

一次元無限大ポテンシャル箱：potential-infinite-well-symmetric-QA20200527B.tex)
 次のように左右対称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

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

1. この系に対する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 ($|x| \geq a$) において、波動関数はどうなるか述べて。
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 ($-a < x < a$) におけるシュレディンガー方程式を解き、エネルギー固有値を求めよ。
4. それぞれのエネルギー固有値に対応する、規格化された波動関数を求めよ。

(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のでシュレ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

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

一般解は

$$\psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx) \quad (3)$$

である。境界条件 $0 = \psi(-a), 0 = \psi(a)$ より

$$0 = A \cos(ka) - B \sin(ka), \quad (4)$$

$$0 = A \cos(ka) + B \sin(ka). \quad (5)$$

このままでは、定数 A, B などを定める関係は出てこないように見える。そこで、まず式 (4) と式 (5) の両辺をそれぞれ加えると

$$0 = A \cos(ka) \quad (6)$$

が得られる。ここで、 $A = 0$ と置くと、本来は相互に独立な2つの条件式 (4) と (5) が同じものになり、不適である。従って、 $A \neq 0$ である。すなわち、 $\cos(ka) = 0$ という条件式が得られる。

次に、式 (4) と式 (5) の両辺を引き算すると

$$0 = B \sin(ka) \quad (7)$$

が得られる。同様の理由で、 $B \neq 0$ である。すなわち、 $\sin(ka) = 0$ という条件式が得られる。

ゆえに次の2つの場合に分けられる。

(a) $\cos(ak) = 0$ の場合 :

$$\begin{aligned} ak &= \frac{\pi}{2} \times (2n + 1), \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \\ \rightarrow k &= \frac{\pi}{2a} \times (2n + 1), \\ E &\equiv E_{2n+1}, \\ E_{2n+1} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ \rightarrow E_{2n+1} &= \left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} \right) (2n + 1)^2, \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \end{aligned} \quad (8)$$

(b) $\sin(ak) = 0$ の場合 :

$$\begin{aligned} ak &= \frac{\pi}{2} \times (2n), \quad (n = 1, 2, \dots) \\ \rightarrow k &= \frac{\pi}{2a} \times (2n), \\ E &\equiv E_{2n}, \\ E_{2n} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ \rightarrow E_{2n} &= \left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} \right) (2n)^2, \quad (n = 1, 2, \dots). \end{aligned} \quad (9)$$

この場合、 $n = 0$ が不適である理由は明白ではないが、以下議論するように、波動関数を決定する際にその理由が明らかになる。

この問題のような、 $x = 0$ のまわりで左右対称のポテンシャルをもつ系においては、量子状態を特徴づける量子数は、整数 n ではなく、奇数 $(2n + 1)$ または偶数 $(2n)$ に分類されることに注意する。

4. 波動関数は

(a) 奇数量子数 $(2n + 1)$ の量子状態の場合、次のようになる。

$$\psi_{2n+1}(x) = A \cos(kx), \quad \left[k \equiv \frac{\pi}{2a} (2n + 1) \right]. \quad (10)$$

$\psi_{2n+1}(x)$ に対して規格化を行えば

$$\begin{aligned}
 1 &= \int_{-a}^a A^2 \cos^2(kx) dx \\
 &= A^2 \int_{-a}^a \frac{[1 + \cos(2kx)]}{2} dx \\
 &= \frac{A^2}{2} \left[x + \frac{\sin(2kx)}{2k} \right]_{x=-a}^{x=a} \\
 &= A^2 a. \\
 \rightarrow \psi_{2n+1}(x) &= \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \left[\frac{\pi(2n+1)}{2a} x \right], \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (11)
 \end{aligned}$$

(b) 偶数量子数 ($2n$) の量子状態の場合、次のようになる。

$$\psi_{2n} = B \sin(kx), \quad \left[k \equiv \frac{\pi}{2a}(2n) \right]. \quad (12)$$

$\psi_{2n}(x)$ に対して規格化を行えば

$$\begin{aligned}
 1 &= \int_{-a}^a B^2 \sin^2(kx) dx \\
 &= B^2 \int_{-a}^a \frac{[1 - \cos(2kx)]}{2} dx \\
 &= \frac{B^2}{2} \left[x - \frac{\sin(2kx)}{2k} \right]_{x=-a}^{x=a} \\
 &= B^2 a. \\
 \rightarrow \psi_{2n}(x) &= \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \left[\frac{\pi(2n)}{2a} x \right], \quad (n = 1, 2, \dots). \quad (13)
 \end{aligned}$$

式 (13) において、仮に、 $n = 0$ とすると、 x の値にかかわらず、波動関数が値をもたなくなる、すなわち $\psi_0(x) = 0$ となるので、 $n = 0$ は不適である。

備考：

以上で得られた 2 つの型の波動関数の性質について調べてみる。それぞれの波動関数に対して、座標の反転操作¹ ($x \rightarrow -x$) を行うと

$$\psi_{2n+1}(-x) = +\psi_{2n+1}(x), \quad (14)$$

$$\psi_{2n}(-x) = -\psi_{2n}(x) \quad (15)$$

となり、ある対称性を生じる。座標の反転操作 ($x \rightarrow -x$) に対する波動関数の対称性を反転対称性または偶奇性と呼び、それぞれの固有値 (± 1) をパリティ² と呼ぶ。

この問題における a の値を $a/2$ に修正し、 x 座標を $a/2$ だけ右側に移動すれば、以下のポテンシャルの系の結果と一致するはずである。

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 < x < a) \\ \infty & (\text{それ以外}). \end{cases} \quad (16)$$

¹ reflection

² parity

その解には上述のような対称性は顕在化していない。しかし、 x 座標の平衡移動という視点の変化により、系に埋め込まれていた対称性が顕在化する実例と言える。