

2. 井戸型ポテンシャル

Square well potential

2-1 一次元井戸型ポテンシャル

One-dimensional square well potential

長さ L に制限された一次元の（無限に深い）井戸型ポテンシャルのハミルトニアンは

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (2.1.1)$$

$$V(x) = \begin{cases} 0 & [0 \leq x \leq L] \\ \infty & [x < 0, L < x] \end{cases} \quad (2.1.2)$$

と表される。エネルギー固有値は

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2mL^2} \quad [n = 1, 2, 3, \dots] \quad (2.1.3)$$

波動関数は

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad (2.1.4)$$

である。

(付録2-1 一次元井戸型ポテンシャル)

$0 \leq x \leq L$ でシュレーディンガー方程式は

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi(x) &= E\psi(x) \\ \Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} &= E\psi(x) \\ \Leftrightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) &= 0 \end{aligned} \quad (A2.1.1)$$

となる。

$$\psi(x) = A \sin kx \quad (A2.1.2)$$

とする。 $x=0$ と $x=L$ で $\psi(x)=0$ となるために、

$$k = \frac{n\pi}{L} \quad [n = 1, 2, 3, \dots] \quad (A2.1.3)$$

でなければならない。式 (A2.1.2) を式 (A2.1.1) に代入して、

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2}(A \sin kx) + \frac{2mE}{\hbar^2}(A \sin kx) &= 0 \\ \Leftrightarrow \frac{d}{dx}(Ak \cos kx) + \frac{2mE}{\hbar^2} A \sin kx &= 0 \end{aligned}$$

$$\Leftrightarrow -Ak^2 \sin kx + \frac{2mE}{\hbar^2} A \sin kx = 0$$

$$\Leftrightarrow -k^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} = 0$$

$$\Leftrightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{A2.1.4}$$

となり、式 (A2.1.3) から、

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2mL^2} \quad [n = 1, 2, 3, \dots] \tag{A2.1.5}$$

となる。

$$\psi_n(x) = A_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

とする。規格化条件から、

$$\int_0^L \psi_n(x) \psi_n(x) dx = 1$$

$$\Leftrightarrow A_n^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = 1 \Leftrightarrow A_n^2 \int_0^L \frac{1}{2} \left[1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)\right] dx = 1 \Leftrightarrow \frac{A_n^2}{2} \left[x - \frac{L}{2n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)\right]_0^L = 1$$

$$\Leftrightarrow \frac{A_n^2 L}{2} = 1 \Leftrightarrow A_n^2 = \frac{2}{L} \Leftrightarrow A_n = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

だから、

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \tag{A2.1.6}$$

と書ける。