情報系の物理学 レポート 第4回

G99P057-3 斎藤卓也

出題日:　2000-11-08
提出期限:2000-11-22
提出日:　2000-11-14

1 (a) 問題

$V_0 > E$ の場合の定常的シュレーディンガー方程式を $u(x)$ が奇関数として解け。また、$u(x)$ を図示せよ。

2 (b) 問題の解析

授業より、井戸型ポテンシャルで、

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

の時、

$$u(x) = \begin{cases} De^{\kappa x} & (x < -a) \\ A\sin kx + B\cos kx & (-a < x < a) \\ Ce^{-\kappa x} & (x > a) \end{cases} \tag{1}$$

となる。

u(x) が奇関数であることから、

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

また、式 (1) とから、

$$u(x) = \begin{cases} -Ce^{\kappa x} & (x < -a) \\ A\sin kx & (-a < x < a) \\ Ce^{-\kappa x} & (x > a) \end{cases} \tag{2}$$

を得る。

また、境界条件より、$x = -a, a$ で $u(x)$ 及び $\frac{du}{dx}$ が連続であることから、$x = a$ とすると、

$$Ce^{-\kappa a} = A\sin ka \tag{3}$$

$$-\kappa Ce^{-\kappa a} = Ak\cos ka \tag{4}$$

$$\frac{式 (4)}{式 (3)}$$

より、

$$\kappa a = -ka\frac{1}{\tan ka} \tag{5}$$

を得る。また、

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{6}$$

$$V_0 - E = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \tag{7}$$

であるから、式 (6) と式 (7) より、

$$(ka)^2 + (\kappa a)^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \tag{8}$$

を得る。ここで、

$$\xi = ka$$

$$\eta = \kappa a$$

と置くと、式 (5) は

$$\eta = -\xi\frac{1}{\tan \xi} \tag{9}$$

となり、また、式 (8) は

$$\xi^2 + \eta^2 = 一定 \tag{10}$$

となる。

3 (c) Mathematicaでの解

まず、$u(x)$ のグラフを描く。

ここでは、$k = 1, \kappa = 1, a = \frac{3\pi}{4}, A = 1$ とする。この時、境界条件式 (6) 及び式 (7) より

$$C = \frac{A \sin ka}{e^{-\kappa a}} \tag{11}$$

$$C = \frac{Ak \cos ka}{-\kappa e^{-\kappa a}} \tag{12}$$

であるので、これから C の値は求めることにする。今、$k = 1, \kappa = 1, a = \frac{3\pi}{4}$ としているから、この 2 式の右辺は同じ値になる。そこで、

$$C = \frac{A \sin ka}{e^{-\kappa a}}$$

から C を求めることにする。

上記の内容を Mathematica に入力し、$u(x)$ を計算し、図示させると以下のようになる。

3.1 Mathematicaでの入力

$\mathtt{k} := 1$

$\kappa := 1$

$\mathtt{a} := \frac{3\pi}{4}$

$\mathtt{A} := 1$

$\mathtt{C2} := \mathtt{A} * \frac{\mathtt{Sin}[\mathtt{k} * \mathtt{a}]}{\mathtt{e}^{\kappa * \mathtt{a}}}$

$\mathtt{u}[\mathtt{x}] := \mathtt{If}[\mathtt{x} < -\mathtt{a}, -\mathtt{C2} * \mathtt{e}^{\kappa * \mathtt{x}}, \mathtt{If}[\mathtt{x} < \mathtt{a}, \mathtt{A} * \mathtt{Sin}[\mathtt{k} * \mathtt{x}], \mathtt{c2} * \mathtt{e}^{-\kappa * \mathtt{x}}]]$

$\mathtt{Plot}[\mathtt{u}[\mathtt{x}], \{\mathtt{x}, -2\pi, 2\pi\}, \mathtt{PlotRange} \to \mathtt{All}]$

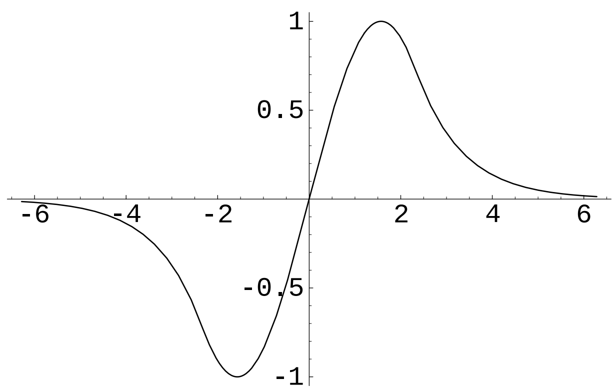

図 1: $u(x)$ のグラフ

また、式 (9) と式 (10) のグラフは、以下のようになり、この交点が式の取り得る値になる。

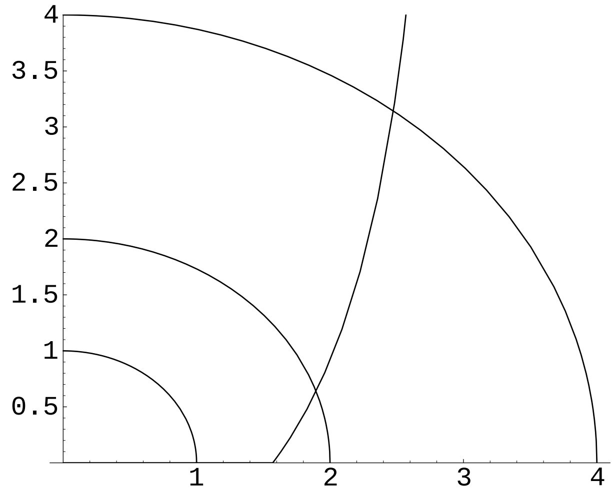

図 2: 式 (9), 式 (10) のグラフ