量子力学Ⅰ　平成 26 年 5 月 7 日　　　　　　　　　工学主専攻　　学籍番号　　　　　　　　　氏名

１．　一次元井戸型ポテンシャル $V(x)=\begin{cases}+\infty & (x<0, x>a)\\ V_0 & (0<x<a)\end{cases}$ のもとで１個の粒子（質量 m）が定常的な運動をしている（但し V_0 は正定数）。

(1)　固有関数及び（エネルギー）固有値を求めよ。（シュレディンガー方程式、井戸内外及びポテンシャル境界での固有関数に課せられる条件、井戸内での粒子のエネルギーとポテンシャルの大小による場合分け、などの要点に注意し、他人が見て理解できる記述となるように心がけること！）

粒子のエネルギーを ε、波動関数（固有関数）を $X(x)$ とすると、$0<x<a$ ではポテンシャルは V_0（一定値）であるので、時間を含まないシュレディンガー方程式は $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V_0\right]X(x)=\varepsilon X(x)$ と表わされる。

（注：一般に、運動量を $\vec{p}$ とすると、ポテンシャル $V(\vec{r})$ のもとでの運動に対して古典的なハミルトニアンは $H_{cl}=\frac{\vec{p}^2}{2m}+V(\vec{r})$ となる。量子力学でのハミルトニアン H を求めるには $p_x\to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ などと変換し、$H\varphi(\vec{r})=\varepsilon\varphi(\vec{r})$ に代入すれば時間を含まないシュレディンガー方程式が得られる。）

$x=0$ 及び $x=a$ でポテンシャルが不連続に変化するので、ポテンシャルが有限値で一定の $0<x<a$ （井戸内）と $x<0$ 及び $x>a$（井戸外）の２つの領域に分けて考える。

まず、$x<0$ 及び $x>a$ ではポテンシャルが無限大となっており、そのため粒子は井戸内に完全に閉じ込められている。従って、井戸の外で粒子は存在しないことになるから $x<0$ 及び $x>a$ に対して $X(x)=0$ である。

（注：波動関数（固有関数）の大きさの二乗は粒子の存在確率に対応する。すなわち、粒子が存在しない位置で固有関数の値は零である。）

次に、$0<x<a$ の井戸内について考える。シュレディンガー方程式 $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V_0\right]X(x)=\varepsilon X(x)$ を $\frac{d^2}{dx^2}X(x)=-\frac{2m(\varepsilon-V_0)}{\hbar^2}X(x)$（式１）と変形する。式１を満たす井戸内の固有関数 $X(x)$ は $x=0,a$ の境界で $x<0$ 及び $x>a$ に対する $X(x)=0$ と値が連続となるように接続されなければならない（そうでないと井戸の外と中の境界である $x=0,a$ で粒子の存在確率に不連続が生じる）。従って、井戸内の固有関数には $X(0)=X(a)=0$ となる境界条件が課せられる。（注意：井戸内には粒子が存在するのだから、固有関数 $X(x)$ には $0<x<a$ で常に零とはならないことも要請される）。

ここで、式１で表される微分方程式の一般解の形は ε と V_0 の大小関係により次の三つの場合に分けられる。

①　$\varepsilon<V_0$ のとき

式１右辺の $X(x)$ の係数は $-2m(\varepsilon-V_0)/\hbar^2>0$ となる。そこで $-2m(\varepsilon-V_0)/\hbar^2=\kappa^2$（$\kappa>0$）と置くと、式１は $\frac{d^2}{dx^2}X(x)=\kappa^2X(x)$ と変形できる。この微分方程式の一般解は $X(x)=Se^{\kappa x}+Te^{-\kappa x}$（$S,T$ は任意定数）と表される。このとき境界条件 $X(0)=X(a)=0$ を満たすためには、$S+T=0$ かつ $Se^{\kappa a}+Te^{-\kappa a}=0$ となる必要がある。これら二つが同時に成り立つためには $S=T=0$ でなければならず、従って $X(x)=0$ となる。しかしながら、$X(x)=0$ では井戸内にも粒子が全く存在しないことになり、$\varepsilon<V_0$ の場合は物理的に不適である。

②　$\varepsilon=V_0$ のとき

式１は $\frac{d^2}{dx^2}X(x)=0$ となる。この一般解は $X(x)=Ux+V$（U,V は任意定数）で表される。これが境界条件 $X(0)=X(a)=0$ を満たすためには $U=V=0$ とならなければならず、結局 $X(x)=0$ となる。従って、$\varepsilon=V_0$ の場合も $\varepsilon<V_0$ のときと同様に物理的に不適である。

③　$\varepsilon>V_0$ のとき

式１右辺の $X(x)$ の係数が $-2m(\varepsilon-V_0)/\hbar^2<0$ となる。そこで $k=\sqrt{\frac{2m(\varepsilon-V_0)}{\hbar^2}}>0$ と置くと、式１は $\frac{d^2}{dx^2}X(x)=-k^2X(x)$ と変形できる。この微分方程式の一般解は $X(x)=A\sin kx+B\cos kx$（A,B は任意定数）と表される。ここで、$x=0$ での境界条件から $X(0)=B=0$。よって $X(x)=A\sin kx$。また、$x=a$ での境界条件からは $X(a)=A\sin ka=0$。従って $A=0$ あるいは $\sin ka=0$ でなければいけない。ここで $A=0$ では $X(x)=0$ となって井戸内に粒子が全く存在しないことになり、やはり物理的に不適である。一方、$\sin ka=0$ を満たすためには、自然数 n_x を用いて $kL=n_x\pi$ の関係を満たす値のみに k を限定すればよい（すなわち、k の値としては $k_{n_x}=n_x\pi/a$ で与えられる不連続な値しか許されない）。これより、求める固有関数は $X_{n_x}(x)=A_n\sin\frac{n_x\pi}{a}x$ となる。

ここで、$[0,a]$ における $X_{n_x}(x)$ の大きさの二乗を計算すると、$\int_0^a X_{n_x}{}^*X_{n_x}dx=\int_0^a(A_{n_x}{}^*\sin k_{n_x}x)(A_{n_x}\sin k_{n_x}x)dx=A_{n_x}{}^*A_{n_x}a/2=a|A_{n_x}|^2/2$。こ

の大きさが 1 となる（$\left|X_{n_x}(x)\right|^2$が粒子の存在確率を表すようにする）ためには$\left|A_{n_x}\right| = \sqrt{2/a}$とすればよい。ここでは簡単のために正の定数を採用して$A_{n_x} = \sqrt{2/a}$。　（注：この問題ではA_{n_x}は一定値となったが、一般には規格化定数はn_xに依存する。また係数A_{n_x}は複素数であり、その偏角（位相）までを決めるためにはさらなる境界条件が必要である。）

以上の結果をまとめると、固有関数の具体的な形として$X_{n_x}(x) = \sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n_x\pi}{a}x$　（n_xは自然数）と求まる。

（エネルギー）固有値は、$k = \sqrt{\dfrac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2}}$に$k_{n_x} = n_x\pi/a$を代入（あるいはシュレディンガー方程式に$X_{n_x}(x)$を代入して計算）するとすぐに求まり、$\varepsilon_{n_x} = \dfrac{\hbar^2 k_{n_x}{}^2}{2m} = \dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\pi^2}{a^2}n_x{}^2 + V_0$となる。

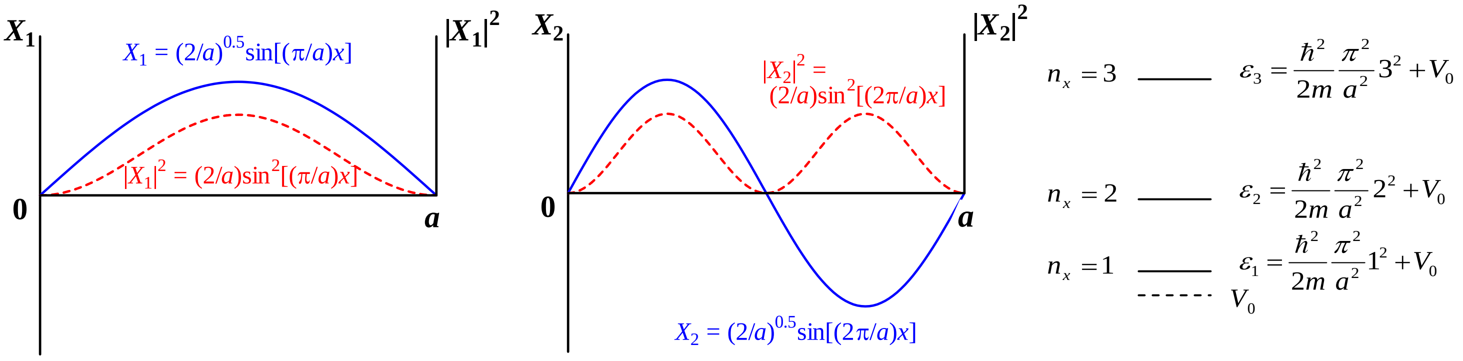
（注：束縛＆定常状態の運動及びエネルギー固有値（以下参照）はある不連続な数n_x（あるいはその組み合わせなど）によって記述することができる。このような数は量子数と呼ばれる。）

(2)　第二励起状態までについて、固有関数、粒子の存在確率の位置変化の様子を図示せよ。また、エネルギー準位図も描け。

エネルギー準位は下図一番右のようになる。なお、エネルギー固有値が最低の状態を基底状態（この場合は$n_x = 1$のとき）、次に低い状態を第一励起状態（$n_x = 2$）と呼ぶ。

固有関数は$X_{n_x}(x) = \sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n_x\pi}{a}x$、$\left|X_{n_x}(x)\right|^2 = \dfrac{2}{a}\sin^2\dfrac{n_x\pi}{a}x = \dfrac{1}{a}\left(1 - \cos\dfrac{2n_x\pi}{a}x\right)$とあらわされるので、基底状態及び第一励起状態について固有関数（青色実線）及び粒子の存在確率（固有関数の大きさの二乗、赤破線）は下図のようになる。（第二励起状態については省略。）

（注：量子数n_xの状態に対する固有関数の節の数（両端は含めない）は$n_x - 1$個である（基底状態では節なし、第一励起状態で節 1 個、…　）。また固有値からポテンシャルを差し引いた値$\varepsilon_{n_x} - V_0 = \dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\pi^2}{L^2}n_x{}^2$は運動エネルギーに対応することを踏まえると、固有関数の一般的性質として運動エネルギーが大きい場合ほど波数が大きく（波長は短く）、また時間変化を考えた場合の角振動数$\omega_{n_x} = \varepsilon_{n_x}/\hbar$が大きくなることがわかる。）



(3)　粒子の運動量に対する期待値$<p>$及びその分散$<(p-<p>)^2>$を求めよ。

$$<p> = \int_0^a X_{n_x}{}^*(x)\cdot\left(-i\hbar\frac{d}{dx}X_{n_x}(x)\right)dx = -i\hbar\frac{2}{a}\frac{n_x\pi}{a}\int_0^a \sin\left(\frac{n_x\pi}{a}x\right)\cos\left(\frac{n_x\pi}{a}x\right)dx = 0$$

$$<p^2> = \int_0^a X_{n_x}{}^x\left(-\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}X_{n_x}\right)dx = 2m\int_0^a X_{n_x}{}^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right)X_{n_x}dx = 2m\int_0^a X_{n_x}{}^*HX_{n_x}dx = 2m\varepsilon_n\int_0^a X_{n_x}{}^*X_{n_x}dx = 2m\varepsilon_{n_x}$$

よって、$<(p-<p>)^2> = <p^2 - 2p<p> + <p>^2> = <p^2> = 2m\varepsilon_{n_x}$

ちなみに、$<x> = \displaystyle\int_0^a X_{n_x}{}^*(x)\cdot x\cdot X_{n_x}(x)dx = \frac{2}{a}\int_0^a x\sin^2\left(\frac{n_x\pi}{a}x\right)dx = \frac{1}{a}\int_0^a x\left(1 - \cos\left(\frac{2n_x\pi}{a}x\right)\right)dx = \frac{a}{2}$

$$<x^2> = \int_0^a X_{n_x}{}^*x^2X_{n_x}dx = \frac{2}{a}\int_0^a x^2\sin^2\frac{n_x\pi}{a}xdx = a^2\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2n_x{}^2\pi^2}\right) \to \frac{a^2}{3}\quad (n\to\infty)$$

$$<(x-<x>)^2> = <x^2 - 2x<x> + <x>^2> = <x^2> - 2<x><x> + <x>^2 = <x^2> - <x>^2 = a^2\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2n_x{}^2\pi^2}\right) - \left(\frac{a}{2}\right)^2$$