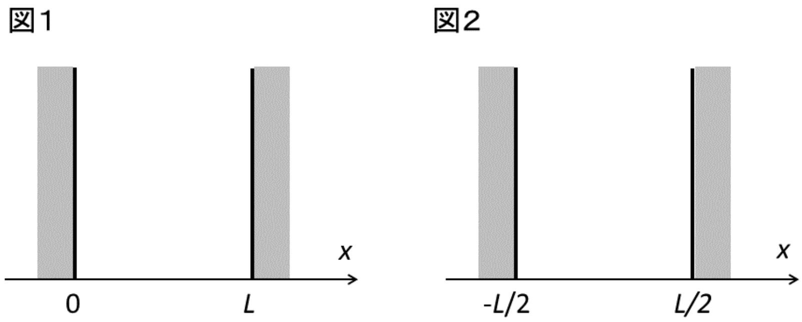
統計力学 I　講義資料（4/21）

一次元井戸型ポテンシャル中の自由粒子

質量 m の粒子が、図 1 のような長さ L の一次元的な区間（井戸）に閉じ込められている状況を量子力学的に扱う。



このとき、定常状態の Schrödinger 方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) = E\varphi(x) \tag{1}$$

で与えられる。ただし、$0 \leq x \leq L$ である。まず、この微分方程式の解を求めよう。関数 $\varphi(x)$ は、「二回微分すると負の定数がかかって、自分自身に戻る」という形をしているので、解は三角関数で書けることはすぐに分かる [1]。そこで解として、$A, B,\ k$ を実数とした

$$\varphi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx), \tag{2}$$

という形を仮定して式 (1) に代入しよう。すると、

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \tag{3}$$

という関係が得られる。微分方程式 (1) の解、というだけの情報では上の k の値は定まらないが、いま井戸の外（$x < 0,\ x > L$）には無限に高いポテンシャルがあるので、粒子は区間 $0 \leq x \leq L$ の外には出て行かない。したがって井戸の外では $\varphi(x) = 0$ である。このことと、波動関数の連続性から $\varphi(x)$ は、

$$\varphi(0) = \varphi(L) = 0 \tag{4}$$

を満たす。つまり、解 (2) のうち、上の境界条件を満たすものを正しく選ぶ必要がある。最初の条件 $\varphi(0) = 0$ から、$B = 0$ が得られる。次に、$\varphi(L) = 0$ から、$A\sin(kL) = 0$ という条件が得られる。これを満たす k は、

$$k_n = \frac{n\pi}{L}, \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, ...) \tag{5}$$

[1] E が負にならない理由を考えよう。

である。この k_n を用いて、$\varphi_n(x) = A\sin(k_n x)$ を定義すれば、$\varphi_n(x)$ は、Schrödinger 方程式 (1) と、境界条件 (4) をともに満たす。

ここで整数 n の範囲について注意が必要である。$n = 0$ の場合は、恒等的に $\varphi_0(x) = 0$ となってしまい、物理的状態としての資格を満たさない（存在確率がゼロとなり、粒子が「いない」ことに相当する）。また、n の場合と $-n$ とは、$\varphi_{-n}(x) = -\varphi_n(x)$ と定数倍で結ばれている。これは、φ_n と φ_{-n} が同一の物理的状態に対応することを意味しているので、片方だけを選ぶ必要がある。そこで、ここでは $n > 0$ の場合を選ぼう。

以上をまとめると、一次元井戸型ポテンシャル中の自由粒子に対する、Schrödinger 方程式の解は、

$$\varphi_n(x) = A\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \qquad (n = 1, 2, 3, ...), \tag{6}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2(k_n)^2}{2m} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2 \tag{7}$$

（E_n は、$\varphi_n(x)$ のエネルギー固有値）ということになる。

最後に定数 A は、規格化条件

$$\int_0^L dx|\varphi_n(x)|^2 = 1 \tag{8}$$

から定めることができる。上の条件に $\varphi_n(x)$ を代入すると

$$\begin{aligned} 1 &= |A|^2 \int_0^L dx \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \\ &= |A|^2 \int_0^L dx \frac{1}{2}\left[1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)\right] \\ &= \frac{L}{2}|A|^2 \end{aligned} \tag{9}$$

となるので、$|A| = \sqrt{2/L}$ が得られる。$\varphi_n(x)$ の（複素）定数倍は、$\varphi_n(x)$ と同一の物理的状態を表すので、今後の講義では単純に $A = \sqrt{2/L}$ とする。

Ex. 1) 解の仮定として、式 (2) の代わりに

$$\varphi(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx}, \tag{10}$$

(C, D は定数) と置いて同じように計算し、(7) と同じ結果を再現せよ。

Ex. 2) 井戸型ポテンシャルの範囲が $-L/2 \le x \le L/2$（図 2 を参照）の場合に、Schrödinger 方程式の解を求めよ。（ヒント：原点をずらしただけだから、エネルギー固有値は変わらないはず。どのような解を仮定して微分方程式を解く？）