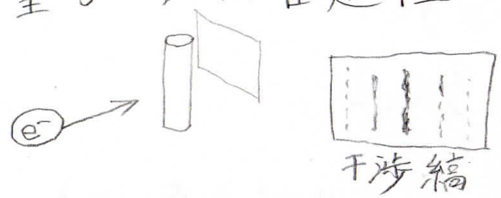
一次元井戸型ポテンシャル

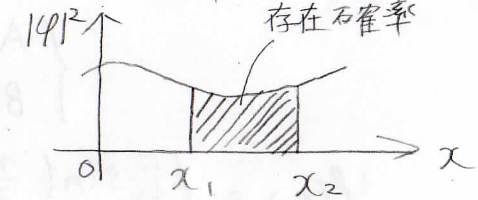
・量子の不確定性



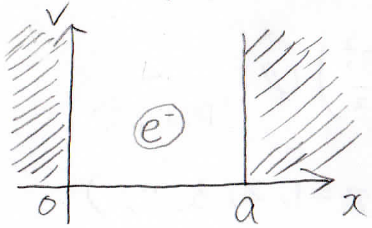
電子の位置と運動量を同時に決められない(不確定性原理)
ある領域に雲のように分布
存在確率(実数)で議論
φ:複素数
$|\varphi|^2$:実数 ← 存在確率

$x_1 \leq x \leq x_2$ に電子が存在する確率

$$\frac{\int_{x_1}^{x_2} \varphi \varphi^* dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \varphi \varphi^* dx}$$



・一次元井戸型ポテンシャル
ある区間(0, a)に電子が1個存在



$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 < x < a) \\ \infty & (x < 0, a < x) \end{cases}$$

境界条件
$$\varphi(0) = \varphi(a) = 0$$
規格化条件
$$\int_0^a \varphi(x)\varphi^*(x)dx = 1$$

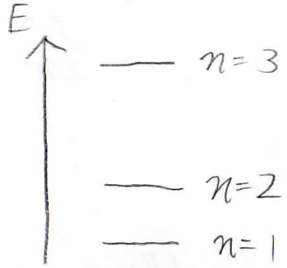
$0 < x < a$ におけるシュレディンガー方程式
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) = E\varphi(x)$$
特性方程式
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\lambda^2 - E = 0$$
$$\lambda = \pm\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}i \qquad \left(E = \frac{p^2}{2m}\right)$$
$$= \pm\frac{p}{\hbar}i$$
$$\varphi(x) = C_1 e^{\frac{p}{\hbar}ix} + C_2 e^{-\frac{p}{\hbar}ix}$$
オイラーの公式 $e^{iax} = \cos(ax) + i\sin(ax)$
$$\varphi(x) = (C_1 + C_2)\cos\left(\frac{p}{\hbar}x\right) + i(C_1 - C_2)\sin\left(\frac{p}{\hbar}x\right)$$
☆ $\varphi(0) = C_1 + C_2 = 0$ より
$$\varphi(x) = i(C_1 - C_2)\sin\left(\frac{p}{\hbar}x\right)$$
☆ $\varphi(a) = 0$ より
$$\sin\left(\frac{p}{\hbar}a\right) = 0 \qquad \frac{p}{\hbar}a = n\pi \quad (n = 1, 2, \cdots)$$
$$\frac{p}{\hbar} = \frac{n\pi}{a}$$
$i(C_1 - C_2) = A$ とおいて
$$\varphi(x) = A\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$
☆ 規格化条件より
$$\int_0^a \varphi(x)\varphi^*(x)dx = A^2\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx$$
$$= \frac{A^2}{2}\left[x - \frac{a}{2n\pi}\sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)\right]_0^a$$
$$= \frac{a}{2}A^2$$
$$= 1 \qquad A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$\varphi = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \quad (n=1,2,3,\cdots)$$

$$E\varphi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi$$

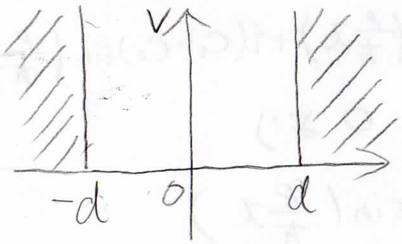
$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{n^2\pi^2}{a^2}\right)\varphi$$

$$E = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2} \quad (\text{離散的})$$



練習問題

この場合の$\varphi(x)$とEは？



答

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi = E\varphi$$

$$\varphi(x) = A\cos\left(\frac{p}{\hbar}x\right) + B\sin\left(\frac{p}{\hbar}x\right)$$

境界条件 $\varphi(-d) = \varphi(d) = 0$

☆ $\varphi(-d) = A\cos\left(\frac{p}{\hbar}d\right) - B\sin\left(\frac{p}{\hbar}d\right) = 0$

☆ $\varphi(d) = A\cos\left(\frac{p}{\hbar}d\right) + B\sin\left(\frac{p}{\hbar}d\right) = 0$

☆ $B=0$ のとき

$\cos\left(\frac{p}{\hbar}d\right) = 0$ より

$$\frac{p}{\hbar}d = \frac{\pi}{2}, \frac{3}{2}\pi, \frac{5}{2}\pi, \cdots$$

$$\frac{p}{\hbar} = \frac{n\pi}{2d} \quad (n=1,3,5,\cdots)$$

$$\varphi(x) = A\cos\left(\frac{n\pi}{2d}x\right)$$

☆ $A=0$ のとき

$\sin\left(\frac{p}{\hbar}d\right) = 0$ より

$$\frac{p}{\hbar} = \frac{n\pi}{2d} \quad (n=2,4,6,\cdots)$$

☆ 規格化

$$\int_{-a}^{a} \varphi\varphi^* dx = \frac{A^2}{2}(d+d) = 1$$

$$\begin{cases} A = \sqrt{\frac{1}{d}} \\ B = 0 \end{cases} \text{または} \begin{cases} A = 0 \\ B = \sqrt{\frac{1}{d}} \end{cases}$$

$$\varphi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{d}}\sin\left(\frac{n\pi}{2d}x\right) & (n=2,4,6,\cdots) \\ \sqrt{\frac{1}{d}}\cos\left(\frac{n\pi}{2d}x\right) & (n=1,3,5,\cdots) \end{cases}$$

$$E\varphi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{n^2\pi^2}{4d^2}\right)\varphi$$

$$E = \frac{\hbar^2 n^2\pi^2}{8md^2} \quad (n=1,2,3,\cdots)$$

$d = \frac{a}{2}$ とすると

$$E = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2}$$