3、ポテンシャルと束縛状態

3-1 井戸型ポテンシャル（1次元）

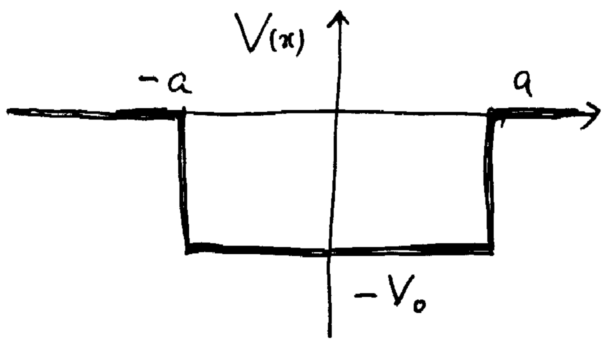
- 質量 m の粒子 ← ポテンシャル $V(x)$ に束縛されている。

(注：ポテンシャル $V(x)$ は何が作っているのか？
↓
それはここでは考えない。
何かがポテンシャル $V(x)$ を生み出している とする)

- 1体問題：一般に、1体問題は自然界には存在しない。簡単化しているからである。

- 井戸型ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & |x| < a \\ 0 & |x| > a \end{cases}$$



$(V_0 > 0)$

- Schrödinger 方程式

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)}$$

これは 2階の微分方程式

↓

解いて $\psi(x)$ を求めるには

$\boxed{\text{2個の条件}}$が必要

☆ ところが E も未知数

↑(固有値)

よって $\boxed{\text{もう1つ条件}}$が必要

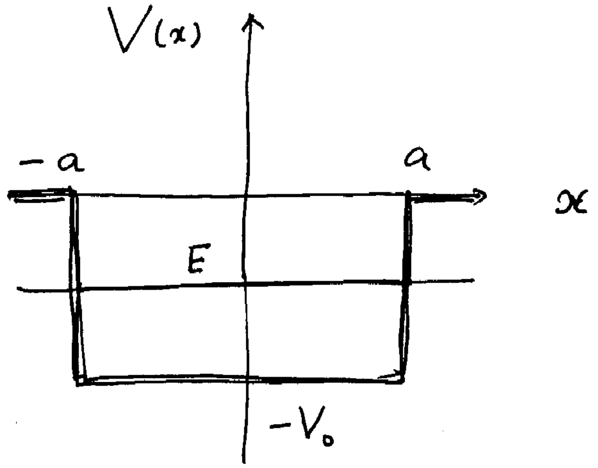
↓

波動関数の規格化

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$

- エネルギー固有値 E は 正か負か?

井戸型の束縛状態 ⇒ E は負



$V(x) \to 0 \quad x \to \pm\infty$

従って、十分遠方では 運動エネルギーだけとなる

これが正だと どこかにいってしまう

↕

束縛されない

[束縛状態] → $E < 0$

No.

Date

[束縛状態]

$$\begin{cases} \text{微分方程式は 2階} & \text{2個の条件} \\ \text{エネルギー固有値が未知} & \text{1個の条件} \end{cases}$$

$\boxed{\text{3個の条件が必要}}$

- $\boxed{\psi(\pm\infty) = 0}$ (2個)
- 粒子の存在確率は $\underbrace{\text{空間全体で1}}$ ↓ どこかにいる

$$\therefore \boxed{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1} \quad (1\text{個})$$

[井戸型ポテンシャルの場合（解法）]

1. x の範囲を分けて
微分方程式を解く

$$\begin{cases} (\mathrm{I}) & x < -a \\ (\mathrm{II}) & -a < x < a \\ (\mathrm{III}) & x > a \end{cases}$$

2. 波動関数 $\psi(x)$ とその微分係数 $\psi'(x)$ は
領域の境界で連続

・$\psi(x)$

$$\begin{cases} \psi^{(\mathrm{I})}(-a) = \psi^{(\mathrm{II})}(-a) \\ \psi^{(\mathrm{II})}(a) = \psi^{(\mathrm{III})}(a) \end{cases}$$

・$\psi'(x)$

$$\begin{cases} \dfrac{d\psi^{(\mathrm{I})}}{dx}(x=-a) = \dfrac{d\psi^{(\mathrm{II})}}{dx}(x=-a) \\[2ex] \dfrac{d\psi^{(\mathrm{II})}}{dx}(x=a) = \dfrac{d\psi^{(\mathrm{III})}}{dx}(x=a) \end{cases}$$

[1] 領域 I ($x < -a$)

Schrödinger 方程式は

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

$E < 0$ なので $k \equiv \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$ とすると

$$\boxed{\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - k^2\psi(x) = 0}$$ となる

この一般解は

$$\underline{\psi(x) = A_1 e^{-kx} + A_2 e^{kx}}$$

境界条件は $x = -\infty$ で $\psi(-\infty) = 0$

よって $\boxed{A_1 = 0}$ でないといけない.

すなわち

$$\boxed{\psi^{(I)}(x) = A_2 e^{kx}}$$

[2] 領域 II $(-a < x < a)$

この時 Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - V_0\psi(x) = E\psi(x)$$

ここで $\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E)}$ とすると

$$\boxed{\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \kappa^2\psi(x) = 0}$$

となる.

この一般解は

$$\boxed{\psi^{(\mathrm{II})}(x) = B_1 \cos\kappa x + B_2 \sin\kappa x}$$

である.

(注: κ の式のルートの中は常に正.
$V_0 > |E|$ であるから)

[3] 領域 III　($x > a$)

Schrödigen 方程式は

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

$E < 0$ より　$k = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$

よって
$$\boxed{\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - k^2\psi(x) = 0}$$

この一般解は

$$\underline{\psi(x) = C_1 e^{-kx} + C_2 e^{kx}}$$

境界条件　$\psi(\infty) = 0$　より

$C_2 = 0$ でないといけない

これより

$$\boxed{\psi^{(\mathrm{III})}_{(x)} = C_1 e^{-kx}}$$

[波動関数の接続]

[領域 I, II, III の波動関数 $\psi^{(I)}_{(x)}, \psi^{(II)}_{(x)}, \psi^{(III)}_{(x)}$
領域の境界で連続，微分係数も連続]

(1) $x = -a$

$$\begin{cases} \psi^{(I)}(-a) = \psi^{(II)}(-a) \\ \dfrac{d\psi^{(I)}}{dx}(x=-a) = \dfrac{d\psi^{(II)}}{dx}(x=-a) \end{cases}$$

(2) $x = a$

$$\begin{cases} \psi^{(II)}(a) = \psi^{(III)}(a) \\ \dfrac{d\psi^{(II)}}{dx}(x=a) = \dfrac{d\psi^{(III)}}{dx}(x=a) \end{cases}$$

$\Downarrow$ より

$x = -a$

$$\begin{cases} A_2 e^{-ka} = B_1 \cos\kappa a - B_2 \sin\kappa a \\ k A_2 e^{-ka} = \kappa \left[B_1 \sin\kappa a + B_2 \cos\kappa a \right] \end{cases}$$

$x = a$

$$\begin{cases} C_1 e^{-ka} = B_1 \cos\kappa a + B_2 \sin\kappa a \\ -k C_1 e^{-ka} = \kappa \left[-B_1 \sin\kappa a + B_2 \cos\kappa a \right] \end{cases}$$

[整理すると]

$$
\begin{cases}
A_2 e^{-ka} = B_1 \cos\kappa a - B_2 \sin\kappa a & \cdots ① \\
\dfrac{k}{\kappa} A_2 e^{-ka} = B_1 \sin\kappa a + B_2 \cos\kappa a & \cdots ② \\
C_1 e^{-ka} = B_1 \cos\kappa a + B_2 \sin\kappa a & \cdots ③ \\
-\dfrac{k}{\kappa} C_1 e^{-ka} = -B_1 \sin\kappa a + B_2 \cos\kappa a & \cdots ④
\end{cases}
$$

ここで
$$
\begin{cases}
①+③\text{式} : & e^{-ka}(A_2+C_1) = 2B_1 \cos\kappa a \\
②-④\text{式} : & \dfrac{k}{\kappa} e^{-ka}(A_2+C_1) = 2B_1 \sin\kappa a
\end{cases}
$$

これより
$$
\underline{e^{ka}\, 2B_1 \cos\kappa a = \frac{\kappa}{k} e^{ka}\, 2B_1 \sin\kappa a}
$$
が求まる.

よって

(i) $B_1 \neq 0$ の時 :
$$
\boxed{\kappa \tan\kappa a = k}
$$

(ii) $B_1 = 0$ の時 ①÷②式より
$$
\boxed{\frac{\kappa}{k} = -\tan\kappa a}
$$

[何がわかったか？]

$$\boxed{\begin{array}{ll} \text{対称解}: & \kappa \tan \kappa a = k \\ \text{反対称解}: & \kappa \cot \kappa a = -k \end{array}}$$

但し
$$\begin{cases} \kappa = \sqrt{\dfrac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E)} \\ k = \sqrt{-\dfrac{2mE}{\hbar^2}} \end{cases}$$

- V_0 は与えられている量

よって上式を解くと

エネルギー固有値 E が求まる

[E の求め方]

解析的には解けない！

・対称解の時：

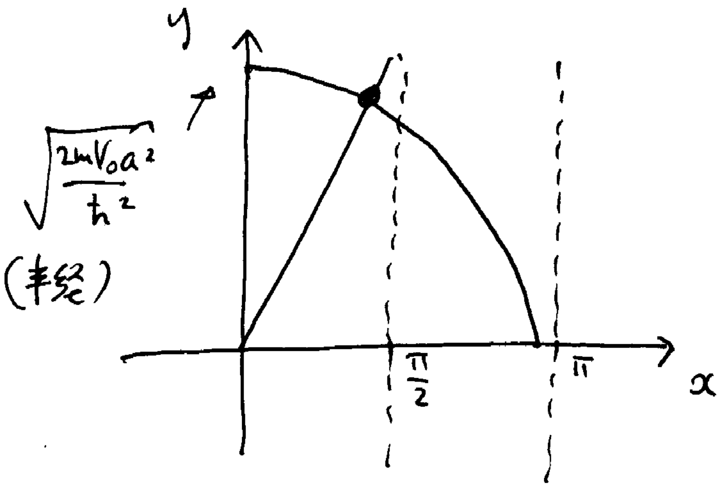
$$\kappa a \tan \kappa a = ka$$

ここで $x = \kappa a$, $y = ka$ とおくと

$$\boxed{x^2 + y^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}}$$

また

$$\boxed{y = x \tan x}$$



この交点から E が求められる

(数値計算により)

[波動関数]

波動関数は

$$\begin{cases} x<-a & \psi^{(\mathrm{I})}(x) = A_2 e^{kx} \\ -a<x<a & \psi^{(\mathrm{II})}(x) = B_1 \cos \kappa x + B_2 \sin \kappa x \\ x>a & \psi^{(\mathrm{III})}(x) = C_1 e^{-kx} \end{cases}$$

係数 A_2, B_1, B_2, C_1 は

エネルギー固有値 E が決まると

①-④式に代入して決められる

但し $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$

すなわち

$$\int_{-\infty}^{-a} A_2^2 e^{2kx} dx + \int_{-a}^{a} (B_1 \cos \kappa x + B_2 \sin \kappa x)^2 dx + \int_{a}^{\infty} C_1^2 e^{-2kx} dx = 1$$

を用いる