DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

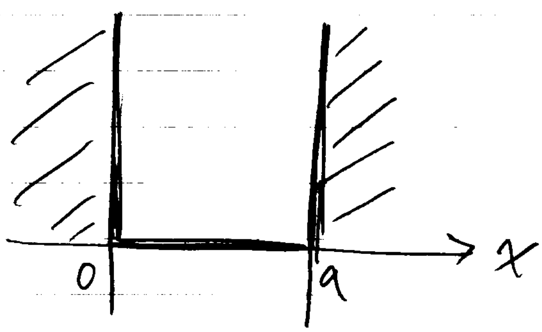
(復習) 1次元の量子力学

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

$$\begin{cases}\phi(x_<)=\phi(x_>) & \leftarrow \text{連続の方程式}\\ \phi'(x_<)=\phi'(x_>) & (V(x)\text{に発散がない場合})\end{cases}$$

← シュレーディンガー方程式

・無限井戸型ポテンシャル



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

$$\rightarrow \phi(0)=\phi(a)=0$$

$0\leq x\leq a$ で $\quad \phi(x)=A\sin kx+B\cos kx \quad \left(k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\right)$

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

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

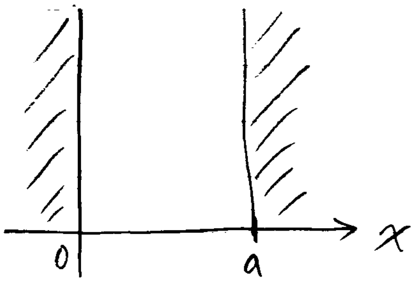
$$\rightarrow E_n=\frac{k^2\hbar^2}{2m}=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$\int_0^a dx\,\phi(x)^2=1 \rightarrow A=\sqrt{\frac{2}{a}}$$

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

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

3.2. 無限井戸型ポテンシャル



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

波動関数は境界でゼロ : $\phi(0) = \phi(a) = 0$

もし $x<0$ や $x>a$ で波動関数が有限だと $\langle V \rangle = \infty$

$$\rightarrow \quad \phi(x) = 0 \qquad (x \le 0,\ x \ge a)$$

$0 \le x \le a$ で

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

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

$$(E > 0)$$

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

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

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

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

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

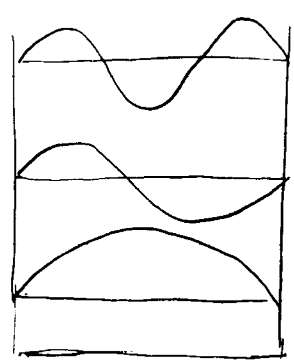
$$\varphi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) & 0 \le x \le a \\ 0 & \text{それ以外} \end{cases}$$

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

- 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　〃　」
  ⋮

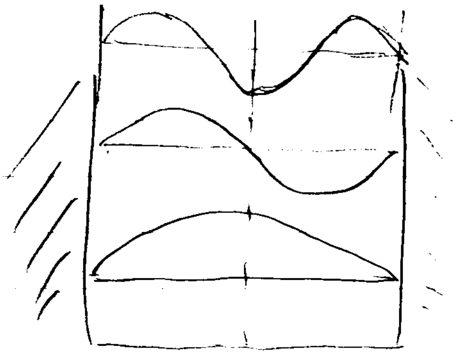


ノード2
ノード1
ノード0

一般的な特徴

四 パリティ

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



$+$ $(n=3)$

$-$ $(n=2)$

パリティ $+$ $(n=1)$

$-\frac{a}{2}$ $\frac{a}{2}$

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

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

「パリティ変換で不変」

$\to$ $\Pi H \Pi^{-1} = H$, すなわち $[H, \Pi] = 0$

$\to$ H と Π の同時固有状態を作れる

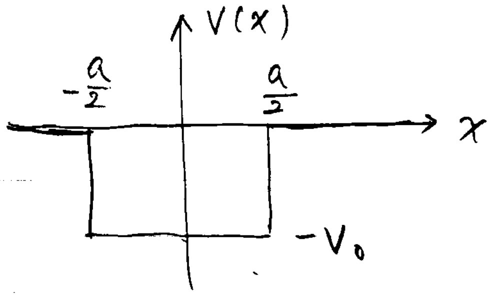
(note) $\Pi \phi(x) = \phi(-x)$
$\Pi^2 \phi(x) = \Pi \phi(-x) = \phi(x)$

$\to$ $\Pi^2 = 1$, すわわち Π の固有値は ± 1.

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

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

3.3. 有限井戸型ポテンシャル（束縛状態：$E<0$）



$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & (-\frac{a}{2} \le x \le \frac{a}{2}) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

(note) この場合もパリティ対称性あり

$x < -\frac{a}{2}$ および $x > \frac{a}{2}$ で $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) = E\,\phi(x)$

$$\rightarrow \phi(x) \propto e^{\pm \kappa x}$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}|E|}$$

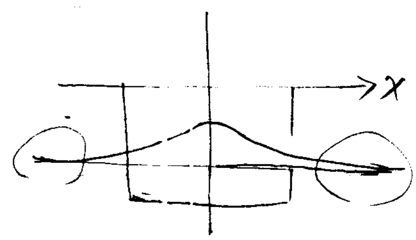
$-\frac{a}{2} \le x \le \frac{a}{2}$ で $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) - V_0\,\phi(x) = E\,\phi(x)$

$$\rightarrow \phi(x) \propto e^{\pm i k' x}$$

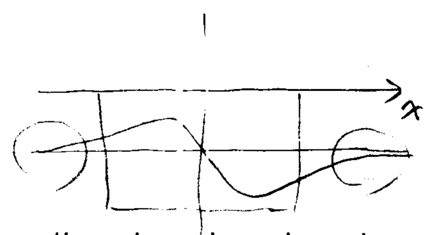
$$k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E)}$$

$x \to \pm\infty$ で $\phi(x) \to 0$ かつ パリティの固有状態

$$\phi_+(x) = \begin{cases} A e^{+\kappa x} & (x < -\frac{a}{2}) \\ B \cos k' x & (-\frac{a}{2} \le x \le \frac{a}{2}) \\ A e^{-\kappa x} & (x > \frac{a}{2}) \end{cases}$$



$$\phi_-(x) = \begin{cases} A' e^{+\kappa x} & (x < -\frac{a}{2}) \\ B' \sin k' x & (-\frac{a}{2} \le x \le \frac{a}{2}) \\ -A' e^{-\kappa x} & (x > \frac{a}{2}) \end{cases}$$



DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

接続条件：
$$\begin{cases} \phi_<(\pm \frac{a}{2}) = \phi_>(\pm \frac{a}{2}) \\ \phi'_<(\pm \frac{a}{2}) = \phi'_>(\pm \frac{a}{2}) \end{cases}$$

$\phi(x)$ と $\phi'(x)$ は境界で連続につながる

(note)
$$\phi'_>(b) - \phi'_<(b) = \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{b-\varepsilon}^{b+\varepsilon} dx \, \frac{d^2\phi(x)}{dx^2}$$
$$= \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{b-\varepsilon}^{b+\varepsilon} dx \, \frac{2m}{\hbar^2}\left(V(x) - E \right) \phi(x)$$

↑ シュレーディンガー方程式

$= 0$ (もし $V(x)$ が有限であれば)

※デルタ関数型ポテンシャルではこれが成り立たない。
※無限井戸型ポテンシャルもだめ。

$x = \frac{a}{2}$ での接続条件：

$$\begin{cases} A e^{-\frac{\kappa a}{2}} = B \cos \frac{k'a}{2} \\ -A\kappa e^{-\frac{\kappa a}{2}} = -Bk' \sin \frac{k'a}{2} \end{cases} \quad ; \quad \begin{cases} -A' e^{-\frac{\kappa a}{2}} = B' \sin \frac{k'a}{2} \\ A'\kappa e^{-\frac{\kappa a}{2}} = B'k' \cos \frac{k'a}{2} \end{cases}$$

(+パリティ) (−パリティ)

$$\rightarrow \quad \kappa = k' \tan \frac{k'a}{2} \quad ; \quad \kappa = -k' \cot\left(\frac{k'a}{2}\right)$$

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

(note) $\left(\frac{\kappa a}{2}\right)^2 = \frac{a^2}{4}\cdot\frac{2m}{\hbar^2}(-E)$

$$\left(\frac{k' a}{2}\right)^2 = \frac{a^2}{4}\cdot\frac{2m}{\hbar^2}(V_0+E) = \frac{ma^2}{2\hbar^2}V_0 - \left(\frac{\kappa a}{2}\right)^2$$

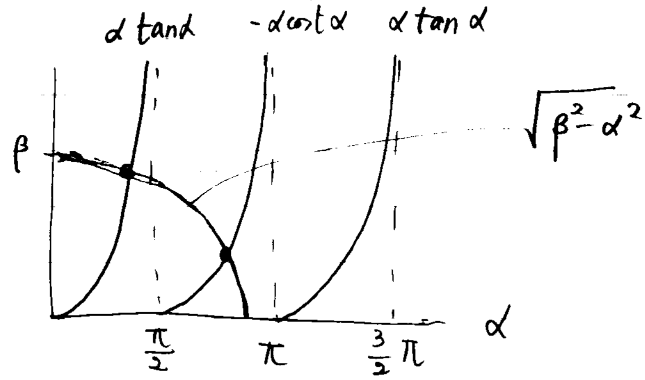
↓

$$\frac{k'a}{2}\tan\frac{k'a}{2} = \frac{\kappa a}{2} = \sqrt{\frac{ma^2}{2\hbar^2}V_0 - \left(\frac{k'a}{2}\right)^2}$$

or $\alpha\tan\alpha = \sqrt{\beta^2-\alpha^2}$ (＋パリティ)

$\left(\alpha = \frac{k'a}{2},\ \beta^2 = \frac{ma^2}{2\hbar^2}V_0\right)$

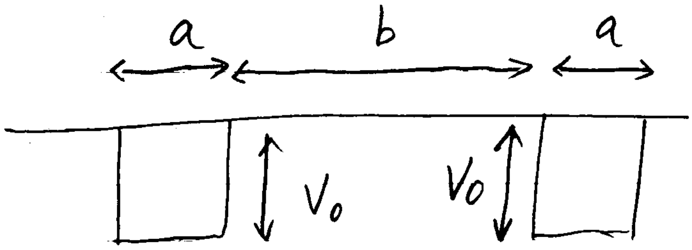
$-\alpha\cot\alpha = \sqrt{\beta^2-\alpha^2}$ (－パリティ)



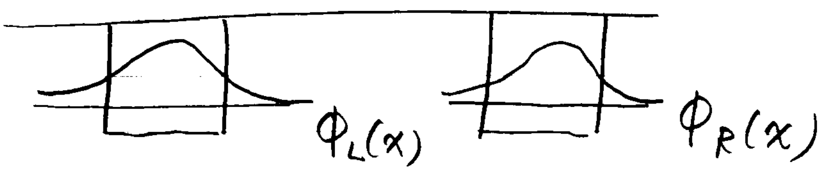
→ ・最低1つは解（束縛状態）がある
・束縛状態は有限個
・βが大きいほど解の個数は多．
（V_0：大 and/or a：大）
・無限井戸の場合よりエネルギーは下がる
（運動エネルギーが下がる）

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

3.4. 2重井戸型ポテンシャル

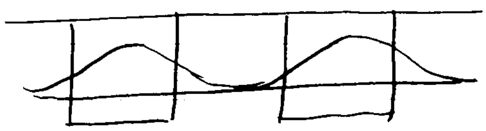


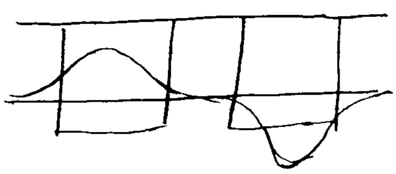
bが非常に大きければ2つの井戸は独立



エネルギー E_1 で2つの状態が縮退

→ bが小さいと縮退がとける

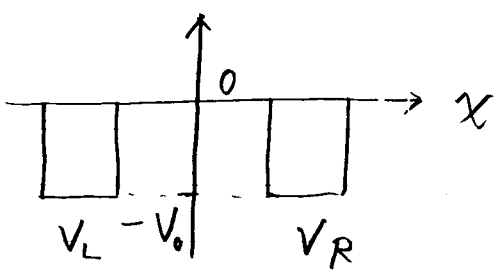




パリティのいい状態を作ると

$$\phi_\pm(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_L(x) \pm \phi_R(x)\right)$$

$$H = T + \underbrace{V_L + V_R}_{= V}$$



$$\begin{cases} (T+V_L)\phi_L = E_1 \phi_L \\ (T+V_R)\phi_R = E_1 \phi_R \end{cases}$$

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

$$\frac{\langle \phi_\pm | H | \phi_\pm \rangle}{\langle \phi_\pm | \phi_\pm \rangle}$$ を計算する。

$$
\begin{aligned}
\text{分母} &= \frac{1}{2}\left(\langle \phi_L | \phi_L \rangle + \langle \phi_R | \phi_R \rangle \right) \\
&\quad \pm \frac{1}{2}\left(\langle \phi_L | \phi_R \rangle + \langle \phi_R | \phi_L \rangle \right) \\
&= 1 \pm \langle \phi_L | \phi_R \rangle
\end{aligned}
$$

$$\langle \phi_L | \phi_R \rangle = \langle \phi_R | \phi_L \rangle$$

$$
\begin{aligned}
\text{分子} &= \frac{1}{2}\left(\langle \phi_L | H | \phi_L \rangle + \langle \phi_R | H | \phi_R \rangle \right) \\
&\quad \pm \frac{1}{2}\left(\langle \phi_L | H | \phi_R \rangle + \langle \phi_R | H | \phi_L \rangle \right) \\
&= \langle \phi_L | H | \phi_L \rangle \pm \langle \phi_L | H | \phi_R \rangle
\end{aligned}
$$

$$\langle \phi_L | H | \phi_L \rangle = \langle \phi_L | T + V_L | \phi_L \rangle + \langle \phi_L | V_R | \phi_L \rangle = E_1 + \langle \phi_L | V_R | \phi_L \rangle$$

$$\langle \phi_L | H | \phi_R \rangle = \langle \phi_L | T + V_R | \phi_R \rangle + \langle \phi_L | V_L | \phi_R \rangle = E_1 \langle \phi_L | \phi_R \rangle + \langle \phi_L | V_L | \phi_R \rangle$$

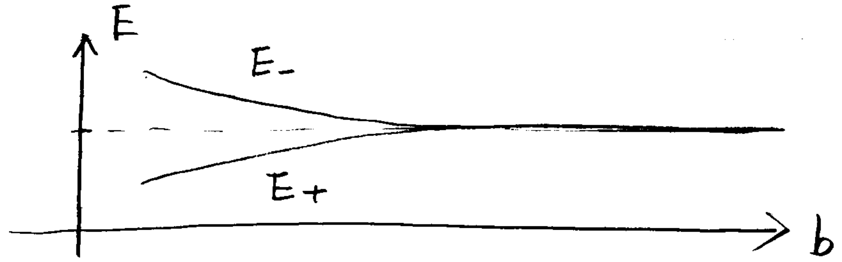
$$= E_1 \left(1 \pm \langle \phi_L | \phi_R \rangle \right) \pm \langle \underbrace{\phi_L}_{\sim 1} | \underbrace{V_L}_{\sim 1} | \underbrace{\phi_R}_{\sim e^{-\kappa b}} \rangle + \langle \underbrace{\phi_L}_{\sim e^{-\kappa b}} | \underbrace{V_R}_{\sim 1} | \underbrace{\phi_L}_{\sim e^{-\kappa b}} \rangle$$

$$\sim E_1 \left(1 \pm \langle \phi_L | \phi_R \rangle \right) \pm \langle \phi_L | V_L | \phi_R \rangle$$

$$E_\pm = \frac{\langle \phi_\pm | H | \phi_\pm \rangle}{\langle \phi_\pm | \phi_\pm \rangle}$$

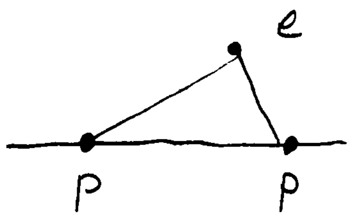
$$\sim E_1 + \frac{\pm \langle \phi_L | V_L | \phi_R \rangle}{1 \pm \langle \phi_L | \phi_R \rangle} \sim E_1 \pm \underbrace{\langle \phi_L | V_L | \phi_R \rangle}_{<0}$$

基底状態 → + パリティ，$E = E_1 + \langle \phi_L | V_L | \phi_R \rangle$
第1励起状態 → − パリティ，$E = E_1 - \langle \phi_L | V_L | \phi_R \rangle$



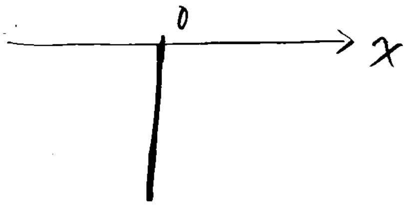
トンネル分離（ダブレット）

(note) He^+ イオン



3.4. デルタ関数型ポテンシャル(束縛状態)

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



(井戸型で $V_0 a$ = 一定のまま $a \to 0$ としたもの)

$$\phi(x) = \begin{cases} A\,e^{\kappa x} & (x < 0) \\ A\,e^{-\kappa x} & (x > 0) \end{cases}$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}|E|}$$

(note) 波動関数は $x = 0$ で連続

$$\phi_>'(x) - \phi_<'(x) = \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx\, \frac{2m}{\hbar^2}\left(V(x) - E\right)\phi(x)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \frac{2m}{\hbar^2}\cdot(-g)\,\delta(x)\,\phi(x)$$

$$= -\frac{2m}{\hbar^2} g\, \phi(0)$$

↓

$$-2\kappa = -\frac{2m}{\hbar^2} g$$

↓

$$\kappa = \frac{m}{\hbar^2} g$$

↓

$$E = -\frac{\kappa^2 \hbar^2}{2m} = -\frac{m g^2}{2\hbar^2}$$