<エネルギー固有状態の基本的な例>

(定常状態の) Schrödinger方程式 (V(r), V(x) ポテンシャル)

3次元 (1) $\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r})\right\}\varphi(\mathbf{r}) = E\,\varphi(\mathbf{r})$

1次元 (2) $-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) + V(x)\,\varphi(x) = E\,\varphi(x)$

☞ $\hbar, m, V(\mathbf{r})$ が与えられていて, E と $\varphi(\mathbf{r})$ が未知。

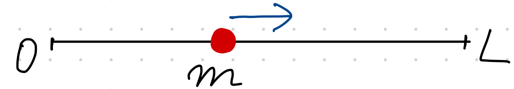
エネルギー固有値 ← E　　$\varphi(\mathbf{r})$ → エネルギー固有状態

☞ 「(定常状態の) Schrödinge方程式を解く」とは (すべての $\mathbf{r}$ で) 方程式と境界条件をみたす E と関数 $\varphi(\mathbf{r})$ をセットで $\boxed{\text{すべて}}$ 求めること

- 「すべての $\mathbf{r}$ で $\varphi(\mathbf{r})=0$」はのぞく!
- $\alpha \neq 0$ として $\varphi(\mathbf{r})$ と $\alpha\,\varphi(\mathbf{r})$ は同じ状態.
- 同じ E に複数の $\varphi(\mathbf{r})$ があるときは線形独立なものを求めればいい

1次元自由粒子 (周期境界条件) p8 を参照

§1次元区間の自由粒子(ゼロ境界条件)



$0 \leq x \leq L$ の区間に閉じこめられて外力をうけずに運動する粒子 $V(x)=0$

- Sch. eq. (1) $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) = E\varphi(x)$ (すべての $0<x<L$ について)
- 境界条件 (2) $\varphi(0)=\varphi(L)=0$ 区間の外へはいけない!
- 規格化条件 (3) $\displaystyle\int_0^L dx\,|\varphi(x)|^2 = 1$
  (なくてもいい)

これから決める定数(一般に複素数)

△まじめに解いてみよう.

- 2回微分すると自分に戻るから (4) $\varphi_1(x) = B e^{\alpha x}$ が候補

(1)に代入 (5) $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 B e^{\alpha x} = E B e^{\alpha x}$ よって (6) $E = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\alpha^2$

(7) $\varphi_2(x) = C e^{-\alpha x}$ も (1)をみたし, (8) $E = -\dfrac{\hbar^2}{2m}(-\alpha)^2$ 同じ!

よって (9) $\varphi(x) = B e^{\alpha x} + C e^{-\alpha x}$ が (1)をみたす

(1) $\varphi(x) = Be^{\alpha x} + Ce^{-\alpha x}$

- 境界条件 (2) $\varphi(0) = \varphi(L) = 0$ (p2-(2)) をとりいれる.

(1)で $\varphi(0)=0$ とすると (3) $B+C=0$ よって(1)は (4) $\varphi(x) = B\{e^{\alpha x} - e^{-\alpha x}\}$

(4)で $\varphi(L)=0$ とすると (4) $B\{e^{\alpha L} - e^{-\alpha L}\} = Be^{-\alpha L}\{e^{2\alpha L} - 1\} = 0$

$B \neq 0$ より (5) $e^{2\alpha L} = 1$ → (6) $2\alpha L = i2\pi n$ $(n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots)$

(7) $\alpha = \frac{in\pi}{L}$ より (8) $\varphi(x) = B\{e^{i\frac{n\pi}{L}x} - e^{-i\frac{n\pi}{L}x}\} = \underbrace{A}_{2iB} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$

もっと気楽な解き方

2回で微分してもとに戻るから (9) $\varphi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$

(10) $\varphi(0) = B$ (2)から (11) $B=0$

(12) $\varphi(L) = A\sin(kL)$ より (2)から (13) $\sin(kL)=0$ (14) $k = \frac{n\pi}{L}$ $(n=0, \pm 1, \cdots)$

よって (15) $\varphi(x) = A\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$ ← (8)と同じ結果

nの範囲

(1) $\varphi(x) = A\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$ $(n=0,\pm1,\pm2,\cdots)$

- $n=0$ とすると すべてのxについて (2) $\varphi(x)=0$ → 状態ではない
- nの正負 (3) $A\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$ と $A\sin\left(\frac{(-n)\pi}{L}x\right) = -A\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$

  は同じ物理的状態を表わす

よってnの範囲は (4) $n=1,2,3,\cdots$ (正の整数)

エネルギー固有値

Sch. eq. (5) $-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) = E\varphi(x)$

(1)を代入すると (6) $\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 A\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) = E\,A\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$

よって (7) $E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2$

規格化

(8) $\int_0^L dx\,|\varphi(x)|^2 = |A|^2\int_0^L dx\left(\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\right)^2 = |A|^2\frac{L}{2} = 1$

よって (9) $|A| = \sqrt{\frac{2}{L}}$ とすればよい　$A>0$ と選べば (10) $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$

まとめ

$n=1,2,\cdots$ に対して

- エネルギー固有状態 (1) $\varphi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin(k_n x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$
- エネルギー固有値 (2) $E_n=\frac{\hbar^2}{2m}(k_n)^2=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2$

実はこれですべて → 量子力学

ただし 波数 (3) $k_n=\frac{n\pi}{L}$

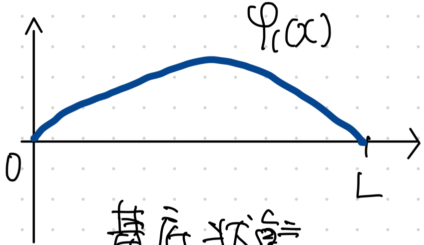
- エネルギー固有値は「とびとび」← 境界条件が重要!
- 一般に 最小のエネルギー固有値を 基底エネルギー → E_{GS} とかくことが多い

対応するエネルギー固有状態を 基底状態 (ground state)

それ以外のエネルギー固有状態は 励起状態 (excited state)

今の場合　基底エネルギー (3) $E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$　基底状態 (4) $\varphi_1(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)$

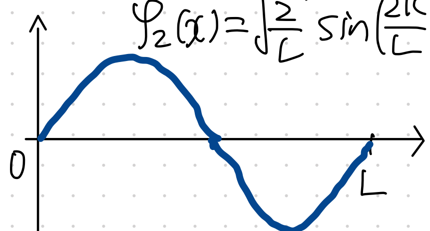
エネルギー固有状態の波動関数



基底状態

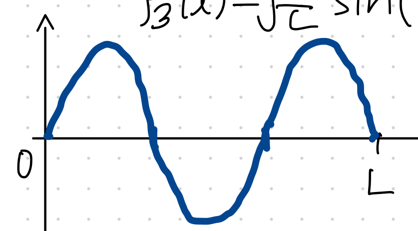
第1励起状態

$\varphi_2(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)$



第2励起状態

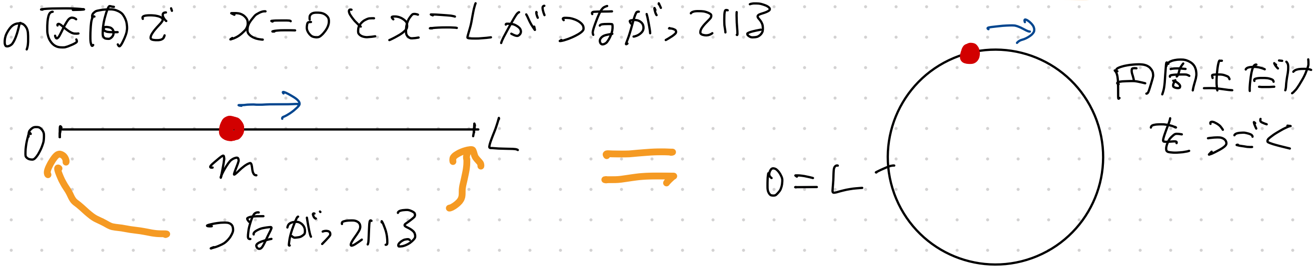
$\varphi_3(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{3\pi}{L}x\right)$



§1次元区間の自由粒子(周期境界条件)

理論のための人工的な境界条件

$0 \leq x \leq L$ の区間で　$x=0$ と $x=L$ がつながっている



- Schrödinger方程式

$$(1)\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) = E\varphi(x) \quad (\text{すべての } 0<x<L \text{ について})$$

- 境界条件　(2)　$\varphi(0)=\varphi(L),\ \varphi'(0)=\varphi'(L)$

この条件も必要

- 規格化条件　(3)　$\int_0^L dx\, |\varphi(x)|^2 = 1$

(なくてもいい)

Schrödinger方程式を解く

(1) $-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) = E\varphi(x)$　(2) $\varphi(0)=\varphi(L),\ \varphi'(0)=\varphi'(L)$

前にαと書いた

2回で微分して元に戻るので (3) $\varphi(x) = Ae^{ikx}$ とおいてみる $(A\neq 0)$

(2)は (4) $A = Ae^{ikL}$, (5) $ikA = ikAe^{ikL}$ となるので (6) $e^{ikL}=1$

よって (7) $kL = 2\pi n$　$(n=0,\pm1,\pm2,\cdots) \rightarrow$ (8) $k = \frac{2\pi n}{L}$

(9) $\varphi(x) = Ae^{i\frac{2\pi n}{L}x}$ は
- (10) $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2}n^2$ として (1)をみたす
- 境界条件(2)もみたす

規格化(かんたん)　(11) $\int_0^L dx\,|\varphi(x)|^2 = |A|^2 L$　よって (12) $A = \frac{1}{\sqrt{L}}$ とすればよい

nの範囲は?
- $n=0$ とすると (13) $\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}$ これもOK!
- $e^{i\frac{2\pi n}{L}x}$ と $e^{-i\frac{2\pi n}{L}x}$ は独立!

$\Rightarrow$ すべての $n=0,\pm1,\pm2,\cdots$ をとる

まとめ

$n=0,\pm1,\pm2,\cdots$ に対して

エネルギー固有状態 (1) $\varphi_n(x)=\sqrt{\frac{1}{L}}e^{ik_nx}=\sqrt{\frac{1}{L}}e^{i\frac{2\pi n}{L}x}$

エネルギー固有値 (2) $E_n=\frac{\hbar^2}{2m}(k_n)^2=\frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2}n^2$

波数 (3) $k_n=\frac{2\pi n}{L}$

これですべてであることは量子2で

$n\neq0$ のエネルギー固有値はすべて 2重縮退している

(固有値 $E_n=E_{-n}$ に対応する2つの独立な固有状態 $\varphi_n(x), \varphi_{-n}(x)$ がある)

$n=1,2,\cdots$ と任意の $\alpha,\beta\in\mathbb{C}$ について

(3) $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\{\alpha\varphi_n(x)+\beta\varphi_{-n}(x)\}=\alpha E_n\varphi_n(x)+\beta \underbrace{E_{-n}}_{=E_n}\varphi_{-n}(x)=E_n\{\alpha\varphi_n(x)+\beta\varphi_{-n}(x)\}$

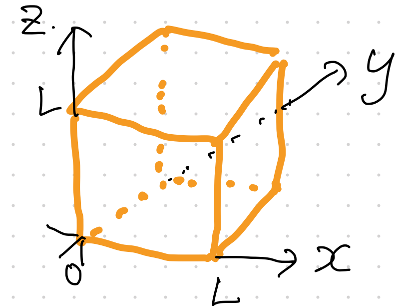
よって $\alpha\varphi_n(x)+\beta\varphi_{-n}(x)$ も エネルギー固有状態 → 無数の固有状態!

- 独立な2つを指定すれば、他は線形結合で書ける。
  - $\varphi_n(x)$ と $\varphi_{-n}(x)$
  - $\sqrt{\frac{2}{L}}\cos(k_nx)$ と $\sqrt{\frac{2}{L}}\sin(k_nx)$

2つのとり方は無数にある。

$\alpha=\beta=\frac{1}{\sqrt{2}}$　　$\alpha=-\beta=\frac{1}{i\sqrt{2}}$

§3次元の箱の中の自由粒子（ゼロ境界条件）



L×L×Lの箱の内部に閉じこめられた粒子（外力なし）

位置 (1) $\boldsymbol{r}=(x,y,z)$ (2) $0\leqq x\leqq L,\ 0\leqq y\leqq L,\ 0\leqq z\leqq L$

- Schrödinger方程式 (3) $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\boldsymbol{r})=E\varphi(\boldsymbol{r})$
- 境界条件 壁の上では (4) $\varphi(\boldsymbol{r})=0$

（任意の x,y,z について (5) $\varphi(0,y,z)=\varphi(L,y,z)=\varphi(x,0,z)=\varphi(x,L,z)$
$=\varphi(x,y,0)=\varphi(x,y,L)=0$）

(6) $\varphi(x,y,z)=f(x)g(y)h(z)$ と変数ごとに分離した解をさがそう

(3)は (7) $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\{f''(x)g(y)h(z)+f(x)g''(y)h(z)+f(x)g(y)h''(z)\}=Ef(x)g(y)h(z)$

両辺を $f(x)g(y)h(z)$ でわると

(8) $$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{f''(x)}{f(x)}+\frac{g''(y)}{g(y)}+\frac{h''(z)}{h(z)}\right\}=E$$

(1) $\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{f''(x)}{f(x)}}_{①}\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{g''(y)}{g(y)}}_{②}\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{h''(z)}{h(z)}}_{③}=E$

- (1)が任意の x, y, z について成立するには、①,②,③がそれぞれ定数

よって (2) $-\frac{\hbar^2}{2m}f''(x)=E_x f(x)$, $-\frac{\hbar^2}{2m}g''(y)=E_y g(y)$, $-\frac{\hbar^2}{2m}h''(z)=E_z h(z)$

E_x, E_y, E_z はこれからきめる定数(固有値)　　(3) $E=E_x+E_y+E_z$

ベクトルの成分ではない!!

- 境界条件は　(4) $f(0)=f(L)=g(0)=g(L)=h(0)=h(L)=0$

ゼロ境界の1次元区间の問題が3つ。だから

(5) $f(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n_x\pi}{L}x\right)$, $g(y)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n_y\pi}{L}y\right)$, $h(z)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n_z\pi}{L}z\right)$

ここで (6) $n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \cdots$

これら3つは独立

エネルギー固有状態 (1) $\varphi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z)=\left(\frac{2}{L}\right)^{3/2}\sin\left(\frac{n_x\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{n_y\pi}{L}y\right)\sin\left(\frac{n_z\pi}{L}z\right)$

エネルギー固有値 (2) $E_{n_x,n_y,n_z}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\{n_x^2+n_y^2+n_z^2\}$

(3) $n_x,n_y,n_z=1,2,3,\cdots$

$\boxed{\text{固有状態が3つの正整数の組}(n_x,n_y,n_z)\text{で指定される}}$

- 基底状態　E_{n_x,n_y,n_z}を最小にする → (4) $(n_x,n_y,n_z)=(1,1,1)$

基底エネルギー (5) $E_{GS}=E_{1,1,1}=\frac{3\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$

- 第1励起状態　$E_{1,1,1}$の次にE_{n_x,n_y,n_z}が小さい →

(6) $(n_x,n_y,n_z)=(2,1,1),(1,2,1),(1,1,2)$ ← 3重縮退しとる.

第1励起エネルギー (7) $E_{1st}=\frac{6\pi^2\hbar^2}{2mL^2}=\frac{3\pi^2\hbar^2}{mL^2}$

§エネルギー固有状態と固有値についての一般的な事実

3次元でも同様の結果はあるが，ここでは(簡単のため) 1次元に限定

▷ エネルギー固有値について

$V(x)$ 任意の(もちろん実数値をとる) ポテンシャル　$V_{min}=V(x)$の最小値

Sch. eq. (1) $-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x)+V(x)\varphi(x)=E\varphi(x)$

xの範囲と境界条件 $\begin{cases} \cdot\ x\in\mathbb{R},\ |x|\uparrow\infty \text{ で } \varphi(x)\to 0 \\ \cdot\ x\in[a,b],\ \varphi(a)=\varphi(b)=0 \\ \cdot\ x\in[a,b],\ \varphi(a)=\varphi(b),\ \varphi'(a)=\varphi'(b) \end{cases}$

$\boxed{\text{一般に } E \text{ は実数で } E\geqq V_{min} \text{ を満たす}}$

証明　(1)の両辺に$\varphi^*(x)$をかけて xの全範囲で積分　(2) $\int dx|\varphi(x)|^2=1$ とする.

(3) $\int dx\,\varphi^*(x)\varphi''(x)=\underbrace{[\varphi^*(x)\varphi'(x)]_a^b}_{=0}-\int dx|\varphi'(x)|^2$

(4) $E=\underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}\int dx|\varphi'(x)|^2+\int dx\,V(x)|\varphi(x)|^2}_{\text{これは実数}}\geqq\int dx\,V(x)|\varphi(x)|^2\geqq V_{min}\int dx|\varphi(x)|^2$

$=V_{min}$

☒ 対称なポテンシャル

$V(x)$ 任意の対称なポテンシャル (1) $V(x)=V(-x)$ 偶関数

Sch. eq. (2) $-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x)+V(x)\varphi(x)=E\varphi(x)$

xの範囲と境界条件
- $x\in\mathbb{R}$, $|x|\uparrow\infty$で $\varphi(x)\to 0$
- $x\in[-a,a]$, $\varphi(-a)=\varphi(a)=0$
- $x\in[-a,a]$, $\varphi(-a)=\varphi(a)$, $\varphi'(-a)=\varphi'(a)$

エネルギー固有状態 $\varphi(x)$ は かならず 対称か反対称のいずれかになるようにとることができる。

対称 $\varphi(x)=\varphi(-x)$ 偶関数　　反対称 $\varphi(x)=-\varphi(-x)$ 奇関数

- 対称なエネルギー固有状態だけをすべて求める
- 反対称なエネルギー固有状態だけをすべて求める

→ すべてのエネルギー固有状態が求められる!

証明　$\eta(x)$がエネルギーEの固有状態とする

$$\frac{d^2}{dy^2}\eta(y)\Big|_{y=-x}$$

(1) $-\frac{\hbar^2}{2m}\eta''(x)+V(x)\eta(x)=E\eta(x)$

(2) $\zeta(x)=\eta(-x)$ とする　(3) $\zeta''(x)=\frac{d^2}{dx^2}\eta(-x)=\eta''(-x)$

(1)で $x\to -x$ として

$V(x)$

(4) $-\frac{\hbar^2}{2m}\eta''(-x)+V(-x)\eta(-x)=E\eta(-x)$

よって (5) $-\frac{\hbar^2}{2m}\zeta''(x)+V(x)\zeta(x)=E\zeta(x)$

$\zeta(x)$もエネルギーEの固有状態

(6) $\varphi_{対}(x)=\eta(x)+\zeta(x)$, $\varphi_{反}(x)=\eta(x)-\zeta(x)$ とおく.

これらのうち少くとも一方はゼロではない

(7) $\varphi_{対}(-x)=\eta(-x)+\zeta(-x)=\varphi_{対}(x)$, $\varphi_{反}(-x)=-\varphi_{反}(-x)$

線形性から

(8) $-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi_{対}''(x)+V(x)\varphi_{対}(x)=E\varphi_{対}(x)$

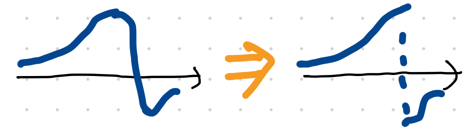
(9) $-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi_{反}''(x)+V(x)\varphi_{反}(x)=E\varphi_{反}(x)$

$\varphi_{対}(x)$も$\varphi_{反}(x)$も
(ゼロでなければ)
エネルギーEの固有状態

Ⅲ 不連続な点を含むポテンシャルエネルギーの扱い

(1) $-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x)+V(x)\varphi(x)=E\varphi(x)$　境界条件はこれまでのどれもOK

$V(x)$が有限個のxの値で不連続に変化する場合も $\varphi(x)$, $\varphi'(x)$は連続



- これは固有状態の定ぎ
- 以下のように考えると なっとくできるだろう

$V(x)$は連続, $|V(x)|\leq V_0$とする　(1) → (2) $\varphi''(x)=\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)\varphi(x)$

任意のaと$\varepsilon>0$について

(3) $\varphi'(a+\varepsilon)-\varphi'(a-\varepsilon)=\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}dx\,\varphi''(x)=\frac{2m}{\hbar^2}\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}dx\,(V(x)-E)\varphi(x)$

よって (4) $|\varphi'(a+\varepsilon)-\varphi'(a-\varepsilon)|\leq\frac{2m}{\hbar^2}\sqrt{\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}dx\,(V(x)-E)^2\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}dx\,|\varphi(x)|^2}$　≤ 1

$\leq\frac{2m}{\hbar^2}(|V_0|+|E|)\sqrt{2\varepsilon}$

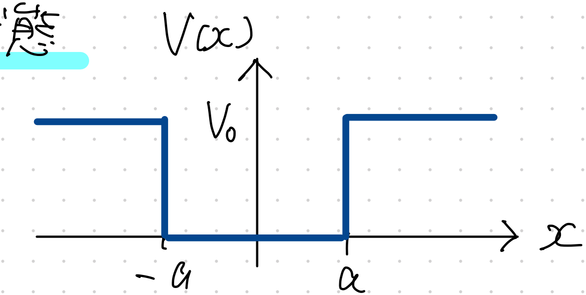
$|V(x)|\leq V_0$を保ったまま$V(x)$を変形して不連続にする極限をとっても

(5) $|\varphi'(a+\varepsilon)-\varphi'(a-\varepsilon)|\leq(\text{定数})\sqrt{2\varepsilon}$ は成立　$\varphi'(x)$はaで連続

(※はSchwarz不等式 $\left|\int dx\,f(x)\,g(x)\right|^2\leq\int dx\,|f(x)|^2\int dx\,|g(x)|^2$)

§ 井戸型ポテンシャル中の粒子のエネルギー固有状態

(1) $V(x) = \begin{cases} 0 & |x| \leq a \text{ のとき} \\ V_0 & |x| > a \text{ のとき} \end{cases}$



$V_0 > 0$, $a > 0$ は定数

- Sch. eq. (2) $-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x)$ (すべての x について)
- 境界条件　$|x| \uparrow \infty$ で $\varphi(x) \to 0$ ← 井戸につかまえられた束縛状態

これらを満たす E と関数 $\varphi(x)$ をセットで求める

▷ 各領域での解

(1)を代入し

(3) $-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) = E\varphi(x)$　　$|x| \leq a$

(4) $-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) + V_0\varphi(x) = E\varphi(x)$　　$|x| > a$

- $|x| \uparrow \infty$ で $\varphi(x) \to 0$, $\varphi(x)$ と $\varphi'(x)$ は連続

これらを満たす E と関数 $\varphi(x)$ をセットで求める

一般論より $E \geq 0$　　$E = 0$ の解は無いので, $E > 0$

17

- $|x| \leq a$

(1) $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) = E\varphi(x) \rightarrow$ (2) $\varphi''(x) = -\boxed{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}\varphi(x)$

$\boxed{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$ 正 $= k^2$ $(k>0)$ kは未知

(3) $\varphi''(x) = -k^2\varphi(x)$

一般解 (4) $\varphi(x) = A\cos kx + B\sin kx$

- $|x| > a$

(5) $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) + V_0\varphi(x) = E\varphi(x) \rightarrow$ (6) $\varphi''(x) = \boxed{\dfrac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}\varphi(x)$

$\boxed{\dfrac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$ 正 $= \theta^2$ $(\theta>0)$

どうでないとφ(x)は振動

(7) $\varphi''(x) = \theta^2\varphi(x)$

(8) $\varphi(x) = Ce^{-\theta x} + De^{\theta x}$

$|x| \uparrow \infty$で $\varphi(x) \to 0$ より

(9) $\varphi(x) = Ce^{-\theta x}$ $\quad x > a$

(10) $\varphi(x) = De^{\theta x}$ $\quad x < -a$

- kとθの関係

(11) $\theta^2 = \dfrac{2m(V_0-E)}{\hbar^2} = \underbrace{\boxed{\dfrac{2mV_0}{\hbar^2}}}_{=\,\mathcal{V}_0\text{とおく}} - \underbrace{\boxed{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}}_{=\,k^2} = \mathcal{V}_0 - k^2$

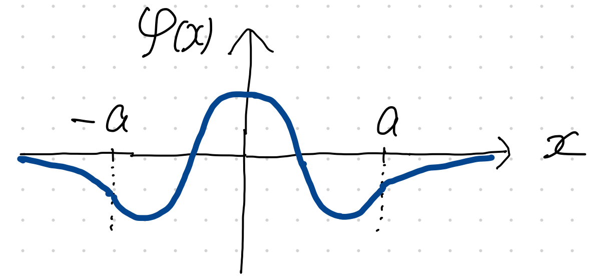
よって (12) $\theta = \sqrt{\mathcal{V}_0 - k^2}$

▷ 対称なエネルギー固有状態　(1) $\varphi(x)=\varphi(-x)$　レポート

$V(x)=V(-x)$ なので p13の結果から，エネルギー固有状態を対称，反対称に分けて求める．

(2) $\varphi(x)=\begin{cases}\cos kx & |x|\leq a\\ Ce^{-\theta x} & x\geq a\\ Ce^{\theta x} & x\leq -a\end{cases}$

規格化して いない



k と C が未知 ← 連続性から決める

$\varphi(x)$ と $\varphi'(x)$ が $x=a$ で連続　$\dfrac{\varphi'(x)}{\varphi(x)}$ も連続

$x=a$ での連続性の条件 → $x=-a$ からも同じ条件がでる．

(3) $\dfrac{-k\sin ka}{\cos ka}=-\theta$　(4) $\tan ka=\dfrac{\theta}{k}$

$\varphi(x)=Ce^{-\theta x},\ \varphi'(x)=-\theta Ce^{-\theta x}$

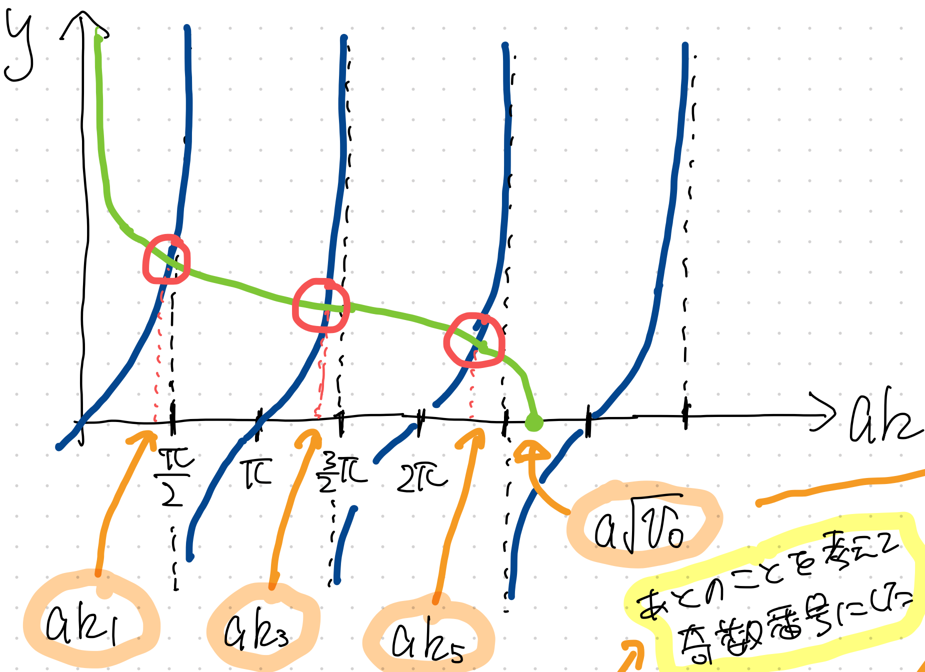
$\varphi(x)=\cos kx,\ \varphi'(x)=-k\sin kx$

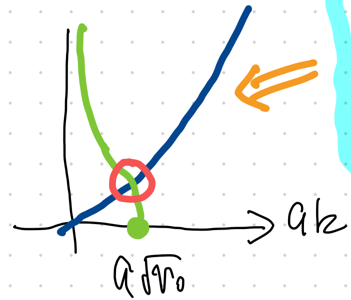
(5) $\theta=\sqrt{v_0-k^2}$ だったので　(6) $\boxed{\tan ka=\sqrt{\dfrac{v_0}{k^2}-1}}$

k を決める条件

a, v_0 は与えられた定数

(1) $\boxed{\tan ka = \sqrt{\frac{V_0}{k^2}-1}}$ → $y=\tan ka$ と $y=\sqrt{\frac{V_0}{k^2}-1}$ のグラフの交点が解!





V_0がどんなに小さくても少くともひとつのエネルギー固有状態がある!!

V_0が大きくなればエネルギー固有状態の数が増える

あとのことを考えて奇数番号にした

エネルギー固有値はもちろん

(3) $E_j = \frac{\hbar^2}{2m}(k_j)^2$

V_0の値に応じていくつかの解 $k_1, k_3, k_5, \cdots, k_N$

(2) $0 < k_1 < \frac{\pi}{2a}$, $\frac{2\pi}{2a} < k_3 < \frac{3\pi}{2a}$, $\frac{4\pi}{2a} < k_5 < \frac{5\pi}{2a}$, $\cdots$

▷ $V_0 \uparrow \infty$ の極限

(1) $\tan ka = \sqrt{\frac{V_0}{k^2} - 1}$ で $V_0 \uparrow \infty$ とすれば (2) $\tan ka = \infty$ → (3) $\cos ka = 0$

よって (4) $k = \frac{\pi n}{2a}$ $(n = 1, 3, 5, \cdots)$ (5) $E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} n^2$

区間 $[-a, a]$ でゼロ境界の自由粒子と同じ! ただし n は奇数のみ

→ 偶数はどこ??

▷ 有限の V_0 の場合との比較

$V_0 \uparrow \infty$ (6) $k_1 = \frac{\pi}{2a}$, $k_3 = \frac{3\pi}{2a}$, $k_5 = \frac{5\pi}{2a}$, $\cdots$

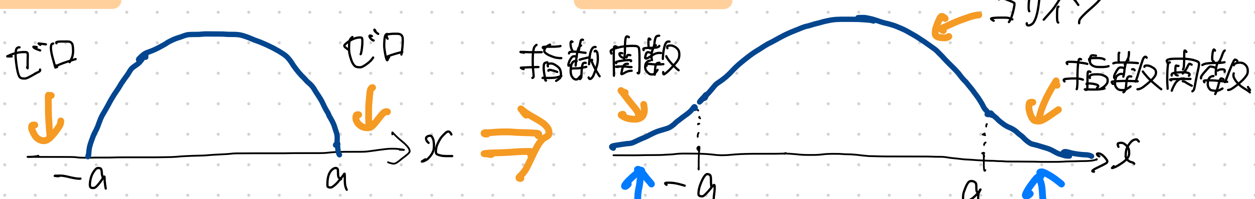
V_0 有限 (7) $0 < k_1 < \frac{\pi}{2a}$, $\frac{2\pi}{2a} < k_3 < \frac{3\pi}{2a}$, $\frac{4\pi}{2a} < k_5 < \frac{5\pi}{2a}$, $\cdots$

V_0 が有限になると k_j は小さくなる

→ 波長がのびる

→ エネルギーが下がる!!

$V_0 = \infty$ ⇒ V_0 有限



古典力学では許されない領域にしみ出て、エネルギーを下げている。

§ デルタ関数ポテンシャル

▷ デルタ関数

$\delta(x)$ は超関数（普通の関数ではない）

定ギ　任意の連続関数 $f(x)$ について　(1) $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} dx\, f(x)\,\delta(x) = f(0)$

よって (2) $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \delta(x) = 1$　　(3) $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} dx\, f(x)\,\delta(x-a) = f(a)$

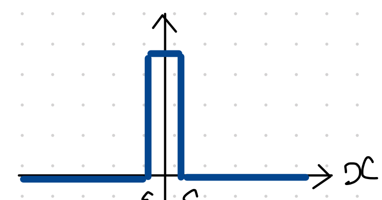
（(4) $\displaystyle\sum_i f_i \delta_{ij} = f_j$ に対応！）

▷ デルタ関数のつくり方

$\varepsilon > 0$，普通の関数 $\delta_\varepsilon(x)$

(5) $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \delta_\varepsilon(x) = 1$，　$|x| > \varepsilon$ なら $\delta_\varepsilon(x) = 0$

例 $\delta_\varepsilon(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{2\varepsilon} & |x| \leq \varepsilon \\ 0 & |x| > \varepsilon \end{cases}$



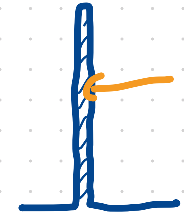
このとき (6) $\displaystyle\lim_{\varepsilon \to 0} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, f(x)\,\delta_\varepsilon(x) = f(0)$

ただし $\displaystyle\lim_{\varepsilon \to 0} \delta_\varepsilon(x)$ という関数は定ギできない

物理的には ほぼ1点に何かが集中している状況を理想化して表現する.

▷ デルタ関数ポテンシャルについてのSchrödinger方程式

(1) $$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x)+\underbrace{\boxed{v_0\delta(x)}}_{=V(x)}\varphi(x)=E\varphi(x)$$



面積 v_0

ものすごく細くて高い
ポテンシャルの理想化

デルタ関数ポテンシャルの効果は $x=0$ での接続条件として表現できる.

- $\varphi(x)$ は $x=0$ でも連続
- $\varphi'(x)$ は (2) $\varphi'(+0)-\varphi'(-0)=\frac{2mv_0}{\hbar^2}\varphi(0)$ をみたす.

一般には不連続

導出 ポテンシャル $V(x)=v_0\delta_\varepsilon(x)$ についての解を考える. $\varepsilon>0$

(3) $$\varphi_\varepsilon''(x)=\frac{2m}{\hbar^2}\left\{v_0\delta_\varepsilon(x)\varphi_\varepsilon(x)-E_\varepsilon\varphi_\varepsilon(x)\right\}$$

$a>\varepsilon$ をとり

(4) $$\varphi_\varepsilon'(a)-\varphi_\varepsilon'(-a)=\int_{-a}^{a}dx\,\varphi_\varepsilon''(x)=\frac{2mv_0}{\hbar^2}\int_{-a}^{a}dx\,\delta_\varepsilon(x)\varphi_\varepsilon(x)-\frac{2mE_\varepsilon}{\hbar^2}\int_{-a}^{a}dx\,\varphi_\varepsilon(x)$$

$\varepsilon\to0$ とすると (5) $$\varphi'(a)-\varphi'(-a)=\frac{2mv_0}{\hbar^2}\varphi(0)+O(a)$$

$a\to0$ とすると (2)

▷ 例 引力ポテンシャル $V_0<0$

(1) $-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x)+V_0\delta(x)\varphi(x)=E\varphi(x) \quad x\in\mathbb{R}$

・ $|x|\uparrow\infty$ で $\varphi(x)\to 0$

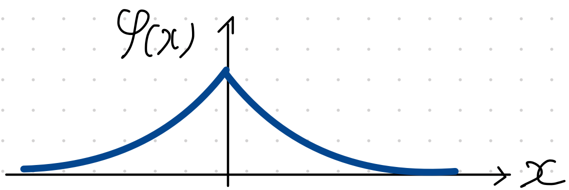
$x\neq 0$ では (2) $\varphi''(x)=\boxed{-\frac{2mE}{\hbar^2}}\varphi(x)$ $=\theta^2 \quad (\theta>0)$

$\varphi(x)$ は $x=0$ で連続だから (3) $\varphi(x)=\begin{cases} Ae^{-\theta x} & x\geq 0 \\ Ae^{\theta x} & x\leq 0 \end{cases}$

接続条件 (4) $\varphi'(+0)-\varphi'(-0)=\frac{2mV_0}{\hbar^2}\varphi(0)$ より

(5) $-\theta A-\theta A=\frac{2mV_0}{\hbar^2}A$ (6) $\theta=-\frac{2mV_0}{\hbar^2}>0$ 解はひとつだけ!

(7) $E=-\frac{\hbar^2}{2m}\theta^2=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)^2=-\frac{2mV_0^2}{\hbar^2}$



エネルギー固有状態の波動関数の微分可能性

(1) $-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x)+V(x)\varphi(x)=E\varphi(x)$　　境界条件はこれまでのどれもOK

$V(x)$が不連続でも有界なら，$\varphi(x)$も$\varphi'(x)$も連続

証明　まず$V(x)$は連続，　$|V(x)|\leqq V_0$とする．

(1) → (2) $\varphi''(x)=\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)\varphi(x)$

任意のaと$\varepsilon>0$について

(3) $\varphi'(a+\varepsilon)-\varphi'(a-\varepsilon)=\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}dx\,\varphi''(x)=\frac{2m}{\hbar^2}\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}dx\,(V(x)-E)\varphi(x)$

よって (4) $|\varphi'(a+\varepsilon)-\varphi'(a-\varepsilon)|\leqq\frac{2m}{\hbar^2}\sqrt{\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}dx\,(V(x)-E)^2\underbrace{\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}dx\,|\varphi(x)|^2}_{\leqq 1}}$

$$\leqq\frac{2m}{\hbar^2}(|V_0|+|E|)\sqrt{2\varepsilon}$$

$|V(x)|\leqq V_0$を保ったまま$V(x)$を変形して不連続にする極限をとっても

(5) $|\varphi'(a+\varepsilon)-\varphi'(a-\varepsilon)|\leqq(\text{定数})\sqrt{2\varepsilon}$ は成立　　$\varphi'(x)$はaで連続

（※はSchwarz不等式　$\left|\int dx\,f(x)\,g(x)\right|^2\leqq\int dx\,|f(x)|^2\int dx\,|g(x)|^2$）