井戸型ポテンシャル

みそ

2004.12.13

1　理論

1次元井戸型ポテンシャルの問題を考える。その中にある粒子が存在するとする。また、その粒子は定常状態であるとする。よって、時間に依存しないシュレディンガー方程式、

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+U(x))\psi(x)=E\psi(x) \tag{1}$$

を解く。E はエネルギーであり、$U(x)$ は、粒子のポテンシャルであり、その定義は、

$$U(x)=\begin{cases} 0 & (|x|>a) \\ -U_0 & (|x|<a) \end{cases} \tag{2}$$

である。

$|x|>a$ の場合、

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)$$

を解くことになるが、$E>0$ の場合、解は三角関数の正弦関数か余弦関数になり、$x\to\pm\infty$ のとき、解は収束せず、無限遠に粒子が存在しないという境界条件を満たさない。よって $E<0$ である。よって、解は C を定数として、$\kappa^2=-\frac{2mE}{\hbar^2}$ ととると、

$$\psi(x)=Ce^{\kappa x} \qquad (x<-a) \tag{3}$$

$$\psi(x)=Ce^{-\kappa x} \qquad (x>a) \tag{4}$$

$|x| < a$ の場合、

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m(E+U_0)}{\hbar^2}\psi(x)$$

を解くことになる。$k^2 = \frac{2m(E+U_0)}{\hbar^2}$ とすれば、解は、

$$\psi(x) = A\cos kx + B\sin kx \tag{5}$$

となる。ここで、この解が余弦関数か正弦関数で分ける。つまり $\psi(x)$ が偶か奇で分けるということである。

偶の場合、

$$\psi(x) = \begin{cases} Ce^{\kappa x} & (-\infty < x < -a) \\ A\cos kx & (-a < x < a) \\ Ce^{-\kappa x} & (a < x < \infty) \end{cases} \tag{6}$$

ここで、$x = \pm a$ のとき波動関数は連続でなめらかにつながってなければならないので、波動関数の値とその微分した値が同じでなければならない。よって、

$$A\cos ka = Ce^{-\kappa a}$$

$$-kA\sin ka = -\kappa Ce^{-\kappa a}$$

これらの式より、

$$k\tan ka = \kappa$$

$\xi = ka$,$\eta = \kappa a$ とすれば、

$$\xi\tan\xi - \eta = 0$$

ここで、ξ, η が満たす条件は、

$$\begin{aligned} \xi^2 + \eta^2 &= k^2a^2 + \kappa^2a^2 \\ &= a^2\left(\frac{2m(E+U_0)}{\hbar^2} - \frac{2mE}{\hbar^2}\right) \\ &= \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} \end{aligned}$$

である。よって、

$$f(\xi) = \xi\tan\xi - \eta = 0 \tag{7}$$

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} \tag{8}$$

の 2 つの式が満たす解を数値的に解けばよい。そうすれば、エネルギーすなわち固有値 E が決まる。定数は、$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$ という規格化条件を用いて求めればよい。そうすれば $\psi(x)$ が具体的にまり、

$$\psi(x) = \begin{cases} (a + \frac{1}{\kappa})^{-\frac{1}{2}} \cos kx & (|x| < a) \\ (a + \frac{1}{\kappa})^{-\frac{1}{2}} \cos ka e^{-\kappa(|x|-a)} & (|x| > a) \end{cases} \tag{9}$$

となる。　奇の場合も同様に考えて、数値的に解く方程式は、

$$f(\xi) = \xi \cot \xi + \eta = 0 \tag{10}$$

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2} \tag{11}$$

であり、波動関数は、

$$\psi(x) = \begin{cases} (a + \frac{1}{\kappa})^{-\frac{1}{2}} \sin kx & (|x| < a) \\ (a + \frac{1}{\kappa})^{-\frac{1}{2}} \frac{x}{|x|} \sin ka e^{-\kappa(|x|-a)} & (|x| > a) \end{cases} \tag{12}$$

である。