

### 3. 1次元固有値問題

#### 3.1. 1次元系の特徴

$$\underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)}_{\hat{H}} \phi(x) = E \phi(x)$$

ハミルトン = エネルギー  $\hat{H}$  の固有状態  $\hat{H} \phi(x) = E \phi(x)$

$$\rightarrow \psi(x, t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \phi(x) = \underbrace{e^{-iEt/\hbar}}_{\text{位相が変化するだけ}} \phi(x)$$

位相が変化するだけ

$$P(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = |\phi(x)|^2 = t \text{ に依らない}$$

「定常状態」

$$V(x) \rightarrow 0 \quad (x \rightarrow \pm\infty) \quad \text{と LT}$$

$E < 0$  の解 : 束縛状態.

$E > 0$  : 散乱 :

$$x \rightarrow \pm\infty \quad \text{で} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) = E \phi(x) \quad (x \rightarrow \pm\infty)$$

$$E < 0: \quad \phi(x) = \underline{Ae^{\kappa x}} + \underline{Be^{-\kappa x}} \quad (\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} |E|})$$

(条件) 波動関数が発散しない

$$\leftrightarrow \phi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} & (x \rightarrow -\infty) \\ Be^{-\kappa x} & (x \rightarrow \infty) \end{cases}$$

$E > 0$

$$\phi(x) \rightarrow \begin{cases} A e^{ikx} + B e^{-ikx} & (x \rightarrow \infty) \\ A' e^{ikx} + B' e^{-ikx} & (x \rightarrow -\infty) \end{cases}$$

$A, B, A', B'$  は定数

● 1次元系の特徴

(i) 縮退した束縛状態はない。

$$\left. \begin{aligned} H\phi_1 &= E\phi_1 \\ H\phi_2 &= E\phi_2 \end{aligned} \right\} \text{とある } (E < 0)$$

「互換性」が縮退する

$H\psi = E\psi$  と  $e^{i\theta}\psi$  は同じ状態

(あらゆる物理量の期待値が同じになる)

↓

$$\begin{aligned} \phi_2 \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V \right) \phi_1 &= E \phi_1 \phi_2 \\ \phi_1 \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V \right) \phi_2 &= E \phi_1 \phi_2 \end{aligned}$$

↓

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \left( \phi_2 \frac{d\phi_1}{dx} - \phi_1 \frac{d\phi_2}{dx} \right) = 0$$

||  
const. = 0  
↑

$x = \pm\infty$

↪

$$\frac{1}{\phi_1} \frac{d\phi_1}{dx} = \frac{1}{\phi_2} \frac{d\phi_2}{dx}$$

$$\phi_2(x) = f(x) \phi_1(x) \quad \text{と} \quad \text{する}$$

$$\phi_2' = f' \phi_1 + f \phi_1'$$

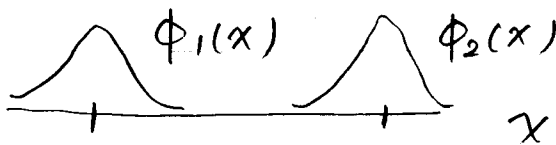
$$\downarrow \quad \frac{\phi_2'}{\phi_2} = \frac{f' \phi_1 + f \phi_1'}{f \phi_1} = \frac{f'}{f} + \frac{\phi_1'}{\phi_1} = \frac{\phi_1'}{\phi_1}$$

$$\downarrow \quad \frac{f'}{f} = 0 \quad \rightarrow \quad f = \text{const.}$$

規格化条件より  $f = e^{i\theta}$

$\downarrow$   $\phi_1$  と  $\phi_2$  は同じ状態

(但し  $\phi_1$  と  $\phi_2$  のノルムが 0 である限りではない。)



これは  
cf. = 座標の問題

(2) 1次元束縛状態の波動関数は実数にとれる

$$\phi(x) = \phi_R(x) + i \phi_I(x) \quad \text{とする}$$

(note)  $E$  は実数

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \phi_R'' + V \phi_R = E \phi_R \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \phi_I'' + V \phi_I = E \phi_I \end{cases}$$

$$\rightarrow \phi_I(x) = C \phi_R(x) \quad (C \text{ は定数})$$

$$\downarrow \phi(x) = (1 + iC) \phi_R(x) \rightarrow \eta \phi_R(x) \quad (\text{規格化因子を適当})$$

(1543)

(3) 1次元の引力ポテンシャルは少なくて1つの束縛状態をもつ。  
 $\int_{-\infty}^{\infty} V(x) dx < 0$  のとき

最低エネルギー状態: 「基底状態」

(note) 変分原理  $\frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0$   
 (ただし  $\psi$  が  $T$  も成り立つ)

例として  $\psi(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}$  ( $\alpha > 0$ ) とすると

$$\frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d\psi}{dx} + V(x) \psi(x) \right)$$

$$= \frac{\hbar^2 \alpha}{4m} + \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha x^2} V(x)$$

$\alpha \rightarrow 0$  を考慮すると  $\alpha \ll \sqrt{\alpha}$

$$\sim \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha x^2} V(x)$$

$$\sim \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx V(x) < 0$$

↓

$$\boxed{E_0 < 0}$$

$$\sin^2 \theta = \frac{1 - \cos 2\theta}{2}$$

### 3.2. 無限井戸型ポテンシャル



$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{それ以外} \end{cases}$$

波動関数は境界でゼロ:  $\phi(0) = \phi(a) = 0$

且  $x < 0$  及  $x > a$  で波動関数は有限で  $\langle V \rangle = \infty$

$$\rightarrow \phi(x) = 0 \quad (x \leq 0, x \geq a)$$

$0 \leq x \leq a$  で

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

$$\rightarrow \phi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}})$$

$$(E > 0)$$

$$= A' \sin kx + B' \cos kx$$

$$\phi(0) = 0 \quad \rightarrow \quad B' = 0$$

$$\phi(a) = 0 \quad \rightarrow \quad ka = n\pi \quad (n = 1, 2, \dots)$$

規格化条件:  $1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\phi(x)|^2 = A'^2 \int_0^a dx \sin^2 \left( \frac{n\pi}{a} x \right)$

$$= A'^2 \left[ \frac{x}{2} - \frac{1}{2} \cdot \frac{a}{n\pi} \sin \frac{2n\pi}{a} x \right]_{x=0}^a = \frac{a}{2} A'^2 \rightarrow A' = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

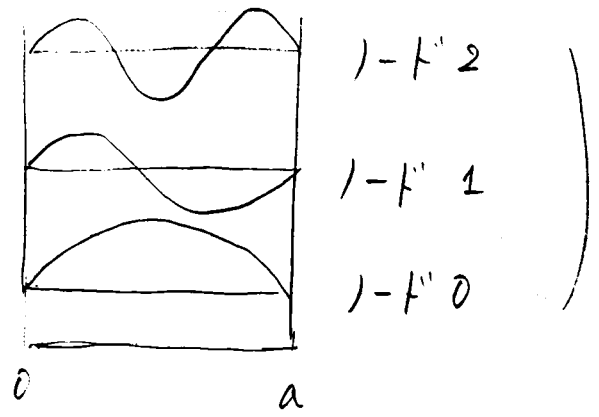
$$\psi \rightarrow \phi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) & 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{それ以外} \end{cases}$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \equiv E_n \quad (n=1, 2, \dots)$$

- エネルギーは離散的
- 最低エネルギー状態が存在 (基底状態)
- $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$  (最低エネルギー)  $\neq 0$

「ゼロ点運動」 cf. 不確定性関係  
 $\Delta p \sim \frac{\hbar}{\Delta x} \sim \frac{\hbar}{a}$

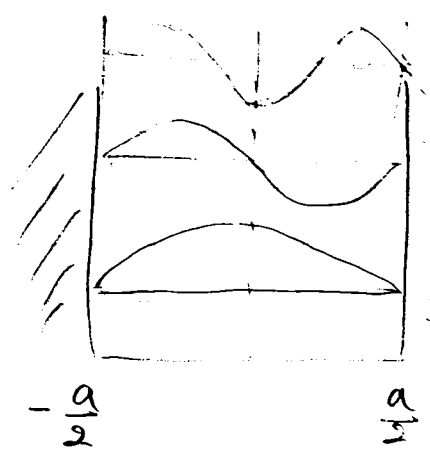
- $n=2 \rightarrow$  「第1励起エネルギー」
- $n=3 \rightarrow$  「第2励起エネルギー」
- $\vdots$



一般のn特徴

☐ パリティ

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ \infty & \text{それ以外} \end{cases}$$



+ (n=3)  
- (n=2)  
パリティ + (n=1)

ポテンシャルは  $x \rightarrow -x$  で不変 ( $V(-x) = V(x)$ ).

$$\pi V(x) \pi^{-1} = V(-x) = V(x)$$

「パリティ変換で不変」

$$\rightarrow \pi H \pi^{-1} = H, \text{ すなわち } [H, \pi] = 0$$

$\rightarrow H$  と  $\pi$  が同時固有状態を作れる

(note)  $\pi \phi(x) = \phi(-x)$   
 $\pi^2 \phi(x) = \pi \phi(-x) = \phi(x)$

$\rightarrow \pi^2 = 1$ , すなわち  $\pi$  の固有値は  $\pm 1$ .

$$\begin{cases} \pi \phi_{2n+1}(x) = \phi_{2n+1}(x) & \text{「正パリティ状態」} \\ \pi \phi_{2n}(x) = -\phi_{2n}(x) & \text{「負パリティ状態」} \end{cases}$$