

無限量子箱 1a : filename=potential-infinite-1a100210)

次のような一次元無限大量子箱 (量子井戸) 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

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

1. シュレーディンガー方程式を記せ。
2. ポテンシャルが無限大の領域 ($|x| \geq a$) において、波動関数はどうなるか述べよ。
3. 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シュレーディンガー方程式を解き、 n 番目のエネルギー固有値 E_n を求めよ。
4. エネルギー固有値 E_n に対応する、規格化された固有状態関数 $\psi_n(x)$ を求めよ。
5. 座標を空間反転する時 ($x \rightarrow -x$), 前問で求めた波動関数はどのように変化するか。(空間反転に対する対称性。)

(解答例)

1. シュレーディンガー方程式

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

2. 物理量を決定する方程式において、その各項は有限の値にとどまるべきであると考えれば、シュレーディンガー方程式においてポテンシャルが無限大になる領域では波動関数の値がゼロにならねばならない。(そのような領域に粒子の存在確率がゼロということ。)
3. 井戸型ポテンシャルの内部におけるシュレーディンガー方程式より

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

一般解 $\psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx)$. (A, B : 任意定数)

境界条件 $0 = \psi(-a), 0 = \psi(a)$ より

$$0 = A \cos(ka) - B \sin(ka), \quad (3)$$

$$0 = A \cos(ka) + B \sin(ka). \quad (4)$$

ゆえに次の 2 つの場合に分けられる。 $\sin(ak) = 0$ (または $\cos(ak) = 0$) の場合 :
以下、場合分けに関連した数式は同順とする。

$$\begin{aligned} ak &= \frac{\pi}{2} \times n, \quad n : \text{偶数 (奇数)} \\ \rightarrow k_n &= \frac{\pi}{2a} \times n, \\ \rightarrow E_n &= \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} \right) n^2. \end{aligned} \quad (5)$$

4. 波動関数は $n = \text{偶数 (奇数)}$ の場合、次のようになる。

$$\psi_n(x) = A_n \cos\left(\frac{\pi}{2a} \times nx\right) \left[= B_n \sin\left(\frac{\pi}{2a} \times nx\right) \right] \quad (6)$$

$n = \text{偶数}$ の場合の規格化 ($n = \text{奇数}$ の場合も結果は同様となる)

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-a}^a A_n^2 \cos^2(k_n x) dx \\ &= (A_n^2/2) \int_{-a}^a [1 + \cos(2k_n x)] dx \\ &= (A_n^2/2) \left[x - \frac{\sin(\pi n x/a)}{2k_n} \right]_{-a}^a \\ &= A_n^2 a. \\ \rightarrow \psi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{\pi n x}{2a}\right), \\ \{\psi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{\pi n x}{2a}\right)\}. \end{aligned} \quad (7)$$

5(a) $n = \text{偶数}$ の場合:

$$\begin{aligned} \psi_n(-x) &= \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(-\frac{\pi n x}{2a}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{\pi n x}{2a}\right) \\ \rightarrow \psi_n(-x) &= \psi_n(x). \end{aligned} \quad (8)$$

(b) $n = \text{奇数}$ の場合:

$$\begin{aligned} \psi_n(-x) &= \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(-\frac{\pi n x}{2a}\right) \\ &= -\frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{\pi n x}{2a}\right) \\ \rightarrow \psi_n(-x) &= -\psi_n(x). \end{aligned} \quad (9)$$

(コメント：この問題の場合のポテンシャル関数が座標に関して左右対称であることの結果として、波動関数の集合が量子数が偶数の場合と奇数の場合に、パリティ (parity) の値がプラス1とマイナス1のものに分類されることを意味する。)