[14] 1次元井戸型ポテンシャル

① $0 \le x \le L$ でのシュレディンガー方程式

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \underbrace{U(x)}_{=0} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad \ldots ①$$

$$\left(\because \hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

より

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (0 \le x \le L)}$$

② ①のシュレディンガー方程式の解は

Eは運動エネルギーに等しいため

E>0であることに注意すると、

２階微分して負の固有値を持つ関数の

一般形として $\Psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$

とかける。

一方 $\Psi(0) = 0 \, (x < 0, x > L)$ であるため

波動関数の連続性より

$$\Psi(0) = \Psi(L) = 0$$

この条件から $\Psi(x) = A\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$

の形に絞られる。$(n = 1, 2, 3, \ldots)$

さらに規格化を行うと

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x)\Psi_n(x)\,dx = \int_0^L \Psi_n^*(x)\Psi_n(x)\,dx$$

$$= \int_0^L A^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)dx = \int_0^L A^2 \frac{1}{2}\left\{1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)\right\}dx$$

$$= \left[A^2 \frac{1}{2}\left\{x - \frac{L}{2n\pi}\sin\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)\right\}\right]_0^L = \frac{A^2}{2}L$$

これが1になるためには、$A = \sqrt{\frac{2}{L}}$

のように選ぶとよい。

$$\boxed{\therefore \Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad (n = 1, 2, 3, \ldots)}$$

[14] 1次元井戸型ポテンシャル

③$\hat{H}\Psi_n(x)=E_n\Psi_n(x)$から$E_n$ を求めると

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\right]$$

$$=\underbrace{+\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2}_{E_n}\underbrace{\left[\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\right]}_{\Psi_n(x)}$$

$$\therefore E_n=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$$

答え

④

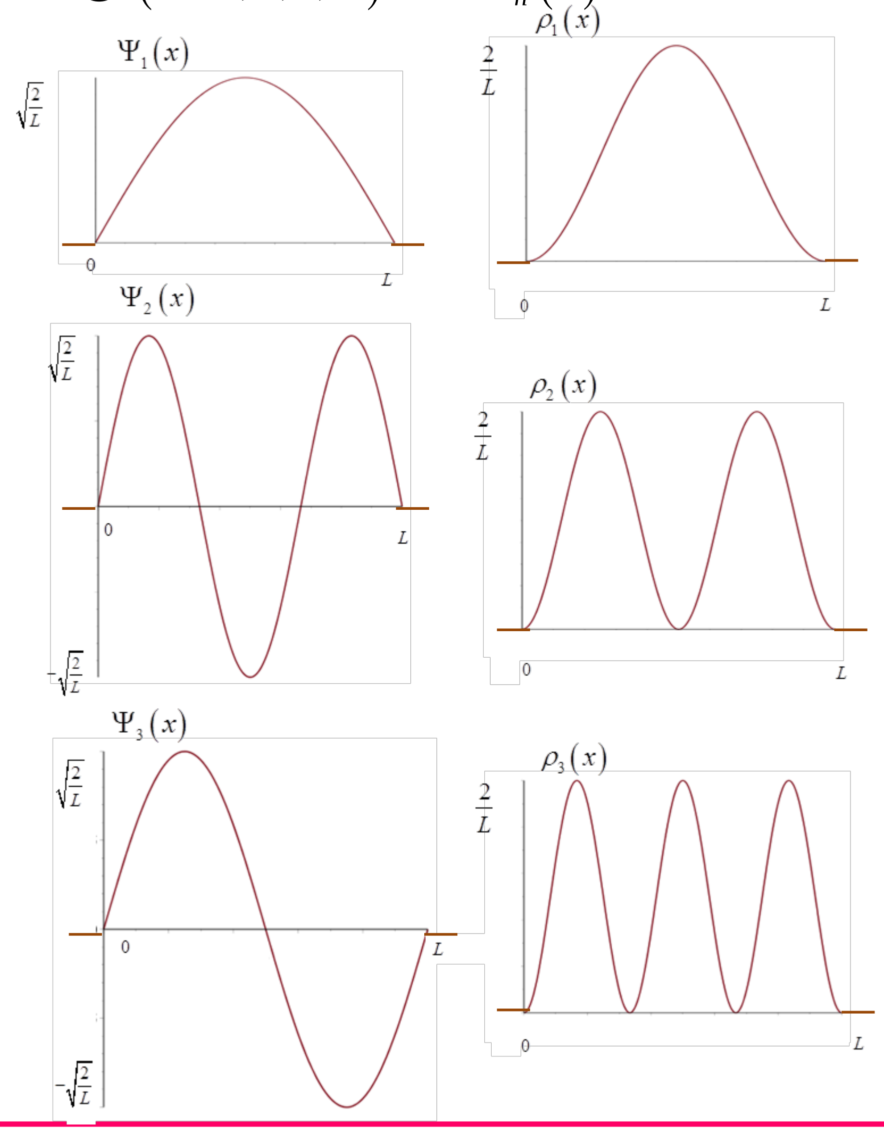
$$\rho_n(x)=\Psi_n^*(x)\Psi_n(x)$$

$$=\frac{2}{L}\sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

$$=\frac{1}{L}\left(1-\cos\frac{2n\pi}{L}x\right)$$

答え

⑤ $(n=1,2,3,\ldots)$ の $\Psi_n(x)$ と ρ_n



- $\Psi_n(x)$は正負を取るが $\rho_n\geq 0$
- Ψ はsinで ρ はcosを上にシフト
- x<0,x>Lでは0になることもわかるように図示

上の図は、ずれてますが…

[14]１次元井戸型ポテンシャル

③$\hat{H}\Psi_n(x) = E_n\Psi_n(x)$から$E_n$ を求めると

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\right]$$

$$= \underbrace{+\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2}_{E_n}\underbrace{\left[\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\right]}_{\Psi_n(x)}$$

$$\therefore E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$$

答え

④

$$\rho_n(x) = \Psi_n^*(x)\Psi_n(x)$$

$$= \frac{2}{L}\sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

$$= \frac{1}{L}\left(1-\cos\frac{2n\pi}{L}x\right)$$

答え

⑤ $(n=1,2,3,\ldots)$ の $\Psi_n(x)$ と ρ_n