情報系の物理学レポート４

学籍番号:g99p0417
氏名:川口克則

出題日:2000/11/8
提出期限日:2000/11/22
提出日:2000/11/22

1　問題

ポテンシャル $V(x)$ が以下で示される井戸型ポテンシャルであり、
$V_0 > E$ 、 $u(x)$ は奇関数である。このとき定常的シュレーディンガー方程式を解け。

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & (x < -a) \\ 0 & (-a \leq x \leq a) \\ V_0 & (a < x) \end{cases}$$

また、束縛条件 $V_0 > E$ 　におけるシュレーディンガー方程式は、

$$V_0 u(x) + -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial u(x)}{\partial x^2} = Eu(x) \quad (|x| \leq 0)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial u(x)}{\partial x^2} = Eu(x) \quad (|x| > 0)$$

である。

2　解答 その1

問題の解法 その1

授業でやった通り、問題の条件では、

$$u(x) = \begin{cases} De^{Kx} & (x < -a) \\ A\sin(kx) + B\cos(kx) & (-a < x < a) \\ Ce^{-Kx} & (a < x) \end{cases}$$

となる。

u(x) は奇関数なので、

$$u(-x) = -u(x)$$

より、

$$B = 0, C = -D$$

$$u(x) = \begin{cases} -Ce^{Kx} & (x < -a) \\ A\sin(kx) & (-a < x < a) \\ Ce^{-Kx} & (a < x) \end{cases}$$

となる。

$x=a,-a$ で u, du/dx が連続なので、
$x=a$ のとき

$$A\sin(ka)=Ce^{-Ka}$$

$$Ak\cos(ka)=-KCe^{-Ka}$$

より、

$$A=\frac{Ce^{-Kx}}{\sin(ka)}$$

となる。
ここで、K , k , C を勝手にとって Mathematica に入力し、
グラフを作成する。

Mathematica への入力 その 1

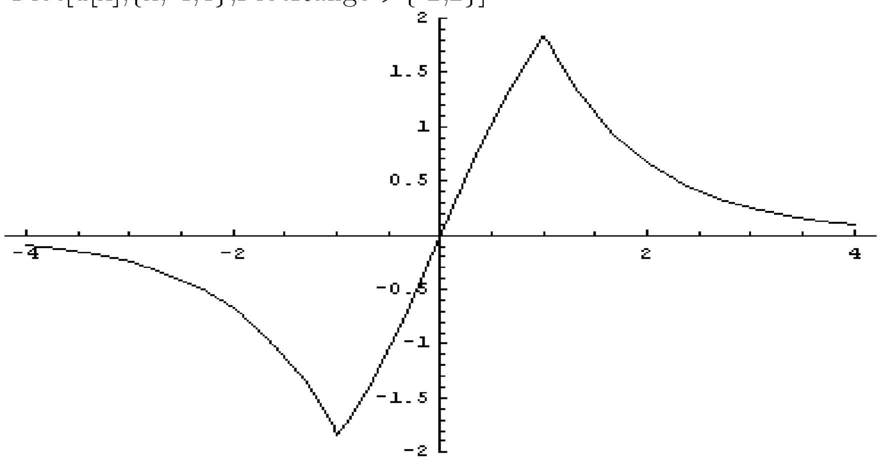
$$K:=1;k:=1;C:=10;A:=\frac{C*e^{-K*x}}{Sin[k*a]}$$

$$u1[x\_]:=-C*e^{K*x};u2[x\_]:=A*Sin[k*x];u3[x\_]:=C*e^{-K*x}$$

$$u[x\_]:=if[x<a,u1[x],if[x>a,u3[x],u2[x]]]$$

出力されたグラフ その 1

Plot[u[x],{x,-4,4},PlotRange->{-2,2}]



3　解答 その2

解答その1の考察

解答その1で求めたグラフは $a=1$ で明らかに連続ではない。
これは、 K , k , C を勝手に取ったため、
つまり、束縛条件を無視しているからである。

解答その2では、束縛条件を元に、正しい $u(x)$ のグラフを調べてみる。

問題の解法 その2

問題その1で求めた式より、

$$-K = k\tan^{-1}(ka)$$

$$-Ka = ka\tan^{-1}(ka)$$

となる。また、

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, V_0 - E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$$

であるから、

$$(ka)^2 + (Ka)^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}$$

となる。$ka>0$, $Ka>0$ としてこれを解くと

$$n\pi > \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}} > \left(n-\frac{1}{2}\right)\pi \quad (n=1,2,3,...)$$

この式を Mathematica に与え、K , k , C を求めてグラフを作成する。

Mathematica への入力 その 2

$$m := 1; V0 := 5; a := 1; h := 1; n := 1; A := 1$$

$$r := sqrt[\frac{2*m*V0*a^2}{h^2}]; x0 := 2 + \pi * (n-1)$$

$$Z := FindRoot[sqrt[r^2 - x^2] == -\frac{x}{Tan[x]}, x, x0]$$

$$k := Last[Z[[1]]]; K := -\frac{k*a}{Tan[k*a]}$$

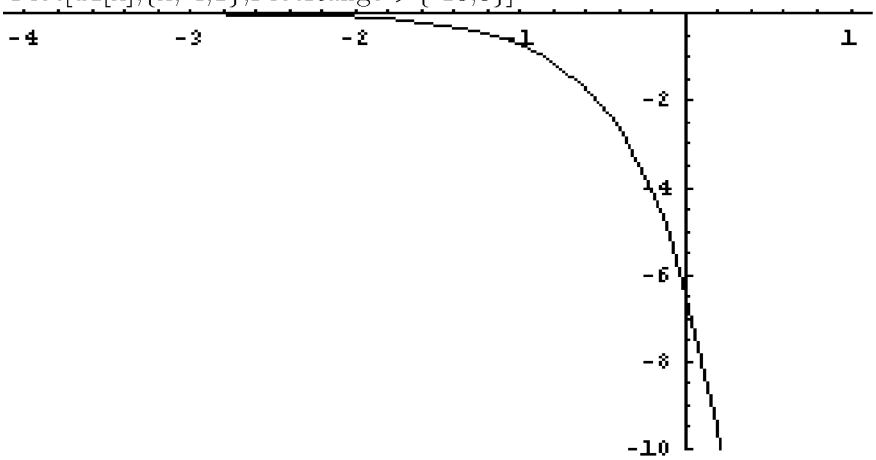
$$C := \frac{A*Sin[k*a]}{e^{-K*x}}$$

$$u1[x\_] := -C*e^{K*x}; u2[x\_] := A*Sin[k*x]; u3[x\_] := C*e^{-K*x}$$

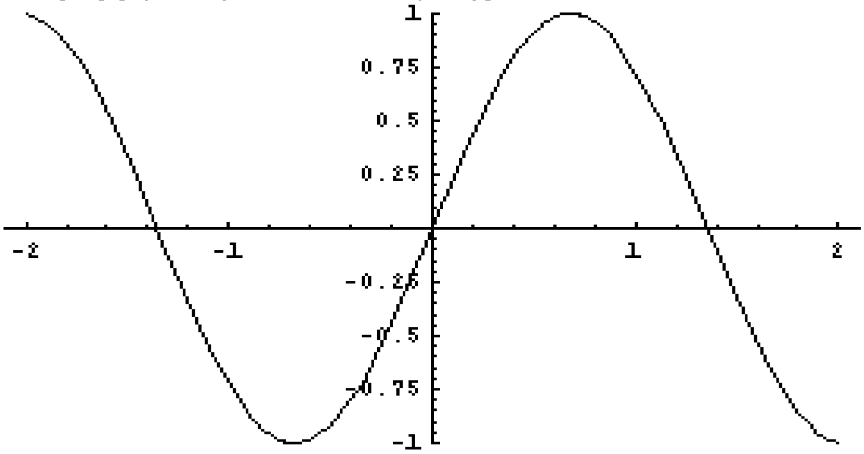
$$u[x\_] := if[x < a, u1[x], if[x > a, u3[x], u2[x]]]$$

出力されたグラフ その 2

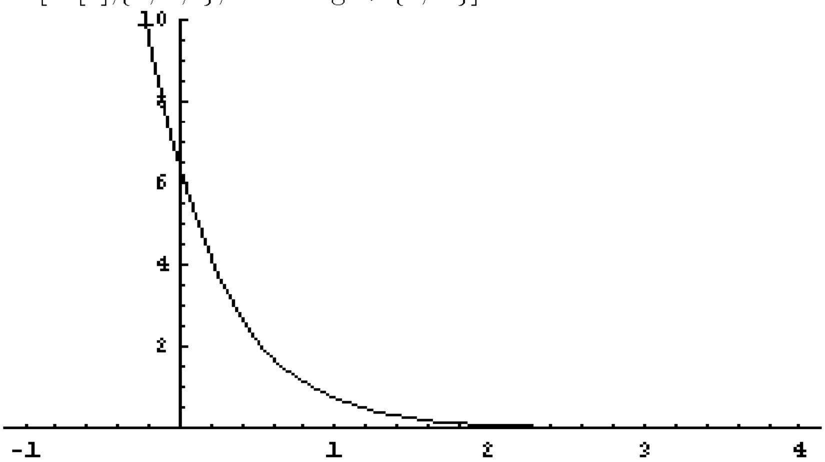
Plot[u1[x],{x,-4,1},PlotRange->{-10,0}]



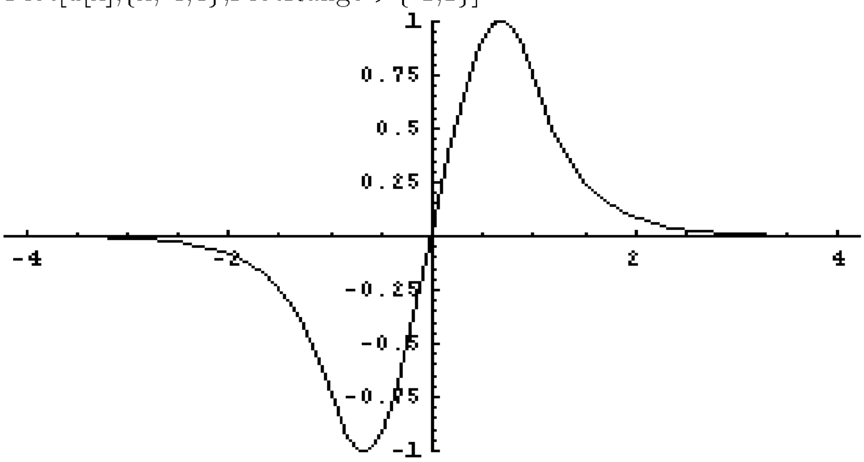
Plot[u2[x],{x,-2,2},PlotRange->{-1,1}]



Plot[u3[x],{x,-1,4},PlotRange->{0,10}]



Plot[u[x],{x,-4,4},PlotRange->{-1,1}]



4　考察、感想

解答その１では、式をとりあえず解いてみて、等のパラメータを勝手に決めてグラフを描いてみた。しかし、連続となるはずの x=a で見事に鋭角的なグラフが表示されてしまい、その原因を理工学部図書館で調べた。シュレーディンガー方程式に触れた本は数多くあったが、どうにか正解に辿り着くことができた。それが、解答その２である。結果、グラフは綺麗に表示された。

今回もいつも道り２人で作業しました。相棒が誰かは、レポートを見ればわかると思います。彼とは中学以来のつきあいで、とても良い友人です。これからもお互いに相手を甘やかすことなく、鍛え合っていきたいですね。一人でやってもいいんですが、まぁ、旅は多い方が楽しいんで。

今回のレポートは、今までに比べて３倍ぐらいの時間がかかっていると思います。疲れましたが、時間をかけた分理解度も深いと思われます。また、今回はいつものレポートよりフォントのサイズが大きくなっていますが、とくに意味はありません。