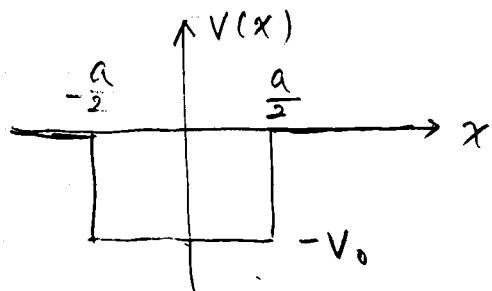


### 3.3. 有限井戸型ポテンシャル (束縛状態: $E < 0$ )



$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & (-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

(note)  $a$  場合も  $\psi$  は対称性あり

$$x < -\frac{a}{2} \text{ 及 } x > \frac{a}{2} \quad \tau'' \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) = E \phi(x)$$

$$\rightarrow \phi(x) \propto e^{\pm \kappa x}$$

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

$$-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \quad \tau'' \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) - V_0 \phi(x) = E \phi(x)$$

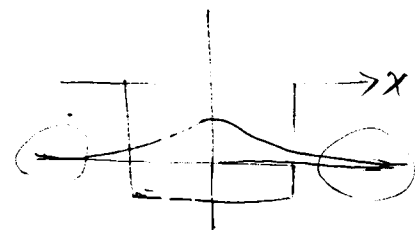
$$\rightarrow \phi(x) \propto e^{\pm i k' x}$$

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

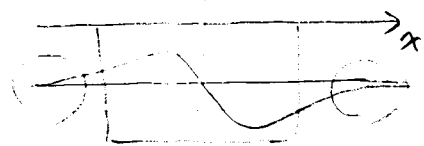
$$x \rightarrow \pm \infty \quad \tau' \quad \phi(x) \rightarrow 0$$

$\therefore$   $\psi$  は固有状態

$$\downarrow \quad \phi_+(x) = \begin{cases} A e^{+\kappa x} & (x < -\frac{a}{2}) \\ B \cos k' x & (-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}) \\ A e^{-\kappa x} & (x > \frac{a}{2}) \end{cases}$$



$$\phi_-(x) = \begin{cases} A' e^{+\kappa x} & (x < -\frac{a}{2}) \\ B' \sin k' x & (-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}) \\ -A' e^{-\kappa x} & (x > \frac{a}{2}) \end{cases}$$



接続条件: 
$$\begin{cases} \phi_{<}(\pm \frac{a}{2}) = \phi_{>}(\pm \frac{a}{2}) \\ \phi'_{<}(\pm \frac{a}{2}) = \phi'_{>}(\pm \frac{a}{2}) \end{cases}$$

$\phi(x)$  と  $\phi'(x)$  は境界で連続にならない

(note)

$$\phi'_{>}(b) - \phi'_{<}(b) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{b-\epsilon}^{b+\epsilon} dx \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2}$$

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{b-\epsilon}^{b+\epsilon} dx \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E) \phi(x)$$

↑  
シュレディンガー方程式

$$= 0 \quad (\text{もし } V(x) \text{ が有限であれば})$$

\* テルメ関数型ポテンシャルでは  
これが成り立たない。

\* 無限井戸型ポテンシャルでも。



$x = \frac{a}{2}$  での接続条件:

$$\begin{cases} A e^{-\frac{\kappa a}{2}} = B \cos \frac{k'a}{2} \\ -A \kappa e^{-\frac{\kappa a}{2}} = -B k' \sin \frac{k'a}{2} \end{cases}$$

(+ ノリテ)

$$\begin{cases} -A' e^{-\frac{\kappa a}{2}} = B' \sin \frac{k'a}{2} \\ A' \kappa e^{-\frac{\kappa a}{2}} = B' k' \cos \frac{k'a}{2} \end{cases}$$

(- ノリテ)

$$\rightarrow \kappa = k' \tan \frac{k'a}{2}$$

$$; \quad \kappa = -k' \cot \left( \frac{k'a}{2} \right)$$

(note)

$$\left(\frac{\kappa a}{2}\right)^2 = \frac{a^2}{4} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} (-E)$$

$$\left(\frac{\kappa' a}{2}\right)^2 = \frac{a^2}{4} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 + E) = \frac{ma^2}{2\hbar^2} V_0 - \left(\frac{\kappa a}{2}\right)^2$$

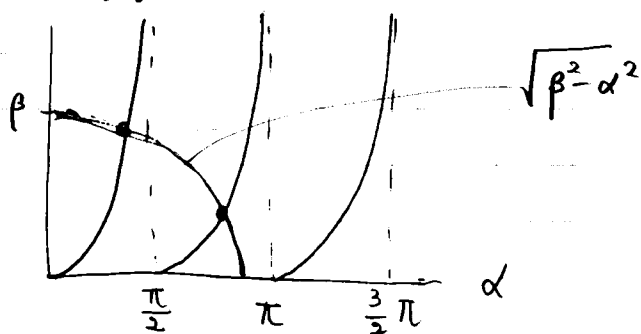
$$\frac{\kappa' a}{2} \tan \frac{\kappa' a}{2} = \frac{\kappa a}{2} = \sqrt{\frac{ma^2}{2\hbar^2} V_0 - \left(\frac{\kappa a}{2}\right)^2}$$

$$\text{or } \alpha \tan \alpha = \sqrt{\beta^2 - \alpha^2} \quad (+110^\circ \text{ or } \pi)$$

$$\left(\alpha = \frac{\kappa' a}{2}, \quad \beta^2 = \frac{ma^2}{2\hbar^2} V_0\right)$$

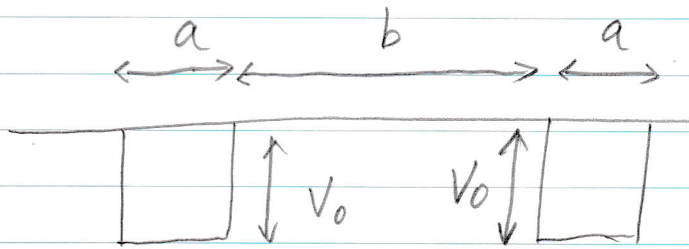
$$-\alpha \cot \alpha = \sqrt{\beta^2 - \alpha^2} \quad (-110^\circ \text{ or } \pi)$$

$\alpha \tan \alpha$      $-\alpha \cot \alpha$      $\alpha \tan \alpha$

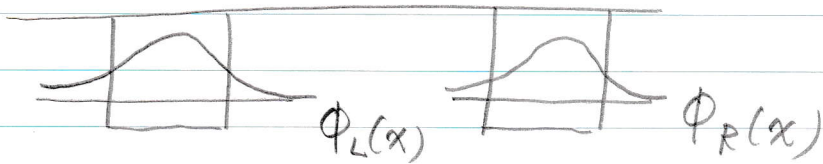


- 
- 最も1つの解 (束縛状態) がある
  - 束縛状態は有限個
  - $\beta$  が大きいほど解の個数は多.  
( $V_0$  : 大 and/or  $a$  : 大)
  - 無限井戸の場合よりエネルギーは下がる  
(運動エネルギーが下がる)

### 3.4. 2重井戸型ポテンシャル



$b$  が非常に大きければ 2つの井戸は独立



エネルギー  $E_1$  の 2つの状態が縮退

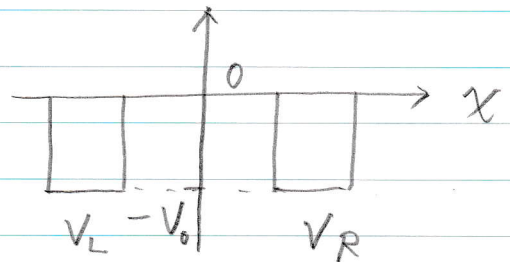
→  $b$  が小さいと縮退がとける



この 2つの波動関数を作ると

$$\phi_{\pm}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_L(x) \pm \phi_R(x))$$

$$H = T + \underbrace{V_L + V_R}_V$$



$$\begin{cases} (T + V_L) \phi_L = E_1 \phi_L \\ (T + V_R) \phi_R = E_1 \phi_R \end{cases}$$

$\frac{\langle \phi_{\pm} | H | \phi_{\pm} \rangle}{\langle \phi_{\pm} | \phi_{\pm} \rangle}$  を計算する。

$$\begin{aligned} \text{分母} &= \frac{1}{2} (\langle \phi_L | \phi_L \rangle + \langle \phi_R | \phi_R \rangle) \\ &\quad \pm \frac{1}{2} (\langle \phi_L | \phi_R \rangle + \langle \phi_R | \phi_L \rangle) \\ &= 1 \pm \langle \phi_L | \phi_R \rangle \end{aligned}$$

$\uparrow$   
 $\langle \phi_L | \phi_R \rangle = \langle \phi_R | \phi_L \rangle$

$$\begin{aligned} \text{分子} &= \frac{1}{2} (\langle \phi_L | H | \phi_L \rangle + \langle \phi_R | H | \phi_R \rangle) \\ &\quad \pm \frac{1}{2} (\langle \phi_L | H | \phi_R \rangle + \langle \phi_R | H | \phi_L \rangle) \end{aligned}$$

$$= \underbrace{\langle \phi_L | H | \phi_L \rangle}_{\parallel} \pm \underbrace{\langle \phi_L | H | \phi_R \rangle}_{\parallel}$$

$$\begin{array}{cc} \langle \phi_L | T + V_L | \phi_L \rangle & \langle \phi_L | T + V_R | \phi_R \rangle \\ + \langle \phi_L | V_R | \phi_L \rangle & + \langle \phi_L | V_L | \phi_R \rangle \\ \parallel & \parallel \end{array}$$

$$E_1 + \langle \phi_L | V_R | \phi_L \rangle \quad E_1 \langle \phi_L | \phi_R \rangle + \langle \phi_L | V_L | \phi_R \rangle$$

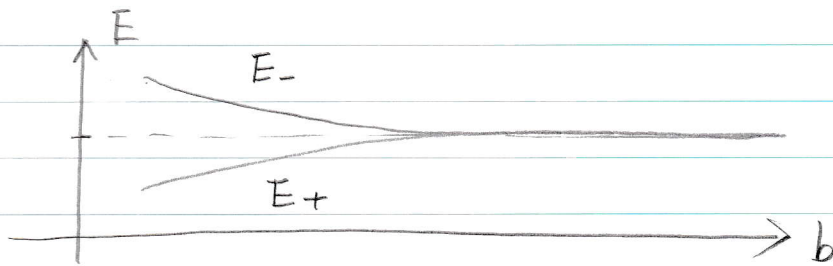
$$= E_1 (1 \pm \langle \phi_L | \phi_R \rangle) \pm \underbrace{\langle \phi_L | V_L | \phi_R \rangle}_{\int_0^b e^{-\kappa x} dx} + \underbrace{\langle \phi_L | V_R | \phi_L \rangle}_{\int_0^b e^{-\kappa x} dx}$$

$$\sim E_1 (1 \pm \langle \phi_L | \phi_R \rangle) \pm \langle \phi_L | V_L | \phi_R \rangle$$

$$\Downarrow E_{\pm} = \frac{\langle \phi_{\pm} | H | \phi_{\pm} \rangle}{\langle \phi_{\pm} | \phi_{\pm} \rangle}$$

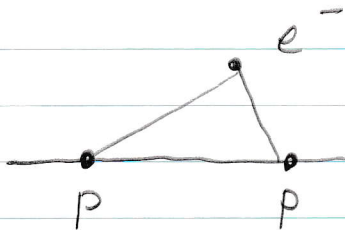
$$\sim E_1 + \frac{\pm \langle \phi_L | V_L | \phi_R \rangle}{1 \pm \langle \phi_L | \phi_R \rangle} \sim E_1 \pm \underbrace{\langle \phi_L | V_L | \phi_R \rangle}_{< 0}$$

↓ 基底状態 → + ハリテ,  $E = E_1 + \langle \phi_L | V_L | \phi_R \rangle$   
第1励起状態 → - ハリテ,  $E = E_1 - \langle \phi_L | V_L | \phi_R \rangle$



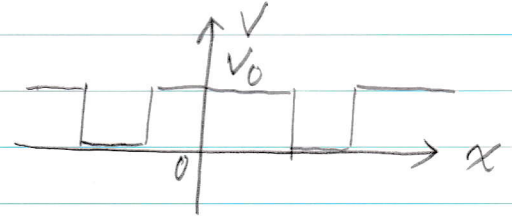
トンネル分離 (ダブルット)

(note) He<sup>+</sup> イオン



(補足) エネルギーの基準値が変わったらどうなるか?

$$H = T + \underbrace{V_L + V_R + V_0}_V$$



$$\begin{cases} (T + V_L + V_0) \phi_L = (E_1 + V_0) \phi_L \\ (T + V_R + V_0) \phi_R = (E_1 + V_R) \phi_R \end{cases}$$

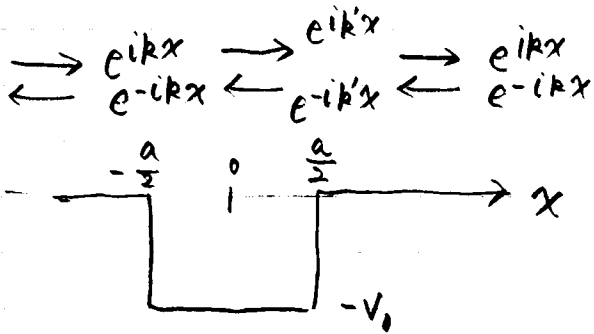
このT, 前の議論 T E<sub>1</sub> → E<sub>1</sub> + V<sub>0</sub> と  
なるT' T' よい。

すなわち

$$E_{\pm} = E_1 + V_0 \pm \underbrace{\langle \phi_L | V_L | \phi_R \rangle}_{< 0}$$

基底状態  
第一励起状態

### 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異なる解も存在するが、ここでは一般的に書く。

\* 束縛状態: 遠方では  $Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}$  のどちらかのみゼロ  $\rightarrow$  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

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

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



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

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

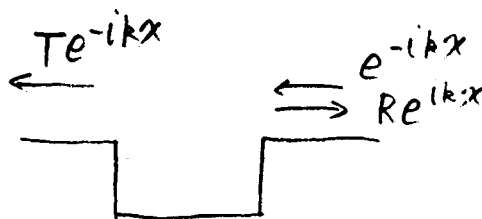
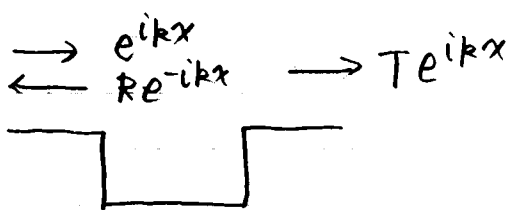
$\chi = \frac{a}{2}$  の接続条件

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

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:



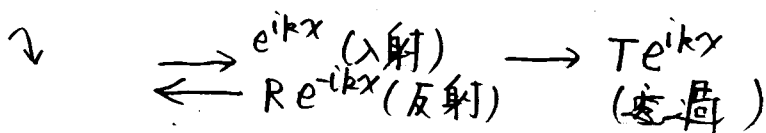
左から入射した波:  $\phi_L$

右から入射した波:  $\phi_R$

\*ポテンシャルがパリティ対称なら、 $R$  と  $T$  は  $\phi_L$  と  $\phi_R$  で同じ

フラックス:  $j(x) = \frac{\hbar}{2im} \left( \psi^*(x) \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right)$

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



T: 透過係数  
R: 反射係数

フラックスの保存:  
 $1 = |T|^2 + |R|^2$

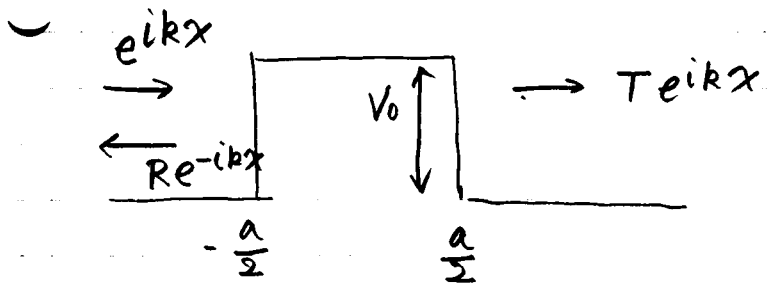
cf. 量子反射

井戸型ポテンシャルでは解析的に求まる

∴ a と 手

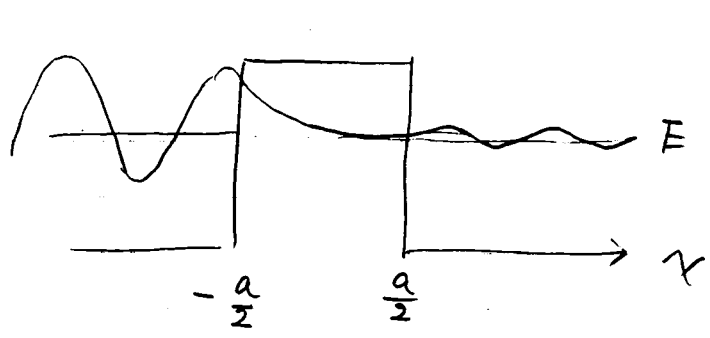
$$1 = \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| + \int_0^\infty dE |\phi_{E,L}\rangle \langle \phi_{E,L}| + \int_0^\infty dE |\phi_{E,R}\rangle \langle \phi_{E,R}|$$

3.7. ボーテ>シアル障壁と量子ト>礼現象



$E < V_0$   $T \neq 0$   $\Rightarrow$  「量子ト>礼現象」

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



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

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

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

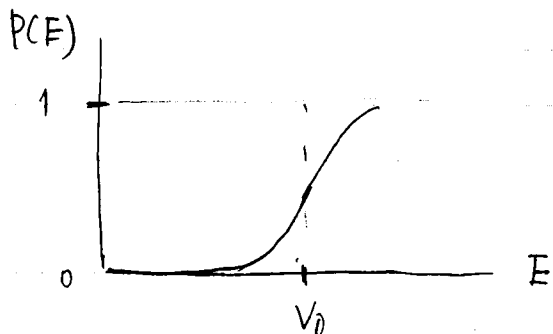
(note)  $V_0 \gg E$  のとき

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

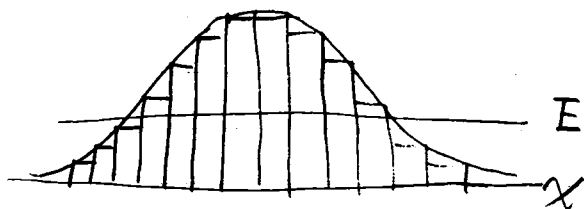
↓

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

指数関数



一般の障壁の場合 :



$$P(E) \sim \pi e^{-2\kappa_0 a} \sim e^{-2 \int_{\text{障壁}} dx \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E)}}$$

\* より詳しくは議論は WKB 近似の項に.