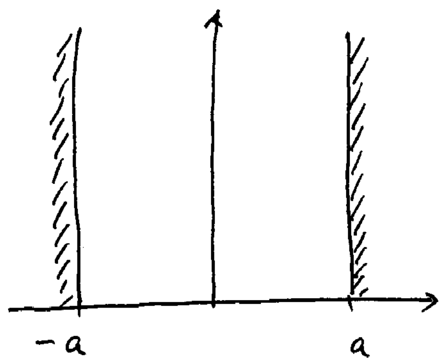
3-2 無限に高い壁のポテンシャル

ポテンシャル $V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < a \\ \infty & |x| > a \end{cases}$

に束縛されている粒子のエネルギースペクトルを求める。



・境界条件 : $\psi(\pm a) = 0$ とする。

（高い壁のところには粒子は存在できない）

◎ Schrödinger 方程式

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

$$\left.\begin{array}{l} \psi(\pm a) = 0 \\ \int_{-a}^{a} |\psi(x)|^2 dx = 1 \end{array}\right\}$$ の条件で解く

- x の範囲は　$-a < x < a$

$V(x) = 0$　だから

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

今の場合　$\boxed{E \geq 0}$

$\updownarrow$

(ポテンシャルの形で決まる
ポテンシャルの最低値が $\boxed{\text{ゼロ}}$ だから)

- $\boxed{k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}}$　とすると

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

この一般解は

$$\boxed{\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx}$$

• 境界条件：　$\psi(\pm a) = 0$

$$\downarrow$$

$$\begin{cases} A\sin ka + B\cos ka = 0 \\ -A\sin ka + B\cos ka = 0 \end{cases}$$

よって　$\underline{A = 0 \text{ か } B = 0}$

(a)　$A = 0$ の時：

$$\therefore \quad \boxed{\cos ka = 0}$$

よって　$ka = \frac{\pi}{2} + n\pi = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi$

(但し $n = 0, \pm 1, \cdots$)

$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ だから

$$\boxed{E = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \pi^2} \quad (n = 0, \pm 1, \cdots)$$

• $\psi(x)$ は

$$\psi(x) = B\cos kx$$

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

$$B^2 \int_{-a}^{a} \cos^2 kx \, dx = B^2 \left[a + \frac{1}{2}\frac{1}{2k} \left(\sin 2kx \right)_{-a}^{a} \right]$$

ここで　$2ka = (2n+1)\pi$　に注意すると

$$\sin 2ka = 0$$

よって

$$\boxed{\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos kx} \quad \left(k = \frac{(2n+1)\pi}{2a}, \ n = 0, \pm 1, \cdots \right)$$

(b)　$B = 0$　の時：　$\boxed{\sin ka = 0}$

よって　$ka = n\pi$　, $n = \pm 1, \pm 2, \cdots$

この時，エネルギー E は

$$\boxed{E = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(n\pi)^2}{a^2}}$$

となる

波動関数 $\psi(x)$ は　$\boxed{\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin kx}$

$\left(k = \frac{n\pi}{a}, \ n = \pm 1, \cdots \right)$

(注)　$\begin{pmatrix} E \\ k \end{pmatrix} \rightarrow E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(n\pi)^2}{a^2}$, $k_n = \frac{n\pi}{a}$　と書くことが多い

この時　$\psi(x) \longrightarrow \psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin k_n x$　と书く.