

9 一次元 potential 問題 (I)

[9.A] 有限のとびがある Potential 問題

時間に依らない 1 次元 Schrödinger 方程式

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

で、potential に有限のとびがある場合を考えよう。このとき、方程式から、波動関数の 2 階微分 $\psi''(x)$ に有限のとびがあるので、**波動関数、およびその一階微分 $\psi(x), \psi'(x)$ は連続**となる。また、波動関数全体にかかる係数は規格化などにより与えられるので、potential にとびのある点では、波動関数の対数微分

$$\frac{d}{dx} \log \psi(x) = \frac{\psi'(x)}{\psi(x)} \quad (9.1)$$

が連続、という条件を考えるのが便利である。

[9.B] パリティ

「一次元の束縛状態では縮退がない」、「ポテンシャルが偶関数 $V(-x) = V(x)$ であり、 $\varphi(x)$ がエネルギー E の定常状態ならば、 $\varphi(-x)$ もエネルギー E の定常状態である」という 2 つの性質を用いると、ポテンシャルが偶関数の場合に**束縛状態の波動関数は偶関数か奇関数のいずれかである**ことが分かる。このとき、 x を $-x$ に入れ換える演算子 $\hat{P}$ を**パリティ変換演算子** とよび、その固有値 (± 1) をその波動関数の**パリティ**と呼ぶ。すなわち、偶関数なら 1 (パリティは正)、奇関数なら -1 (パリティは負) である。

$$\hat{P} \varphi(x) = \varphi(-x) = \pm \varphi(x)$$

[9.1] (井戸型 potential I)

無限に深い一次元井戸型 potential (図 (A))

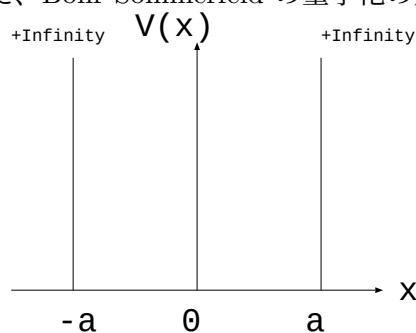
$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| \leq a \\ \infty & |x| > a \end{cases} \quad (9.2)$$

に対する Hamiltonian

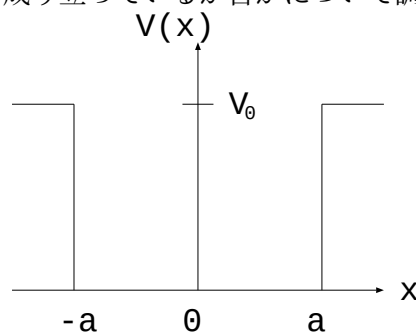
$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (9.3)$$

について、エネルギー固有値、および固有関数を求めよ。

また、Bohr-Sommerfeld の量子化の規則が成り立っているか否かについて調べよ。



(A)



(B)

[9.2] (井戸型 potential II)

次に、有限の深さを持つ 1 次元井戸型 potential (図 (B))

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| \leq a \\ V_0 & |x| > a \end{cases} \quad (9.4)$$

について、

- (1) 束縛状態 ($0 < E < V_0$ の固有状態) に対する固有値および固有関数を求めよ。ただし、固有値をあらわに求めることは出来ないで、エネルギー固有値の満たす方程式を求め、 V_0 に応じて幾つの固有状態が許されるか答えよ。
- (2) $V_0 \rightarrow \infty$ の極限で、前の問題の答えと一致していることを確かめよ。
- (3) 束縛状態の波動関数のおおよその形を図示せよ。また、エネルギーが n 番目に低い状態の波動関数は、 x の偶関数か、あるいは奇関数かしらべよ。 $(x \rightarrow -x$ とする変換を parity 変換とよぶ。)

[9.3] (透過率と反射率)

質量 m の粒子に対する 1 次元 potential 問題を考える。ただし、potential $V(x)$ は $x \rightarrow \pm\infty$ で十分速く一定値 V_+, V_- にそれぞれ近づくものとする。エネルギー固有値 E にたいする時間によらない Schrödinger 方程式の固有関数の漸近的ふるまいが、

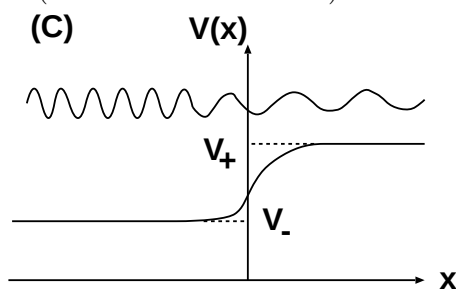
$$\begin{aligned} \psi(x) &\sim e^{ik_-x} + Ae^{-ik_-x} & x \rightarrow -\infty \\ \psi(x) &\sim Be^{ik_+x} & x \rightarrow +\infty \end{aligned} \quad (9.5)$$

となる場合を考える。ただし、 $k_{\pm} = \sqrt{2m(E - V_{\pm})}/\hbar$ である。

このとき、

$$R = |A|^2, \quad T = \frac{k_+}{k_-}|B|^2, \quad (9.6)$$

で定義される R, T が、それぞれ $x = -\infty$ から $+x$ 方向に入射してきた粒子が potential によって反射、あるいは potential を透過する確率 (反射率、および透過率) という意味を持つことを説明せよ。(流れの密度を考えよ。)



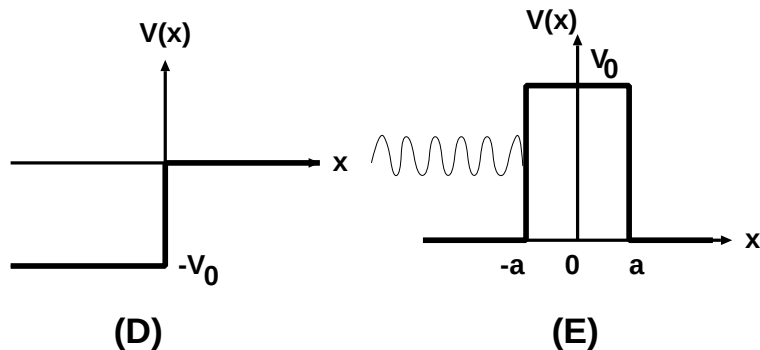
[9.4] (金属中の電子)

金属中の電子はおおよそ次のような potential を受けていると考えてよい。(図 (D))

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x > 0 \\ -V_0 & x \leq 0 \end{cases} \quad (9.7)$$

- (1) この金属で、正のエネルギー $E(> 0)$ を持った電子が potential の壁を越えて金属外 ($x > 0$) に出る確率 T (透過率)、および反射されて金属内に戻る確率 R (反射率) を求めよ。ただし、 $x = -\infty$ から電子が入射している境界条件の下で考えよ。
- (2) 古典力学ではこの透過率と反射率はいくらになるか?
- (3) $E < 0$ の場合に同じ問題を考えよ。

(4) $T + R = 1$ を示せ。



[9.5] (Tunnel 効果)

次のような potential を考える。(図 (E))

$$V(x) = \begin{cases} V_0 (> 0) & |x| \leq a \\ 0 & |x| > a \end{cases} \quad (9.8)$$

- (1) $x = -\infty$ から $+x$ 方向にエネルギー E で入射する質量 m の粒子がこの potential を透過する確率、および反射する確率を $E > V_0, 0 < E < V_0$ のそれぞれの場合に求めよ。
- (2) 古典力学の場合に、透過率、反射率はどうなるか?
- (3) $E > V_0$ の場合に、完全透過 ($T = 1$) の起こるエネルギーを求め、その波動論的な意味を考えよ。

[9.6] (delta 型 potential の束縛状態)

次のような δ 関数型 potential のもとで質量 m の粒子が運動している場合に、束縛状態の固有値および、固有関数を求めよ。

$$V(x) = -S\delta(x), \quad S > 0 \quad (9.9)$$

(ヒント: Schrödinger 方程式を $-\epsilon < x < \epsilon$ で積分して、 $\epsilon \rightarrow 0$ の極限をとり、 $x = 0$ における $d\psi/dx$ の接続条件を定めよ。)

[9.7] (phase shift*)

前問で $E \gg V_0$ の場合を考える。 $x \rightarrow +\infty$ の波動関数を

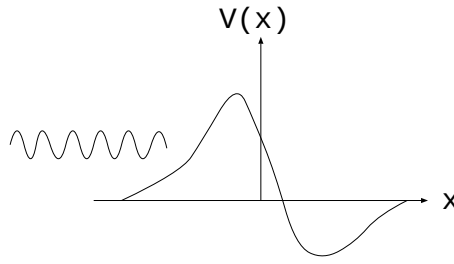
$$\psi(x) = \sqrt{T} e^{i(kx+\delta)} \quad (9.10)$$

とあらわすとき、 δ を phase shift (位相のずれ) と呼ぶ。

- (1) V_0 の符号で δ の符号が決まることを示せ。またその直観的な説明を与えよ。
- (2) 時間の次元をもつ量 $\frac{1}{v_g} \frac{d\delta(k)}{dk}$ に対する古典的な対応物を考えよ。ただし、 k および v_g は、それぞれ入射波の波数 $p/\hbar$ および群速度である。

[9.8] (逆向きの運動の透過率・反射率*)

下図のような $x \rightarrow \pm\infty$ で十分速く 0 に近づく任意の形の potential に対して、 $x = -\infty$ から入射した粒子の透過率、反射率は $x = +\infty$ から入射した粒子の透過率、反射率に等しいことを示せ。(ロンスキアンの利用が便利である。)



[9.9] (delta 型 potential での散乱*)

式 (9.9) であたえられる δ 関数型 potential がある。 $x = -\infty$ から $+x$ 方向に運動量 $p = \hbar k$ で入射する質量 m の粒子について、反射率、透過率、および phase shift を求めよ。

[9.10] (周期的ポテンシャル*)

周期的な性質をもつ一次元ポテンシャル $V(x) = V(x+a)$ 中を運動する質量 m の粒子を考える。

- (1) 次の演算子が粒子の位置を平行移動する演算子であることを示せ。

$$\hat{U} = \exp\left(\frac{i\hat{p}a}{\hbar}\right) = \exp\left(a\frac{\partial}{\partial x}\right), \quad \hat{U}\varphi(x) = \varphi(x+a). \quad (9.11)$$

- (2) $\hat{U}$ が $V(x)$ と交換することを示せ。

$$\hat{U}(V(x)\varphi(x)) = V(x)\hat{U}\varphi(x). \quad (9.12)$$

- (3) $\hat{U}$ がハミルトニアンと交換することを示せ。

- (4) 前問より $\hat{U}$ は保存量であり、エネルギー固有状態を $\hat{U}$ との同時固有状態にとれる。 $\hat{U}$ の固有値が $\exp(i\theta)$ (θ は実数) と表せることを示せ。

- (5) 以上のことを用いて、エネルギー固有状態 $\varphi_E(x)$ が位相を除いて周期的となること

$$\varphi_E(x+a) = \exp(i\theta_E)\varphi_E(x) \quad (9.13)$$

を示せ。(Bloch の定理)

[9.11] (周期的ポテンシャルでのエネルギーバンド*)

周期的な一次元ポテンシャル $V(x)$ 中を質量 m の粒子が運動している。

$$V(x) = \frac{\hbar^2\gamma}{ma} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x+na) \quad (9.14)$$

ここで a は格子間隔である。

- (1) $x = a$ における接続条件を示せ。

- (2) $0 < x < a$ での波動関数を

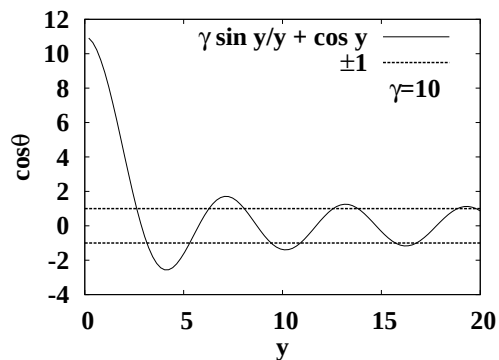
$$\varphi(x) = A\exp(ikx) + B\exp(-ikx)$$

とする。Bloch の定理と $x = a$ での接続条件を用いて、 A, B が非自明な解をもつ条件が

$$\cos\theta = \gamma \frac{\sin y}{y} + \cos y \quad (y = ka)$$

と表されることを示せ。

(3) 許されるエネルギーの領域がバンド構造を持つことを示せ。



[9.12] (非対称井戸型ポテンシャル*)

図に表される有限の深さを持つ 1 次元非対称井戸型 potential

$$V(x) = \begin{cases} V_2 & x < 0 \\ 0 & 0 \leq x \leq a \\ V_1 & x > a \end{cases} \quad (9.15)$$

の中を運動する質量 m の粒子を考える。(ただし、 $V_2 > V_1 > 0$ とする。)

このポテンシャルで束縛状態が少なくとも一つ存在するための V_1, V_2 に対する条件を求めよ。

(ヒント: $0 \leq x \leq a$ での波動関数を $A \sin(kx + \phi)$, ($k = \sqrt{2mE}/\hbar$) とおき、 $\arctan$ を用いて ϕ を消去せよ。このとき、 $\arctan$ には $n\pi$ の違いが許されることに注意する。)

