# 量子力学　第 2 回　演習解答

1. 波動関数を求めるには、シュレーディンガー方程式を解いた後、境界条件や規格化条件を課して、不定係数を求める必要がある。量子力学において本質的に重要なのは、境界条件と規格化条件のどちらか？理由も含めて答えなさい。

**【解答】**

量子力学において、本質的に重要なのは境界条件である。詳細は、第 3 回講義ライブビデオ冒頭の説明を参照のこと。

2. 波動関数

$$\Psi(\boldsymbol{r},t) = \exp(-i\frac{\varepsilon}{\hbar}t)\Psi(\boldsymbol{r},0) \tag{1}$$

が、時間に依存するシュレーディンガー方程式の解になっていることを示せ。ここで $\varepsilon$ はエネルギー固有値、 $\Psi(\boldsymbol{r},0)$ は定常状態における波動関数である。

**【解答】**

時間に依存するシュレーディンガー方程式

$$\hat{H}\Psi(\boldsymbol{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t) \tag{2}$$

に、式 (1) で表される波動関数を代入する。ハミルトニアンが時間を陽に含まない場合、左辺を計算すると、

$$\hat{H}\Psi(\boldsymbol{r},t) = \hat{H}\{\exp(-i\frac{\varepsilon}{\hbar}t)\Psi(\boldsymbol{r},0)\} = \exp(-i\frac{\varepsilon}{\hbar}t)\hat{H}\Psi(\boldsymbol{r},0) \tag{3}$$

となる。ここで定常状態における波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r},0)$ は、

$$\hat{H}\Psi(\boldsymbol{r},0) = \varepsilon\Psi(\boldsymbol{r},0) \tag{4}$$

の関係を満たすことから、結局左辺は、

$$\hat{H}\Psi(\boldsymbol{r},t) = \exp(-i\frac{\varepsilon}{\hbar}t)\varepsilon\Psi(\boldsymbol{r},0) = \varepsilon\Psi(\boldsymbol{r},t) \tag{5}$$

となる。また右辺は、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\{\exp(-i\frac{\varepsilon}{\hbar}t)\Psi(\boldsymbol{r},0)\} \tag{6}$$

$$= \varepsilon\exp(-i\frac{\varepsilon}{\hbar}t)\Psi(\boldsymbol{r},0) = \varepsilon\Psi(\boldsymbol{r},t) \tag{7}$$

となる。したがって、左辺と右辺が等しくなることから、式 (1) で表される波動関数が、時間に依存するシュレーディンガー方程式の解になっていることが示された。

3. 無限井戸型ポテンシャル中の量子力学的 1 次元粒子の振る舞いが、古典的粒子の振る舞いと異なる点はどこか、思いつく限り複数挙げて説明しなさい。

【解答】

- 古典的粒子のエネルギーは連続的な値をとるのに対し、量子力学的粒子のエネルギーはとびとびの値をとる。これを量子化と呼ぶ。量子力学的粒子の量子状態を表す波動関数は、境界条件を満たす特定の関数しか取り得ないため、対応する物理量の測定値の期待値も特定の値しか取り得ない。
- 古典的粒子のエネルギーの最低値は 0 を取るのに対し、量子力学粒子のエネルギーの最低値は 0 にはならず、有限の値をもつ。これは、量子力学的粒子の位置と運動量が同時に定まらない不確定性原理によるものである。
- 古典的粒子の位置と運動量は同時に定めることができるのに対し、量子力学的粒子の位置と運動量は同時に定めることができない。すなわち、量子力学的粒子における位置のばらつきと運動量のばらつきの積は、一定値より小さくならない（不確定性原理）。
- 量子力学的粒子の位置は確率的にしか定まらない。量子力学的粒子をある位置に見出す確率振幅は波動として広がっており、井戸型ポテンシャルの中では、$+x$ 方向に進む波動と $-x$ 方向に進む波動が干渉して、確率振幅は定在波として表される。これは量子力学的粒子の波動性を示すものである。一方、古典的粒子は波動性を有しておらず、初期条件さえ定まれば、ある時刻における古典的粒子の位置は確定される。

4. 1 次元箱型ポテンシャル障壁に、質量 $m$、エネルギー $\varepsilon$ の粒子が $x < 0$ の領域から入射する問題を考える。以下の問題に答えよ。

(1) 第 2 回講義ビデオでは、$\varepsilon < V_0$ の場合の波動関数を求めた。その結果から、$\varepsilon < V_0$ の場合の量子力学的粒子の振る舞いが、古典的粒子の振る舞いと異なる点はどこか、説明しなさい。

【解答】

$\varepsilon < V_0$ の場合、粒子の存在する確率密度を $x$ の関数としてグラフに書くと、図 1 のようになる。

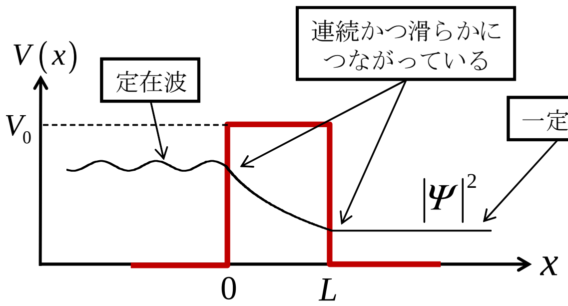


図 1　確率密度 $|\Psi|^2$ の $x$ 依存性

この結果、領域 I$(x < 0)$ から領域 III$(x > L)$ への粒子の透過率 $T$ の値は 0 ではなく、有限の値をもつことがわかる。すなわち、量子力学的粒子はポテンシャル障壁を通り抜け、領域 I から領域 III へ透過することを意味している。この現象は、量子力学的粒子にのみ観測される現象であり、トンネル効果と呼ばれる。一方、古典的粒子の場合には、障壁を透過することはない。

(2) $\varepsilon > V_0$ の場合について、反射率 $R$, 透過率 $T$ をエネルギー $\varepsilon$ の関数として求めなさい。

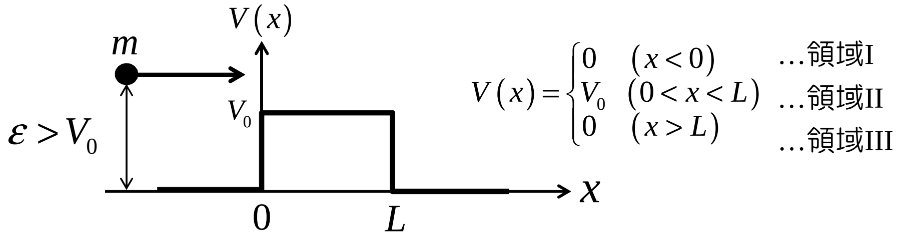


図 2　1 次元箱型ポテンシャル障壁 ($\varepsilon > V_0$)

【解答】

(ヒント:第 2 回講義ビデオ中で行なった $\varepsilon < V_0$ における計算で、$k \to k_1, \alpha \to ik_2$ と置けばよい)
シュレーディンガー方程式は各領域で (図 2)、

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi_{\mathrm{I}} = \varepsilon\Psi_{\mathrm{I}} & (x<0) \\ \left[-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0\right]\Psi_{\mathrm{II}} = \varepsilon\Psi_{\mathrm{II}} & (0<x<L) \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi_{\mathrm{III}} = \varepsilon\Psi_{\mathrm{III}} & (L<x) \end{cases} \tag{8}$$

と書くことができる。各領域におけるシュレーディンガー方程式を解くと、波動関数は、

$$\begin{cases} \Psi_{\mathrm{I}} = a\exp(ik_1x) + b\exp(-ik_1x) & (x<0) \\ \Psi_{\mathrm{II}} = c\exp(ik_2x) + d\exp(-ik_2x) & (0<x<L) \\ \Psi_{\mathrm{III}} = f\exp(ik_1x) & (L<x) \end{cases} \tag{9}$$

と書ける。ただし、$a, b, c, d, f$ は定数であり、

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar} \tag{10}$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(\varepsilon - V_0)}}{\hbar} \tag{11}$$

である。ここで、波動関数の境界条件より、

$$\Psi_{\mathrm{I}}(0) = \Psi_{\mathrm{II}}(0) \tag{12}$$

$$\left(\frac{\partial\Psi_{\mathrm{I}}}{\partial x}\right)_{x=0} = \left(\frac{\partial\Psi_{\mathrm{II}}}{\partial x}\right)_{x=0} \tag{13}$$

$$\Psi_{\mathrm{II}}(L) = \Psi_{\mathrm{III}}(L) \tag{14}$$

$$\left(\frac{\partial\Psi_{\mathrm{II}}}{\partial x}\right)_{x=L} = \left(\frac{\partial\Psi_{\mathrm{III}}}{\partial x}\right)_{x=L} \tag{15}$$

であるから、式 (9),(12),(13) より、

$$a + b = c + d \tag{16}$$

$$k_1(a - b) = k_2(c - d) \tag{17}$$

式 (9),(14),(15) より、

$$c\exp(ik_2L)+d\exp(-ik_2L)=f\exp(ik_1L) \tag{18}$$
$$k_2\{c\exp(ik_2L)-d\exp(-ik_2L)\}=k_1f\exp(ik_1L) \tag{19}$$

となる。式 (16)〜(19) より、

$$a=\left[\cos(k_2L)-i\frac{k_1^2+k_2^2}{2k_1k_2}\sin(k_2L)\right]\exp(ik_1L)f \tag{20}$$
$$b=i\frac{k_2^2-k_1^2}{2k_1k_2}\sin(k_2L)\exp(ik_1L)f \tag{21}$$
$$c=\frac{k_1+k_2}{2k_2}\exp\{i(k_1-k_2)L\}f \tag{22}$$
$$d=\frac{k_2-k_1}{2k_2}\exp\{i(k_1+k_2)L\}f \tag{23}$$

と表せる。

領域 I と領域 II の境界における反射率 $R$、領域 I から領域 III への透過率 $T$ をエネルギー $\varepsilon$ の関数として求めると、

$$\begin{aligned}
R=\frac{|b|^2}{|a|^2}&=\frac{(k_2^2-k_1^2)^2\sin^2(k_2L)}{4k_1^2k_2^2+(k_1^2-k_2^2)^2\sin^2(k_2L)}\\
&=\frac{V_0^2\sin^2(k_2L)}{4\varepsilon(\varepsilon-V_0)+V_0^2\sin^2(k_2L)}\\
&=\left[1+\frac{4\varepsilon(\varepsilon-V_0)}{V_0^2\sin^2(k_2L)}\right]^{-1} \qquad (24)\\
T=\frac{|f|^2}{|a|^2}&=\frac{4k_1^2k_2^2}{4k_1^2k_2^2+(k_1^2-k_2^2)^2\sin^2(k_2L)}\\
&=\frac{4\varepsilon(\varepsilon-V_0)}{4\varepsilon(\varepsilon-V_0)+V_0^2\sin^2(k_2L)}\\
&=\left[1+\frac{V_0^2\sin^2(k_2L)}{4\varepsilon(\varepsilon-V_0)}\right]^{-1} \qquad (25)
\end{aligned}$$

となる。したがって、反射率 $R$ は 0 ではなく、領域 I と領域 II の境界において粒子は反射する。

(3) (2) において $\varepsilon, V_0$ を固定したとき、$R=0,\ T=1$ となる条件を求めなさい。

【解答】

式 (25) より、$\sin^2(k_2L)=0$ となるとき、$R=0,\ T=1$ となる。すなわち、$k_2L=\pi n\ (n=1,2,3\cdots)$ を満たすとき粒子は反射せず、100 % 透過する。この現象を共鳴現象と呼ぶ。共鳴現象が起こる条件は、

$$\sqrt{2m(\varepsilon-V_0)}L=\pi n\hbar \qquad (n=1,2,3\cdots) \tag{26}$$
$$L=\frac{\pi\hbar}{\sqrt{2m(\varepsilon-V_0)}}n \qquad (n=1,2,3\cdots) \tag{27}$$

となる。

(4) (2)(3) の結果から、$\varepsilon > V_0$ の場合の量子力学的粒子の振る舞いが、古典的粒子の振る舞いと異なる点はどこか、思いつく限り複数挙げて説明しなさい。

【解答】

- 古典的粒子では、$\varepsilon > V_0$ であればポテンシャル障壁を無視して透過（通過）できる。しかし、量子力学的粒子の場合、$\varepsilon > V_0$ であっても、ポテンシャル障壁を無視できなくなり、反射する確率を持つようになる。
- 量子力学的粒子の場合、ポテンシャル障壁の厚さ $L$ の間に定在波が立つ条件でのみ (補足, 式 (27))、100% 透過する (共鳴現象)。これは領域 II$(0 < x < L)$ において、粒子の確率振幅を表す波動が干渉によって強め合っているためであり、量子力学的粒子が波動性をもつことに由来する。古典的粒子の場合、そのような波動性を有しないため、ある特定の条件で透過率が 100 % になることはない。

## 付録

参考のため、第 2 回講義中に行なった、$\varepsilon(\varepsilon < V_0)$ の場合 (図 3) の 1 次元粒子の波動関数の計算を示す。

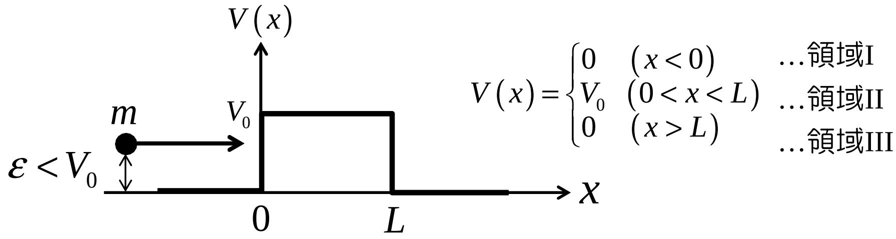


図 3　1 次元箱型ポテンシャル障壁 $(\varepsilon < V_0)$

領域 I において波動関数が満たすべきシュレーディンガー方程式、及び波動関数の一般解を求める。

領域 I$(x < 0)$ では $V(x) = 0$ であるので、波動関数 $\Psi_{\mathrm{I}}(x) \equiv \Psi_{\mathrm{I}}$ が満たすべきシュレーディンガー方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi_{\mathrm{I}} = \varepsilon\Psi_{\mathrm{I}} \qquad (x < 0) \tag{28}$$

と書ける。シュレーディンガー方程式を解くと、波動関数 $\Psi_{\mathrm{I}}$ は定数 $a, b$ を用いて、

$$\Psi_{\mathrm{I}} = a\exp(ikx) + b\exp(-ikx) \qquad (x < 0) \tag{29}$$

と表される。ただし、$k = \sqrt{2m\varepsilon}/\hbar$ である。

領域 II において波動関数が満たすべきシュレーディンガー方程式、及び波動関数の一般解を求める。

領域 II$(0 < x < L)$ では $V(x) = V_0$ であるので、波動関数 $\Psi_{\mathrm{II}}(x) \equiv \Psi_{\mathrm{II}}$ が満たすべきシュレーディンガー方程式は、

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0\right]\Psi_{\mathrm{II}} = \varepsilon\Psi_{\mathrm{II}} \qquad (0 < x < L) \tag{30}$$

と書ける。シュレーディンガー方程式を解くと、波動関数 $\Psi_{\mathrm{II}}$ は定数 $c, d$ を用いて、

$$\Psi_{\mathrm{II}} = c\exp(\alpha x) + d\exp(-\alpha x) \qquad (0 < x < L) \tag{31}$$

と表される。ただし、$\alpha = \sqrt{2m(V_0 - \varepsilon)}/\hbar$ である。

領域 III において波動関数が満たすべきシュレーディンガー方程式、及び波動関数の一般解を求める。

領域 III$(L < x)$ では $V(x) = 0$ であるので、波動関数 $\Psi_{\text{III}}(x) \equiv \Psi_{\text{III}}$ が満たすべきシュレーディンガー方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi_{\text{III}} = \varepsilon\Psi_{\text{III}} \qquad (L < x) \tag{32}$$

と書ける。シュレーディンガー方程式を解くと、波動関数 $\Psi_{\text{III}}$ は振幅を $f$ として、

$$\Psi_{\text{III}} = f\exp(ikx) \qquad (L < x) \tag{33}$$

と表される。ただし、$k = \sqrt{2m\varepsilon}/\hbar$ である。

領域 I 及び領域 II の波動関数を $f$ を用いて表す。

波動関数の境界条件より、

$$\Psi_{\text{I}}(0) = \Psi_{\text{II}}(0) \tag{34}$$
$$\left(\frac{\partial\Psi_{\text{I}}}{\partial x}\right)_{x=0} = \left(\frac{\partial\Psi_{\text{II}}}{\partial x}\right)_{x=0} \tag{35}$$
$$\Psi_{\text{II}}(L) = \Psi_{\text{III}}(L) \tag{36}$$
$$\left(\frac{\partial\Psi_{\text{II}}}{\partial x}\right)_{x=L} = \left(\frac{\partial\Psi_{\text{III}}}{\partial x}\right)_{x=L} \tag{37}$$

を満たさなければならない。式 (34),(35) より、

$$a + b = c + d \tag{38}$$
$$ik(a - b) = \alpha(c - d) \tag{39}$$

式 (36),(37) より、

$$c\exp(\alpha L) + d\exp(-\alpha L) = f\exp(ikL) \tag{40}$$
$$\alpha\{c\exp(\alpha L) - d\exp(-\alpha L)\} = ikf\exp(ikL) \tag{41}$$

となる。式 (38)〜(41) より、

$$a = \left[\cosh(\alpha L) + i\frac{\alpha^2 - k^2}{2\alpha k}\sinh(\alpha L)\right]\exp(ikL)f \tag{42}$$
$$b = -i\frac{\alpha^2 + k^2}{2\alpha k}\sinh(\alpha L)\exp(ikL)f \tag{43}$$
$$c = \frac{\alpha + ik}{2\alpha}\exp\{(ik - \alpha)L\}f \tag{44}$$
$$d = \frac{\alpha - ik}{2\alpha}\exp\{(ik + \alpha)L\}f \tag{45}$$

と表せる。

領域 I と領域 II の境界における反射率 $R$ をエネルギー $\varepsilon$ の関数として求める。

$$\begin{aligned} R = \frac{\frac{\hbar k}{m}|b|^2}{\frac{\hbar k}{m}|a|^2} &= \frac{(\alpha^2 + k^2)^2\sinh^2(\alpha L)}{4\alpha^2 k^2\cosh^2(\alpha L) + (\alpha^2 - k^2)^2\sinh^2(\alpha L)} \\ &= \left[1 + \frac{4\varepsilon(V_0 - \varepsilon)}{V_0^2\sinh^2(\alpha L)}\right]^{-1} \end{aligned} \tag{46}$$

領域 I から領域 III への透過率 $T$ をエネルギー $\varepsilon$ の関数として求める。

$$
\begin{aligned}
T = \frac{\frac{\hbar k}{m}|f|^2}{\frac{\hbar k}{m}|a|^2} &= \frac{4\alpha^2 k^2}{4\alpha^2 k^2 \cosh^2(\alpha L) + (\alpha^2 - k^2)^2 \sinh^2(\alpha L)} \\
&= \left[1 + \frac{V_0^2 \sinh^2(\alpha L)}{4\varepsilon(V_0 - \varepsilon)}\right]^{-1}
\end{aligned}
\tag{47}
$$

この結果、

$$
\begin{aligned}
R + T &= \frac{(\alpha^2 + k^2)^2 \sinh^2(\alpha L)}{4\alpha^2 k^2 \cosh^2(\alpha L) + (\alpha^2 - k^2)^2 \sinh^2(\alpha L)} \\
&\quad + \frac{4\alpha^2 k^2}{4\alpha^2 k^2 \cosh^2(\alpha L) + (\alpha^2 - k^2)^2 \sinh^2(\alpha L)} \\
&= \frac{4\alpha^2 k^2 \{1 + \sinh^2(\alpha L)\} + (\alpha^2 - k^2)^2 \sinh^2(\alpha L)}{4\alpha^2 k^2 \cosh^2(\alpha L) + (\alpha^2 - k^2)^2 \sinh^2(\alpha L)} \\
&= 1
\end{aligned}
\tag{48}
$$

となり、$R + T = 1$ であることが示された。