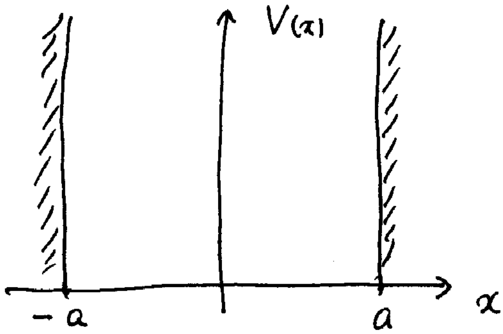
3-2 無限に高い壁のポテンシャル

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

この $V(x)$ に束縛されている粒子のエネルギー固有値を求める。



- 境界条件 ： $\boxed{\psi(\pm a)=0}$

（壁の中に粒子は存在しない）

- Schrödinger 方程式

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

この固有値方程式を

$$\psi(\pm a)=0 \quad , \quad \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$

の条件で解く

[x の範囲]　$\underbrace{-a < x < a}$

↓ この時　$V(x) = 0$

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

β の場合　$\boxed{E \geq 0}$

（注：エネルギーの基準点はポテンシャルの形で決まる）

• $k = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$ とすると

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

この一般解は

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

と書ける

・境界条件 ： $\psi(\pm a)=0$ より

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

よって $\underline{A=0 \text{ or } B=0}$

(a) $A=0$ の時 : $B\neq 0$

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

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

(但し, $n=0,\pm1,\pm2,\cdots$)

$k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ より

$$\boxed{E = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(n+\frac{1}{2}\right)^2\pi^2} \quad (n=0,\pm1,\cdots)$$

となる

この時 $\psi(x)$ は

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

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

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

一方　$ka = (2n+1)\pi$　であるから

$\underline{\sin 2ka = 0}$

これより

$$\boxed{\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos kx}$$

$$\boxed{k = \frac{2n+1}{2a}\pi}, \quad (n = 0, \pm 1, \cdots)$$

となる.

(b)　$B = 0$ の時：　$A \neq 0$

$$\boxed{\sin ka = 0}$$

よって　$ka = n\pi$,　$n = \cancel{0}, \pm 1, \cdots$

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

また　$\boxed{\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin kx}$

$\left(k = \frac{n\pi}{a}, \quad n = \cancel{0} \pm 1, \pm 2, \cdots \right)$

(注1)　$k=0$ はこの場合除く

$\underline{\underline{\psi(x)=0}}$ となり無意味な状態となる

(注2)　$k=\frac{n\pi}{a}$ をしばしば

$\underline{k_n=\frac{n\pi}{a}}$ とかく

この n のそえ字は量子数を示している

同様に　$$\underline{E_n=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{(n\pi)^2}{a^2}}$$

$$\underline{\psi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\sin k_n x}$$

と書くことが多い