## 1 次元箱の中の粒子

さて、最も簡単なしかし最も基本的な系は、一次元の井戸の中を運動する質量 $m$ の粒子である。図 2.2 にあるように、井戸の幅 $a$ の内側ではポテンシャルエネルギーはゼロで、粒子は自由に運動することが出来るが、外側のポテンシャルは無限大なので、粒子は飛び出すことが出来ない。この井戸の中で、粒子が速度 $v$ で運動しているときのシュレディンガー方程式は、直前の項目の(2.7)式の $E$ に$(1/2)mv^2$、$V$ に 0 を代入して、

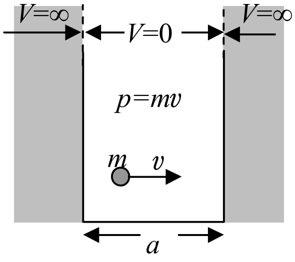


図 2.2　1 次元の井戸の中の粒子

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(\frac{1}{2}mv^2\right)\psi=0 \qquad (2.12)$$

すなわち、

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=-\frac{4\pi^2 m^2 v^2}{h^2}\psi \qquad (2.13)$$

これを、前項目の(2.5)と比べると、解は

$$\psi = A\sin\left(\frac{2\pi mv}{h}x\right) \qquad (2.14)$$

となることが推定される。実際には、cos、exp 関数も（2.13）の解であるが、以下に述べる境界条件から除外される。解の境界条件としては、$x$=0, $a$ の 2 点で$\psi$=0 でなければならないから、ここでサイン関数がゼロ、すなわち$\pi$の整数倍となることが必要である。従って、

$$\frac{2\pi mva}{h}=n\pi \qquad n=1,2,3,\ldots. \qquad (2.15)$$

この関係を用いると、

$$\psi = A\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \qquad (2.16)$$

$$E=\frac{1}{2}mv^2=\frac{n^2h^2}{8ma^2} \qquad (2.17)$$

が得られる。この式は、井戸の中の粒子は、自由な運動エネルギーを持つことは出来ず、図に示すように、$h^2/(8ma^2)$ の整数倍のエネルギー準位にだけ存在できることを

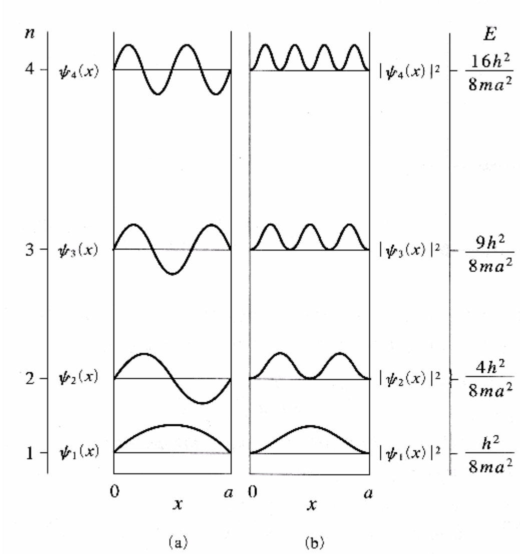


図 2.3　1 次元井戸の中の粒子のエネルギー、波動関数、存在確率密度。

示している。エネルギー準位を表す整数値 $n$ を量子数という。

図 2.3 を参照しながら、エネルギー準位について考えてみよう。並進エネルギーの準位を表す量子数は 1 から始まる。$n$=0 は(2.16)式の関数では意味が無いからである。エネルギーの大きさは $n^2$ に比例するので、準位の間隔が上に行くほど大きくなるのが 1 次元井戸のエネルギー準位の特徴である。

$n$=1 と $n$=2 との間隔$\Delta E$ は $3h^2/(8ma^2)$となるが、これがどの程度の大きさであるかを考えてみよう。$a$ が目に見えるほどの長さで、$m$ が感じられるほどの重さ、例えば 1cm と 1g である場合には、$\Delta E = 1.63\times10^{-60}$ J $= 9.81\times10^{-40}$ kJ/mol という驚くほど小さい値となり、どのような装置を用いても運動エネルギーの不連続を観測することは不可能である。従って我々は、日常生活では運動エネルギーの離散性を感じるようなことはない。