一次元無限大ポテンシャル箱：potential-infinite-3qa040615a.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

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

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 と対応する波動関数 $\psi_n(x)$ を求めよ。
3. 量子化の効果の大きさはどの物理量にどのように依存するか述べよ。
4. エネルギー固有値 E_1, E_2 に対応する固有状態関数 $\psi_1(x), \psi_2(x)$ を求め, 積分 $\int_0^a \psi_1^*(x)\psi_2(x)dx$ の値を計算し、その結果の意味を述べよ。

（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

$$\begin{aligned} & 0 = A, & (4) \\ & 0 = A\cos(ka) + B\sin(ka), & (5) \\ \rightarrow \quad & A = 0,\ ka = n\pi,\ (n = 1, 2, \cdots) & (6) \end{aligned}$$

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)。規格化条件より

$$\begin{aligned} 1 &= B^2\int_0^a \sin^2(\frac{n\pi}{a})dx = \frac{B^2 a}{2} \\ \psi_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n\pi}{a}) \qquad (8) \end{aligned}$$

となる。

3. 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。
4. 題意の波動関数は

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= \sqrt{2/a}\sin(\frac{\pi}{a}x), & (9) \\ \psi_2(x) &= \sqrt{2/a}\sin(\frac{2\pi}{a}x) & (10) \end{aligned}$$

となる。題意より

$$\begin{aligned} & \int_0^a \sin(\frac{n\pi x}{a})\sin(\frac{2n\pi x}{a})dx \\ & = (-1/2)\int_0^a [\cos(\frac{3n\pi}{a}x) - \cos(\frac{n\pi}{a}x)]dx \\ & = (-1/2)[\frac{a}{3\pi}\sin(\frac{3\pi x}{a}) - \frac{a}{\pi}\sin(\frac{\pi x}{a})]_{x=0}^{x=a} \\ & = 0 \qquad (11) \end{aligned}$$

この結果は、(ハミルトニアンの）2つの固有値に対応する固有状態（の関数）が直交することを意味する。