DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

(3) 1次元の引力ポテンシャルは少なくとも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 $\dfrac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \geq E_0$

どんな wf でも成り立つ

例えば $\psi(x) = \left(\dfrac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}$ $(\alpha>0)$ ととると、

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

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

$\alpha \to 0$ を考えると $\alpha \ll \sqrt{\alpha}$

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

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

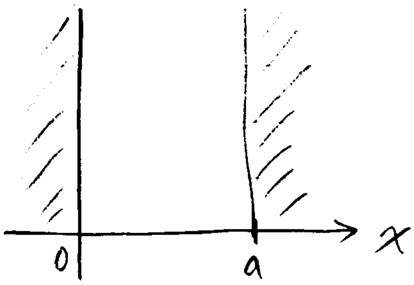
⇓

$$\boxed{E_0 < 0}$$

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

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 $x < 0$ か $x > a$ 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

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

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

$$(E > 0)$$

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

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

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

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

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

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

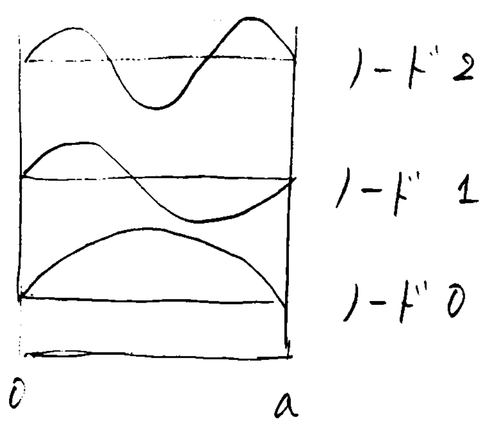
$$\phi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) & 0 \le x \le a \\ 0 & \text{それ以外} \end{cases}$$

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

- 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　〃　」
  ⋮

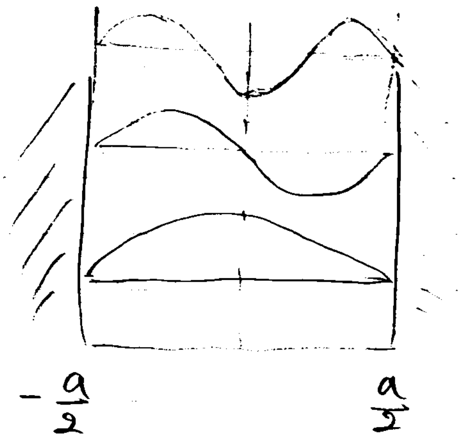


一般的な特徴

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

四 パリティ

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



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 $[H, \Pi] = 0$

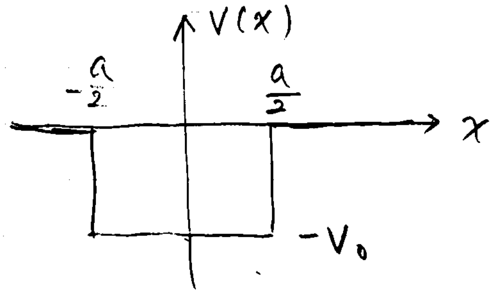
$\to$ H と Π の同時固有状態を作れる

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

$\to$ $\Pi^2 = 1$, すなわち Π の固有値は ± 1.

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

3.3. 有限井戸型ポテンシャル（束縛状態：$E<0$）



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

(note) この場合もパリティ対称性あり

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

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

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

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

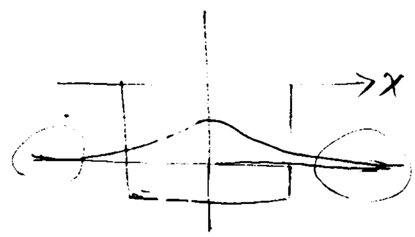
$$\rightarrow \phi(x)\propto e^{\pm ik'x}$$

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

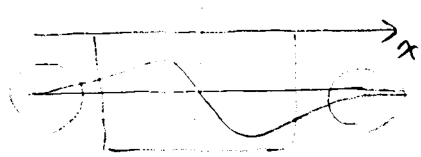
$x\to\pm\infty$ で $\phi(x)\to 0$ かつ パリティの固有状態

↓

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



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



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)
$$\phi'_>(b) - \phi'_<(b) = \lim_{\varepsilon\to 0}\int_{b-\varepsilon}^{b+\varepsilon} dx \frac{d^2\phi(x)}{dx^2}$$

$$= \lim_{\varepsilon\to 0}\int_{b-\varepsilon}^{b+\varepsilon} dx \frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)\phi(x)$$

↑ 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：

$$\begin{cases} A e^{-\frac{\kappa a}{2}} = B\cos\frac{k'a}{2} \\ -A\kappa e^{-\frac{\kappa a}{2}} = -Bk'\sin\frac{k'a}{2} \end{cases}$$
（＋パリティ）

$$\begin{cases} -A' e^{-\frac{\kappa a}{2}} = B'\sin\frac{k'a}{2} \\ A'\kappa e^{-\frac{\kappa a}{2}} = B'k'\cos\frac{k'a}{2} \end{cases}$$
（－パリティ）

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

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

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

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

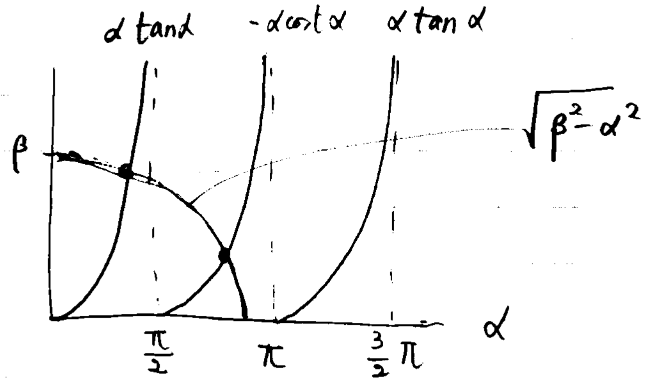
↓

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

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)