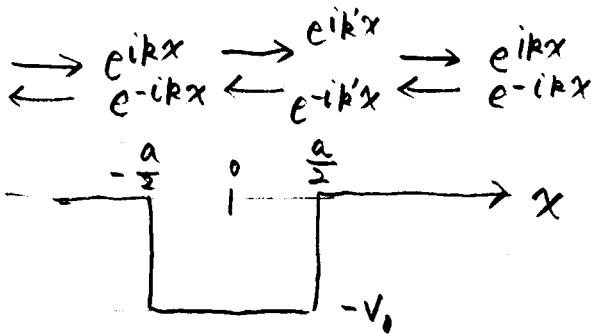


3.6. 有限井戸型ポテンシャル (連続状態: $E > 0$)



$$\phi(x) = \begin{cases} A_+ e^{ikx} + A_- e^{-ikx} & (x < -\frac{a}{2}) \\ B_+ e^{ik'x} + B_- e^{-ik'x} & (-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}) \\ C_+ e^{ikx} + C_- e^{-ikx} & (x > \frac{a}{2}) \end{cases}$$

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

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

* 1Dポテンシャルの固有状態となる解も「 $\psi(x)$ 」で一般的に書く。

* 束縛状態: 遠方では $Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}$ のどちらか一方がゼロ \rightarrow エネルギーは離散化

散乱状態: $Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ のどちらも存在 \rightarrow エネルギー E にも解がある (連続状態)

$x = -\frac{a}{2}$ での波動関数の接続

$$\begin{cases} \phi_>(-\frac{a}{2}) = \phi_<(-\frac{a}{2}) \\ \phi'_>(-\frac{a}{2}) = \phi'_<(-\frac{a}{2}) \end{cases}$$

$$\rightarrow \begin{pmatrix} A_+ \\ A_- \end{pmatrix} = S_< \begin{pmatrix} B_+ \\ B_- \end{pmatrix}$$

$$T = \frac{2kk' e^{-ika}}{2kk' \cos k'a - i(k^2 + k'^2) \sin k'a}$$

$$R = \frac{-i(k^2 - k'^2) e^{-ika} \sin k'a}{2kk' \cos k'a - i(k^2 + k'^2) \sin k'a}$$

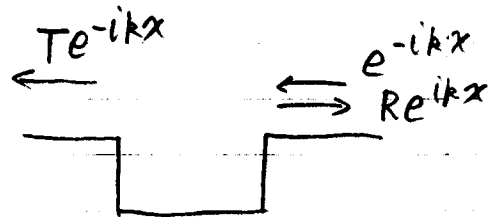
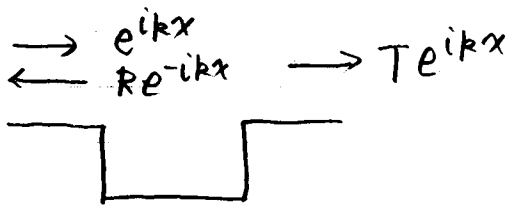
$\chi = \frac{a}{2}$ の接続条件

$$\begin{pmatrix} B_+ \\ B_- \end{pmatrix} = S > \begin{pmatrix} C_+ \\ C_- \end{pmatrix}$$

両者を合わせると

$$\begin{pmatrix} A_+ \\ A_- \end{pmatrix} = S < S > \begin{pmatrix} C_+ \\ C_- \end{pmatrix}$$

物理的に興味がある解:



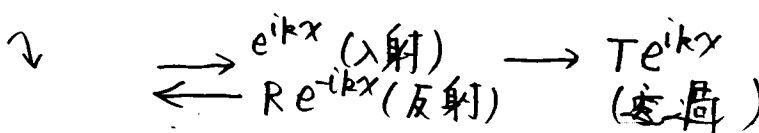
左から入射した波: ϕ_L

右から入射した波: ϕ_R

*ポテンシャルがハミルトン対称なため、 R と T は ϕ_L と ϕ_R で同じ

フックルズ: $j(x) = \frac{\hbar}{2im} \left(\psi^*(x) \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right)$

$\psi(x) = e^{\pm ikx}$ に対して $j = \pm \frac{\hbar k}{m}$



T : 透過係数
 R : 反射係数



cf. 量子反射

フックルズの保存:

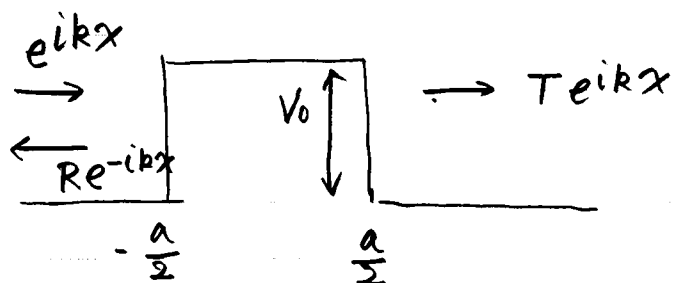
$$1 = |T|^2 + |R|^2$$

井戸型ポテンシャルでは解析的に求まる。

∴ a と T

$$1 = \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| + \int_0^\infty dE |\phi_{E,L}\rangle \langle \phi_{E,L}| + \int_0^\infty dE |\phi_{E,R}\rangle \langle \phi_{E,R}|$$

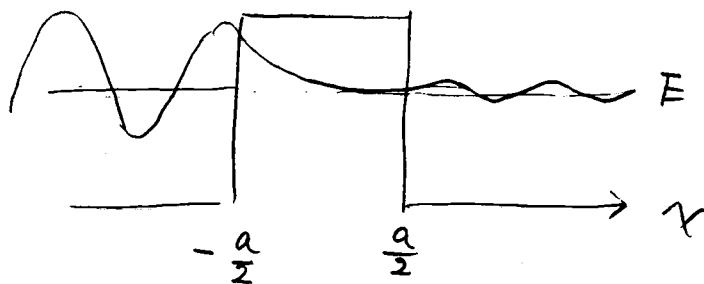
3.7. ポテンシャル障壁と量子トンネル現象



$E < V_0$ のとき $T \neq 0 \Rightarrow$ 「量子トンネル現象」

$$\phi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + R e^{-ikx} & (x < -\frac{a}{2}) \\ A e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x} & (-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}) \\ T e^{ikx} & (x > \frac{a}{2}) \end{cases}$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)}$$



$$T = \frac{2k\kappa e^{-i\kappa a}}{2k\kappa \cosh(\kappa a) - i(k^2 - \kappa^2) \sinh(\kappa a)}$$

トネル確率 : $P(E) = \frac{j_{out}}{j_{in}} = |T|^2$

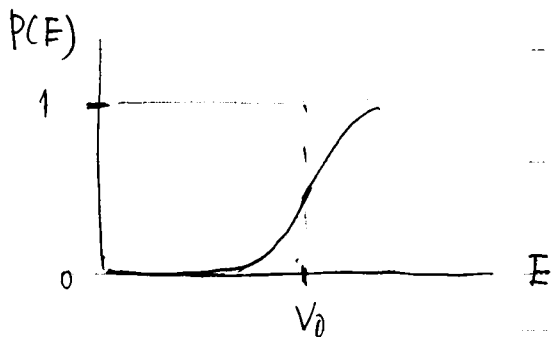
(note) $V_0 \gg E$ のとき

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \ll K^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)$$

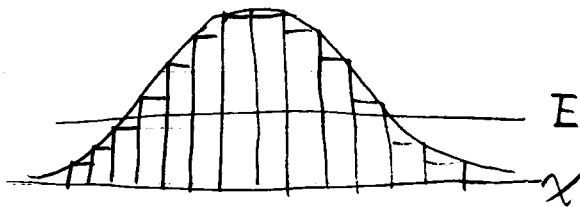
↓

$$|T|^2 \sim \frac{4k^2 K^2}{K^4 \cdot \left(\frac{e^{Ka}}{2}\right)^2} = \frac{16k^2}{K^2} e^{-2Ka}$$

指数関数.



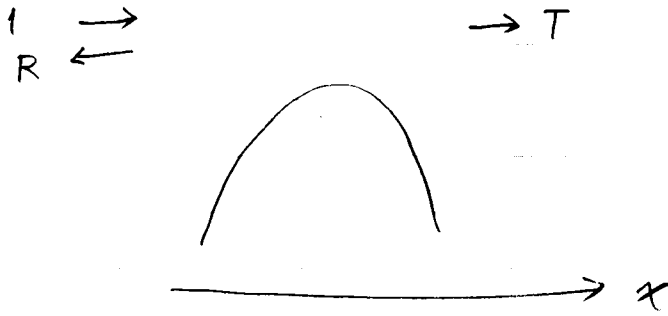
一般の障壁の場合 :



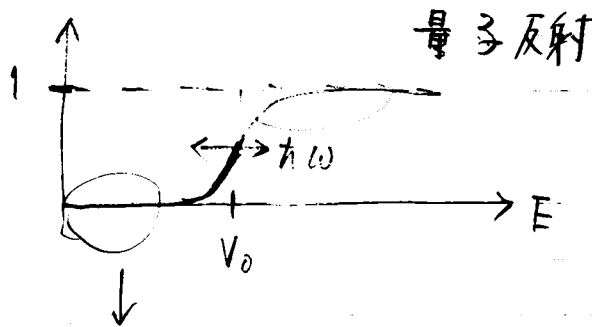
$$P(E) \sim \pi e^{-2\kappa a} \sim e^{-2 \int_{\text{障壁}} dx \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)}}$$

* より詳しくは議論は WKB 近似のとき.

(note) $V(x) = V_0 - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$

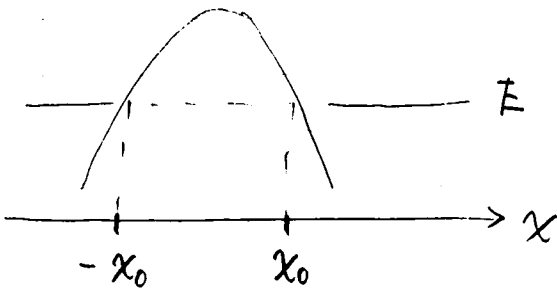


$$P(E) = |T(E)|^2 = \frac{1}{1 + e^{\frac{2\pi}{\hbar\omega} (V_0 - E)}}$$



$$P(E) \sim e^{-\frac{2\pi}{\hbar\omega} (V_0 - E)}$$

(note)



$$x_0 = \sqrt{\frac{2}{m\omega^2} (V_0 - E)}$$

$$x = x_0 \cos\theta$$

$$\int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E)} dx$$

$$= \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left((V_0 - E) - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right)} dx$$

$$= \int_{-x_0}^{x_0} \frac{m\omega}{\hbar} \cdot \sqrt{x_0^2 - x^2} dx$$

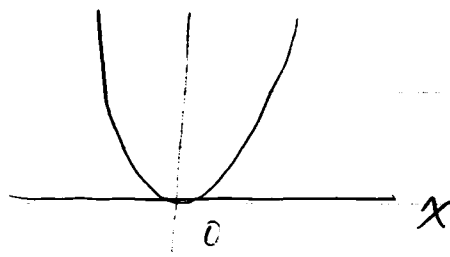
$$= \frac{m\omega}{\hbar} \int_{\pi}^0 d\theta x_0 \sqrt{1 - \cos^2\theta} (-x_0 \sin\theta)$$

$$= \frac{m\omega}{\hbar} \cdot x_0^2 \int_0^{\pi} d\theta \sin^2\theta = \frac{m\omega}{\hbar} x_0^2 \cdot \frac{\pi}{2}$$

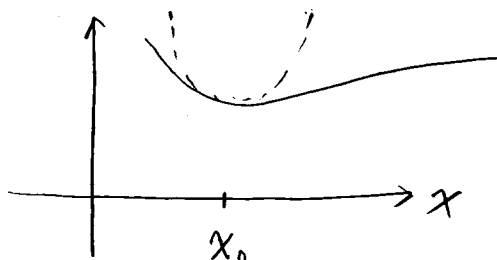
$$= \frac{\pi}{\hbar\omega} (V_0 - E)$$

3.8. 調和振動子ポテンシャル

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$



(note)



$$V(x) \sim V(x_0) + \frac{1}{2} V''(x_0) (x-x_0)^2 + \dots$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \phi(x) = E \phi(x)$$

• $x \rightarrow \pm\infty$ での解の様子:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \phi(x) \sim 0$$

$$\text{解: } \phi(x) \sim e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

$$\phi'(x) = -\frac{m\omega}{\hbar} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

$$\begin{aligned} \phi''(x) &= -\frac{m\omega}{\hbar} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} + \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x^2 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \\ &\sim \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x^2 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \end{aligned}$$

$$\Downarrow \quad \phi(x) = f(x) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \quad \text{と置いて } f(x) \text{ を求める。}$$

$$\rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} f'' + \hbar\omega x f' = \left(E - \frac{\hbar\omega}{2}\right) f$$

or $y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$

$$\rightarrow f'' - 2y f' + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 1\right) f(y) = 0$$

(note) エルミート多項式

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} + 2n\right) H_n(x) = 0$$

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx H_n(x) H_n'(x) e^{-x^2} = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{m,n}$$

$$H_0(x) = 1$$

$$H_1(x) = 2x$$

$$H_2(x) = 4x^2 - 2$$

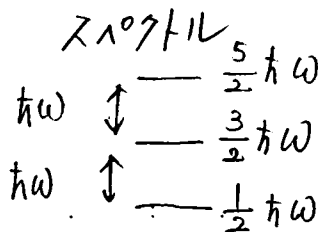
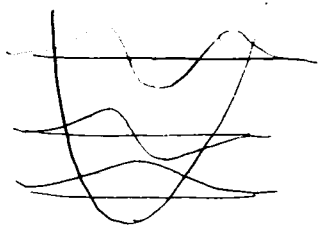
⋮

$$\rightarrow f(y) = H_n(y) \quad ; \quad \frac{2E}{\hbar\omega} - 1 = 2n$$

$$\rightarrow E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$

規格化まで含めると

$$\Phi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$



← ゼロ点, 振動力

(note) $f(y) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n y^n$

$$0 = f'' - 2y f' + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 1\right) f$$

$$= \sum_n n(n-1) C_n y^{n-2} - 2 \sum_n n C_n y^n + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 1\right) \sum_n C_n y^n$$

$$= \sum_n \left[(n+2)(n+1) C_{n+2} - 2n C_n + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 1\right) C_n \right] y^n$$

↓

$$(n+2)(n+1) C_{n+2} = \left(2n - \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 1\right)\right) C_n$$

↓

$$2n = \frac{2E}{\hbar\omega} - 1$$

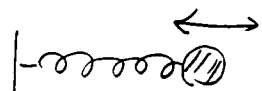
としない $C_{n+2} = 0$, $\& \psi^n$

$$C_k = 0 \quad (k > n+2)$$

としない y^n の和は途中で止まる。

→ 波動関数が発散しない。

(note) 「振動」 とは?



$$\Psi(x, t=0) = \phi_0(x) \rightarrow \Psi(x, t) = e^{-i\hbar\omega t/2\hbar} \phi_0(x)$$

$$\therefore \text{とき } \rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = |\phi_0(x)|^2$$

t に依らない → 「振動」 してない

$$\int_0^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

$$\Psi(x, 0) = \phi_0(x) + \alpha \phi_1(x) \quad (|\alpha| \ll 1)$$

$$\rightarrow \Psi(x, t) = e^{-i\omega t/2} \phi_0(x) + \alpha e^{-3i\omega t/2} \phi_1(x)$$

$$\begin{aligned} \therefore \text{おと} \quad |\Psi(x, t)|^2 &= |\phi_0(x)|^2 + \alpha^2 |\phi_1(x)|^2 \\ &\quad + \alpha (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \phi_0(x) \phi_1(x) \\ &\sim |\phi_0(x)|^2 + \underbrace{2\alpha \cos \omega t}_{\text{振動}} \phi_0(x) \phi_1(x) + O(\alpha^2) \end{aligned}$$

cf. 4.11 定理

$$\phi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

$$\phi_0'(x) = -\frac{m\omega}{\hbar} x \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

$$\rightarrow \left\langle \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right\rangle = \frac{m\omega^2}{2} \cdot \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} dx$$

$$= \frac{m\omega^2}{2} \frac{\sqrt{m\omega}}{\sqrt{\pi\hbar}} \cdot \frac{\hbar}{2m\omega} \frac{\sqrt{\pi\hbar}}{\sqrt{m\omega}} = \frac{1}{4} \hbar \omega$$

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{-\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi_0(x) \phi_0''(x) = \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx [\phi_0'(x)]^2$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} dx = \frac{1}{4} \hbar \omega$$

→

$$\langle T \rangle = \langle V \rangle = \frac{1}{4} \hbar \omega$$

$$\text{一般に} \quad \langle T \rangle = \frac{1}{2} \left\langle x \frac{dV}{dx} \right\rangle$$