2, \cdots) \tag{7}$$

のように、$\pi^2\hbar^2/(2ma^2)$ を単位とする離散的な値をとる (=量子化される)。

3. 波動関数の規格化条件より

$$1 = B^2\int_0^a \sin^2(\frac{n\pi}{a}x)dx = \frac{B^2 a}{2}$$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n\pi}{a}x) \tag{8}$$

となる。

4. 異なるエネルギー準位の間隔を決める因子は井戸の幅 a と粒子の質量 m であり、量子化の効果は、ma^2 の値が小さいほど、すなわち、ポテンシャルの幅が小さいほど、または粒子の質量が小さいほど大きくなる。