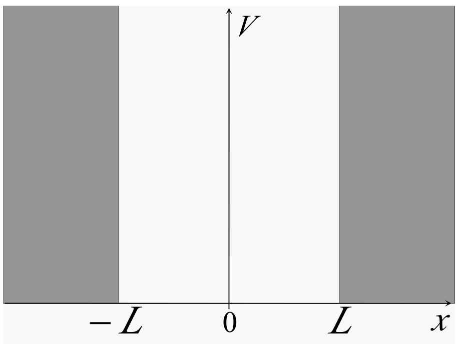
1　一次元の無限に深い井戸型ポテンシャル

ここでは、簡単な例として一次元の無限に深いポテンシャルに捕らわれた粒子を表す波動関数を求めてみよう。



左の図において、

$V(x) = 0, (-L \leq x \leq L)$

$V(x) = \infty, (x \leq -L, x \geq L)$

一次元の定常状態のシュレーディンガー方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2} + Vu = Eu$$

のように表される。この粒子が定常状態のとき、上を満たすが、$V(x) = \infty$ とすると、右辺のエネルギーと波動関数の積（$= Eu$）が発散しないためには、Vu が有限でなければならない。よって $V(x) = \infty$ となる領域で、$u(x) = 0$ が成り立つ。つまり波動関数は、この無限に深い量子井戸に閉じ込められていることになる。よって、$-L \leq x \leq L$ の範囲だけ上の方程式を解けばよいことになる。また、波動関数が連続であることより、境界条件として $u(-L) = u(L) = 0$ を要請しよう。以上より、

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2u}{dx^2} = Eu \qquad (-L \leq x \leq L) \\ u(-L) = u(L) = 0 \end{cases}$$

が解くべき方程式となる。

ここで粒子の持つエネルギー E はポテンシャルが $V(x) = 0$ より正となることが予想される。念のため $E < 0$ と仮定すると、

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} = 0$$

より、

$$\left(\frac{d}{dx}-\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}\right)\left(\frac{d}{dx}+\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}\right)u(x)=0$$

だから、

$$u(x)=A\exp\left(\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}x\right)+B\exp\left(-\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}x\right)$$

を得るが、この解が境界条件 $u(-L)=u(L)=0$ を満たすには、$A=B=0$ とするしかないがこれでは、波動が存在しないことと一緒である。よって $E>0$ である。すると、

$$\left(\frac{d}{dx}-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\right)\left(\frac{d}{dx}+i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\right)u(x)=0$$

より、

$$u(x)=A\exp\left(i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right)+B\exp\left(-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right)$$

が $-L\leq x\leq L$ で成り立つ。今、煩雑さを避けるため $k=\dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ と置き、これに境界条件を当てはめると、

$$\begin{aligned} u(L) &= A\exp(ikL)+B\exp(-ikL) && (1)\\ u(-L) &= A\exp(-ikL)+B\exp(ikL) && (2) \end{aligned}$$

よって、$(1)\times A-(2)\times B$ より、

$$(A^2-B^2)\exp(ik)=0$$

だから、結局、$B=\pm A$ となる。以上をまとめると、解は、

$$\begin{aligned} u(x) &= A\exp(ikx)+A\exp(-ikx)\\ &= C\cos(kx) \qquad (\text{但し、}C=2A\text{ とした。}) \end{aligned}$$

叉は、

$$\begin{aligned} u(x) &= A\exp(ikx)+A\exp(-ikx)\\ &= C\sin(kx) \qquad (\text{但し、}C=2iA\text{ とした。}) \end{aligned}$$

となる。ここで再び境界条件を用いると、

$$\begin{aligned} u(a) &= C\cos(kL)=0\\ \therefore kL &= \left(n+\frac{1}{2}\right)\pi \qquad (n\in R) \end{aligned}$$

又は、

$$\begin{aligned} u(a) &= C\sin(kL) = 0 \\ \therefore kL &= n\pi \qquad (n \in R) \end{aligned}$$

となる、今、$k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ だったから、n に依存するエネルギー E を E_n と置くと、

$$\begin{aligned} u(x) &= C\cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right), \\ \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar}L &= \left(\frac{2n+1}{2}\right)\pi \\ \therefore E_n &= (2n+1)^2\frac{\pi^2\hbar^2}{8mL^2} \\ \therefore u(x) &= C\cos\left(\frac{(2n+1)\pi}{2L}x\right) \end{aligned}$$

又は

$$\begin{aligned} u(x) &= C\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right), \\ \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar}L &= \left(\frac{2n}{2}\right)\pi \\ \therefore E_n &= (2n)^2\frac{\pi^2\hbar^2}{8mL^2} \\ \therefore u(x) &= C\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \end{aligned}$$

となる。最後に規格化によって、残った未知定数 C を求めよう。
波動関数は、

$$\begin{aligned} \Psi(x,t) &= \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right)C\cos\left(\frac{(2n+1)\pi}{2L}x\right) \\ &\text{または、} \\ \Psi(x,t) &= \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right)C\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \end{aligned}$$

であるから、

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx &= \int_{-L}^{L} \left(C \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) \cos\left(\frac{(2n+1)\pi}{2L}x\right)\right)^* C \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) \cos\left(\frac{(2n+1)\pi}{2L}x\right) dx \\
&= |C|^2 \int_{-L}^{L} \cos^2\left(\frac{(2n+1)\pi}{2L}x\right) dx \\
&= |C|^2 \int_{-L}^{L} \frac{1+\cos\left(\frac{(2n+1)\pi}{L}x\right)}{2} dx \\
&= |C|^2 \left[\frac{1}{2}x + \frac{L}{(2n+1)\pi} \sin\left(\frac{(2n+1)\pi}{L}x\right)\right]_{-L}^{L} \\
&= |C|^2 L \\
&= 1 \\
\therefore C &= \frac{1}{\sqrt{L}} \qquad (\because C \text{ は正実数でよいから})
\end{aligned}
$$

叉は、

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx &= \int_{-L}^{L} \left(C \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\right)^* C \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx \\
&= |C|^2 \int_{-L}^{L} \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx \\
&= |C|^2 \int_{-L}^{L} \frac{1-\cos\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)}{2} dx \\
&= |C|^2 \left[\frac{1}{2}x - \frac{L}{2n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)\right]_{-L}^{L} \\
&= |C|^2 L \\
&= 1 \\
\therefore C &= \frac{1}{\sqrt{L}} \qquad (\because C \text{ は正実数でよいから})
\end{aligned}
$$

以上より、規格化された波動関数とエネルギーは、

$$
\begin{aligned}
E_n &= (2n+1)^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{8mL^2} \\
\Psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) \cos\left(\frac{(2n+1)\pi}{2L}x\right) \qquad (n \in R)
\end{aligned}
$$

叉は

$$
\begin{aligned}
E_n &= (2n)^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{8mL^2} \\
\Psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \qquad (n \in R)
\end{aligned}
$$

となる。□