No.

Date

3-3 δ-関数ポテンシャル

[δ-関数の定義]

$$
\begin{cases}
1. & \delta(x) = \begin{cases} 0 & x \neq 0 \\ \infty & x = 0 \end{cases} \\
2. & \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a) f(x)\, dx = f(a) \\
3. & \delta(x) = \delta(-x)
\end{cases}
$$

- δ-関数ポテンシャル

$$V(x) = -V_0\, \delta(x) \qquad (V_0 > 0)$$

このポテンシャルは1ケの束縛状態をもつ

Schrödinger 方程式

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

$$
\begin{cases}
\cdot\ \text{境界条件} : & \psi(\pm\infty) = 0 \\
\cdot\ \text{束縛状態} : & E < 0
\end{cases}
$$

の条件下で解く

【解法】

［領域に分けて微分方程式を解き
波動関数を $x=0$ で接続する］

（注意）波動関数の微分は
$x=0$ で不連続!!

(i) $x<0$

Schrödinger 方程式は

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

$$k \equiv \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$$ と定義して

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

この一般解は

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

$x \to -\infty$ で $\psi(-\infty)=0$ の条件より

$$\boxed{A_2 = 0}$$

よって $x<0$ では

$$\boxed{\psi(x) = A_1 e^{kx}} \quad (x<0)$$

(ii) $x>0$

同様にしてSchrödinger方程式が解ける

$$\boxed{\psi(x) = B_1 e^{-kx}} \qquad (x>0)$$

・波動関数の接続：

(1) $\psi(x)$ は $x=0$ で連続

$$\therefore \boxed{A_1 = B_1}$$

(2) $\frac{d\psi}{dx}$ は $x=0$ で不連続

($\frac{d\psi}{dx}$ にみたす条件は
Schrödinger方程式に戻ってみる)

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

この式を $-\varepsilon < x < \varepsilon$ の区間で積分

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - V_0\delta(x)\psi(x)\right] = E\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\psi(x)\,dx$$

最後に $\varepsilon\to 0$ とする

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

- ここで 第1項は

(1) $$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx}dx = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d\psi}{dx}\right]_{-\varepsilon}^{\varepsilon}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{x=\varepsilon} - \left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{x=-\varepsilon}\right]$$

- 第2項は

(2) $$-\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} V_0\delta(x)\psi(x)\,dx = -V_0\psi(0)$$

- 第3項 $\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\psi(x)\,dx$ の評価：

$$\left|\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\psi(x)\,dx\right| \leq \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}|\psi(x)|\,dx$$

$$\leq \max[\psi(x)]\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}dx = 2\varepsilon\max[\psi(x)] \to 0$$

$(\varepsilon\to 0)$

よって

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\psi(x)\,dx = 0$$

【第1問】 微分係数を具体的に入れる

$$
\left.\begin{aligned}
x<0 \quad & \psi(x) = A_1 e^{kx} \\
x>0 \quad & \psi(x) = B_1 e^{-kx}
\end{aligned}\right\}
$$
であった.

よって
$$
\begin{cases}
\left(\dfrac{d\psi}{dx}\right)_{x=\varepsilon} = -kB_1 e^{-k\varepsilon} = -kB_1 & (\varepsilon \to 0) \\[2ex]
\left(\dfrac{d\psi}{dx}\right)_{x=-\varepsilon} = kA_1 e^{k\varepsilon} = kA_1 & (\varepsilon \to 0)
\end{cases}
$$

これらより

$$
\boxed{\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m}\left(-kB_1 - kA_1\right) - V_0 A_1 = 0 \\
& B_1 = A_1
\end{aligned}}
$$
が求まる

よって
$$
\boxed{\frac{\hbar^2}{m} k = V_0} \qquad (B_1 \neq 0 \text{ より})
$$

すなわち
$$
\boxed{E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{m V_0{}^2}{2\hbar^2}}
$$
と求まる

波動関数は

$$
\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad \text{より 決まる}
$$

【井戸型ポテンシャルの解の極限】 67

井戸型ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} -U_0 & |x| < a \\ 0 & |x| > a \end{cases}$$ であって、

- 一番低いエネルギーは 対称解によって与えられる

$$\boxed{\tan \kappa a = \frac{k}{\kappa}}$$ であって

$$\begin{cases} \kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 + E)} \\ k = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \end{cases}$$

- V_0 と U_0 の対応関係

$$\boxed{U_0 = \frac{V_0}{2a}}$$ と予測する

↑

$$\int_{-a}^{a} -U_0 \, dx \Leftrightarrow \int_{-a}^{a} -V_0 \, \delta(x) \, dx$$ とすると

$$\underline{2a U_0 = V_0}$$

従って

$$\tan a\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{V_0}{2a}+E\right)} = \sqrt{\frac{-\dfrac{2mE}{\hbar^2}}{\dfrac{2m}{\hbar^2}\left(\dfrac{V_0}{2a}+E\right)}}$$

この時，　$a \to 0$ の極限をとる

$$\tan\sqrt{a}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{V_0}{2}+\underbrace{aE}_{\to 0}\right)} = \sqrt{\frac{-Ea}{\dfrac{V_0}{2}+\underbrace{aE}_{\to 0}}}$$

（E は有限だから）

$$\therefore \quad \tan\sqrt{a}\sqrt{\frac{mV_0}{\hbar^2}} \approx \sqrt{-\frac{2aE}{V_0}} \qquad (a \to 0)$$

このとき　$\tan x \approx x \quad (x \to 0)$　であるから

$$\sqrt{a}\sqrt{\frac{mV_0}{\hbar^2}} \approx \sqrt{-\frac{2Ea}{V_0}}$$

これより　$$\boxed{E \cong -\frac{mV_0^{\,2}}{2\hbar^2}}$$

これは δ-関数ポテンシャルの束縛エネルギーそのもの!!