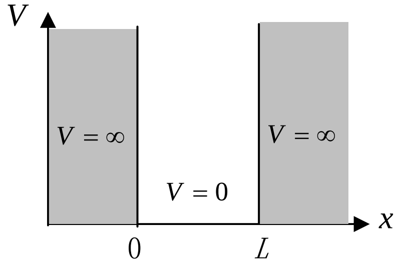
６章　Schrödinger 方程式を簡単な系で解く

[1] 箱型のポテンシャルを持つ系

　Schrodinger 方程式の最も簡単な応用例は、長さ L の１次元領域に閉じ込められた粒子(質量 m)、であろう。実在系としては、周辺を絶縁体で塞いだ細長いチューブ状の隙間に閉じ込めた電子などを思い浮かべればよい。

　系の特徴をあらわす一次元のポテンシャルを $V(x)$ とすると次式のようになる。

$$V(x)=\begin{cases}\infty & \cdots \quad (x<0)\\ 0 & \cdots \quad (0\le x\le L)\\ \infty & \cdots \quad (x>L)\end{cases} \qquad (1)$$



ポテンシャルの関数を図示すると上右図となる。この形状ゆえに「箱型ポテンシャル」とか「井戸型ポテンシャル」の系と呼ばれている。Schrodinger 方程式は次式である。

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

先ず、ポテンシャルが無限大の領域とポテンシャルがゼロの領域に分けて考える。

(a) ポテンシャルが無限大の領域

この領域へは粒子は侵入できないので波動関数はゼロである（$\Phi(x)=0$ ）。

(b) ポテンシャルがゼロの領域

ポテンシャルがゼロの領域での Schrodinger 方程式は次式である。

$$E\Phi(x)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Phi(x) \qquad (2)$$

この方程式は直ちに解けて、一般解は次式。

$$\Phi(x)=A\cos\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x+B\sin\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x \qquad (3)$$

次に、各領域(a)(b)の波動関数を連続に接続するための境界条件 $\Phi(0)=\Phi(L)=0$ を課す。すると次式が成立する。

$$A=0\text{、} \qquad \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}L=n\pi \quad (n=1,2,3,\cdots) \qquad (4)$$

この条件を考慮して、

$$\Phi_n(x)=B\sin\frac{n\pi x}{L}, \qquad \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar}=\frac{n\pi}{L}, \qquad (n=1,2,3,\cdots)\text{。} \qquad (5)$$

上式では、E と Φ は n ごとに決まるので、添字を付けて E_n、Φ_n と記した。E_n は次式となる。

$$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \quad (n=1,2,3,\cdots) \qquad (6)$$

エネルギー E_n が求まれば、時間部分も含めて波動関数 $\Psi_n(x,t)$ は次式となる。

$$\Psi_n(x,t)=\Phi_n(x)e^{E_n t/i\hbar}=B\sin\frac{n\pi x}{L}e^{E_n t/i\hbar},\quad (n=1,2,3,\cdots) \qquad (7)$$

このような箱型ポテンシャルの系のように、粒子が閉じ込められた(運動する領域が拘束された)場合のSchrodinger方程式を解くと、エネルギーは不連続(飛び飛び)な値をとる。このような状態を『量子化されている』と表現する。整数 n は量子数と呼ばれる。

粒子の存在する確率密度 $\rho_n(x,t)$ は次式のような波動関数の 2 乗であった。

$$\rho_n(x,t)=\Psi_n(x,t)^*\Psi_n(x,t) \qquad (8)$$

(7)式を代入すれば、確率密度 $\rho_n(x,t)$ は時間に依存しないことがわかる。従って、

$$\rho_n(x,t)\equiv\rho_n(x)=\Phi_n(x)^2 \qquad (9)$$

粒子は全領域のどこかに必ず存在するので、粒子の存在する確率密度を全領域で積分すれば 1 となる。

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\Phi(x)^*\Phi(x)dx=\int_0^L\Phi(x)^*\Phi(x)dx=1 \qquad (10)$$

この式を使って(5)式の B を決めることを、波動関数の規格化と云う。

$$\int_0^L\Phi_n(x)^2dx=B^2\int_0^L\sin^2\frac{n\pi x}{L}dx=B^2\frac{L}{2}=1、\qquad \therefore B=\sqrt{\frac{2}{L}} \qquad (11)$$

このときの B を規格化定数と呼ぶ。
再度、全波動関数は次式である。

$$\Psi_n(x,t)\ =\ \Phi_n(x)e^{-iE_n t/\hbar}\ =\ \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi x}{L}e^{-iE_n t/\hbar}\quad (n=1,2,3,\cdots) \qquad (12)$$

問題
（1）
粒子を有限な領域に閉じ込めると量子化が起こる。(6)式を利用して、量子化のエネルギー幅 E_2-E_1 を次の 2 つの場合について計算せよ。

(a)電子が長さ 2 Å $=2\times10^{-10}$ m の領域に閉じ込められた場合

(b)質量1g の粒子が長さ10cm の領域に閉じ込められた場合

ここで(b)のような日常的サイズでは量子化のエネルギー幅が観測不可能であることが了解できる。
（2）
粒子が $x=0\sim L/3$ 及び $x=L/3\sim 2L/3$ に存在する確率は、それぞれ、

$$\int_0^{L/3}\Phi_n(x)^2dx、\qquad \int_{L/3}^{2L/3}\Phi_n(x)^2dx$$

である。$n=1$ と $n=2$ に於いてそれぞれの値を求めよ。式や条件設定は全て本章に記述したものを使う。この結果は日常的な現象からの類推と一致するか反するかを議論せよ。