

生命環境化学特別演習（第3回）

距離 L の一次元の箱の中を往復運動する電子について、位置を x 、質量を m 、位置エネルギー $U(x)$ を 0 とすると、そのシュレーディンガー方程式は $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x)$ と示される。

また、この解（固有関数）は $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$ (n は自然数) となった。

このときのエネルギー固有値 E を、($\psi(x)$ を含まない式で) 求めよ。

【解答例】

シュレーディンガー方程式 $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x)$ に、 $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$ を代入。

$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x \right) = E\psi(x)$ となるので、左辺を計算すると、

$$E\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{2}{L}} \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2 \left(-\sin \frac{n\pi}{L} x \right) = \frac{\hbar^2}{2m \cdot 4\pi^2} \cdot \frac{n^2 \pi^2}{L^2} \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x \right) = \frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2} \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x \right)$$

よって $E\psi(x) = \frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2} \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x \right) = \frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2} \psi(x)$ となるので、 $E = \frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2}$ となる。

このエネルギー固有値 E の値は、今回の授業スライドの5ページ「ド・ブロイの玉転がし」で出てきた、波のエネルギー E と一致します。なお、今回の設問の固有関数 $\psi(x)$ の式が後で出てくる予定です。

なお、 $E = \frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$ ですので、 $\hbar$ を用いた式でも正答です。