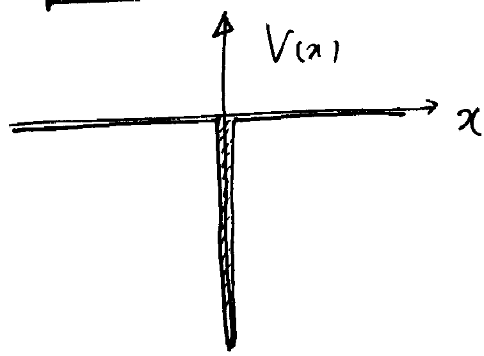
3-3 δ-関数ポテンシャル

δ-関数の定義

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

[δ-関数ポテンシャル]

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



このポテンシャルには1つの束縛状態が存在する。

Schrodinger 方程式

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

- 境界条件 : $\boxed{\psi(\pm\infty) = 0}$
- 束縛状態 : $\boxed{E < 0}$
- 規格化条件 : $\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 = 1}$

の条件下で解く.

【解法】

- xの領域を $x<0$, $x>0$ に分ける.
- 波動関数を $x=0$ で接続する
- 波動関数の微分は不連続なので Schrödinger 方程式自体を $\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx$ という積分を行ない 最後に $\varepsilon \to 0$ とする

(i) $x < 0$

Schrödinger 方程式は

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

$k = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$ と定義する (E<0だから)

この時

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

この一般解は

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

である

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

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

が求まる.

【波動関数 $\psi(x)$ の接続】

(1) $\psi(x)$ は $x=0$ で連続

$\therefore \boxed{A_1 = B_1}$

(2) Schrödinger 方程式

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

を $-\varepsilon < x < \varepsilon$ の区間で積分する

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

(最後に $\varepsilon\to 0$ とする)

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

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

ここで $\begin{cases} x<0 & \psi(x) = A_1 e^{kx} \\ x>0 & \psi(x) = B_1 e^{-kx} \end{cases}$ より

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

よって 第1項は

$$\boxed{\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}\,dx = \frac{\hbar^2}{2m}(kB_1 + kA_1)}$$

◎ 第2項：

$$\boxed{-\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} V_0\,\delta(x)\,\psi(x)\,dx = -V_0\,\psi(0) = -V_0 A_1}$$

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

2の3より

$$\frac{\hbar^2}{2m}\cdot 2kA_1 - V_0A_1 = 0$$

$$\therefore \boxed{\frac{\hbar^2}{m}k = V_0}$$

すなわち $\boxed{E = -\frac{\hbar^2k^2}{2m} = -\frac{mV_0^{\,2}}{2\hbar^2}}$

となる

一方 波動関数は

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad \text{より求められる.}$$

$$\int_{-\infty}^{0} |A_1 e^{kx}|^2 dx + \int_{0}^{\infty} |A_1 e^{-kx}|^2 dx = 1$$

$$A_1^2 \cdot \frac{1}{2k} + A_1^2 \cdot \frac{1}{2k} = 1$$

$$\therefore \boxed{A_1 = \sqrt{k}} \qquad \underline{k = \frac{mV_0}{\hbar^2}}$$

よって

$$\begin{cases} E = -\dfrac{mV_0^2}{2\hbar^2} \\[2ex] \psi(x) = \sqrt{\dfrac{mV_0^2}{\hbar^2}}\, e^{-k|x|} \end{cases}$$

$$\left(k = \frac{mV_0}{\hbar^2} \right)$$

【井戸型ポテンシャルの解の極限】

井戸型ポテンシャルは

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

で与えられる

・最低エネルギーは対称解

$$\boxed{\kappa \tan \kappa a = k}$$

により与えられる

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

【V_0とU_0の対応関係】

$$\boxed{U_0 = \frac{V_0}{2a}}$$

と予測する

$$\uparrow \quad \int_{-a}^{a} (-U_0)\, dx \Leftrightarrow \int_{-a}^{a} -V_0\, \delta(x)\, dx$$

$$\therefore \quad 2aU_0 = V_0$$

よって

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

ここで $a\to 0$ の極限をとれば δ−関数ポテンシャルに近くなる

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

(E は有限なので $aE\to 0$ となる!!)

よって $\tan\sqrt{a}\sqrt{\frac{mV_0}{\hbar^2}} \simeq \sqrt{-\frac{2aE}{V_0}}$ $(a\to 0)$

この時 $\tan x \simeq x$ $(x\to 0)$ を用いると

$$\sqrt{a}\sqrt{\frac{mV_0}{\hbar^2}} \simeq \sqrt{-\frac{2aE}{V_0}}$$ よって

$$\boxed{E \simeq -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}}$$

これは δ−関数ポテンシャルの束縛エネルギーである.