一次元無限大井戸型ポテンシャル系の波動関数:potential-infinite-wavefunction-qa150222A.tex)
次のような一次元無限大井戸型ポテンシャルの中の量子的粒子（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 に属する波動関数 $\psi_n(x)$ を求めよ。
3. エネルギー固有値 E_1, E_2 に属する波動関数 $\psi_1(x), \psi_2(x)$ 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，任意定数を A, B として，次のように書ける。

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

2. 境界条件 $\psi(0) = 0, \psi(a) = 0$ より, それぞれ

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

ゆえに、$k = n\pi/a$ を代入してエネルギー E_n が求まり、それに属する波動関数 $\psi_n(x)$ の規格化条件より

$$\begin{aligned} 1 &= B^2\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx \\ &= B^2\int_0^a \frac{1-\cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)}{2}dx = \frac{B^2}{2}\int_0^a dx - \frac{B^2}{2}\int_0^a \cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)dx \\ &= \frac{B^2a}{2} - \frac{B^2a}{2}\left(\frac{a}{2n\pi}\right)\left[\sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)\right]_{x=0}^{x=a} = \frac{B^2a}{2}, & (7) \\ \rightarrow \psi_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) & (8) \end{aligned}$$

となる。

3. 題意の波動関数は

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

となる。題意の積分を計算する。

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

ここで、三角関数の和と差の公式から導かれる以下の公式を用いた：

$$\begin{aligned}\cos(\alpha \pm \beta) &= \cos\alpha\cos\beta \mp \sin\alpha\sin\beta(\text{復号同順})\\ \to \cos(\alpha-\beta) - \cos(\alpha+\beta) &= 2\sin\alpha\sin\beta. \qquad (12)\end{aligned}$$

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。