一次元無限大ポテンシャル箱：potential-infinite-1b)
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

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (|x| < a/2) \\ \infty & (|x| \geq a/2). \end{cases}$$

1. シュレ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 $(|x| \geq a/2)$ 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。

（解答例）

1. シュレディンガー方程式

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

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、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。

3. 井戸型ポテンシャルの内部では

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

一般解 $\psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx)$.
境界条件 $0 = \psi(-a/2), 0 = \psi(a/2)$

$$0 = A\cos(ka/2) - B\sin(ka/2), \quad (3)$$
$$0 = A\cos(ka/2) + B\sin(ka/2). \quad (4)$$

ゆえに次の 2 つの場合に分けられる。
$\cos(ak/2) = 0$(or $\sin(ak/2) = 0$) の場合

$$ak/2 = \frac{\pi}{2} \times n,\ n: \text{奇数（偶数）}$$
$$k_n = \frac{\pi}{a} \times n,$$
$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = (\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2})n^2. \quad (5)$$

4. 波動関数は $n =$ 奇数（偶数）の場合、

$$\psi_n(x) = A_n\cos(k_n x)(= B_n\sin(k_n x)) \quad (6)$$

$n =$ 奇数の場合の規格化（$n =$ 偶数の場合も同様）

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-a/2}^{a/2} A_n^2\cos^2(k_n x)dx \\ &= (A_n^2/2)\int_{-a/2}^{a/2}[1+\cos(2k_n x)]dx \\ &= (A_n^2/2)[x - \frac{\sin(2\pi n x/a)}{2k_n}]_{-a/2}^{a/2} \\ &= A_n^2 a/2. \\ \psi_n(x) &= (\sqrt{2/a})\cos(\pi n x/a), (n: \text{奇数}), \\ \psi_n(x) &= (\sqrt{2/a})\sin(\pi n x/a), (n: \text{偶数}), \end{aligned}$$