

情報系の物理学 演習4

G99P043-4

河邊昌彦

出題日:2000年11月8日

提出期限:2000年11月22日

提出日:2000年11月14日

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るとき、定常的シュレディンガー方程式を解け。ただし、 $V_0 > E$ とし、 $u(x)$ は奇関数とする。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + V(x)u(x) = Eu(x) \quad (1)$$

$$V(x) = \begin{cases} V_0 (> 0) & (x < -a) \\ 0 & (-a < x < a) \\ V_0 & (x > a) \end{cases} \quad (2)$$

2 解答

定常的シュレディンガー方程式は以下のようになる。

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} = Eu(x) & (|x| < a) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + V_0 u(x) = Eu(x) & (|x| > a) \end{cases} \quad (3)$$

$|x| < a$ のときは、 $E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m}$ とすると

$$-\frac{d^2 u}{dx^2} = k^2 u \quad (4)$$

$$u(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad (5)$$

$|x| > a$ のときは、 $V_0 - E = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}$ ($\kappa > 0$) とすると

$$\frac{d^2 u}{dx^2} = \kappa^2 u \quad (6)$$

$$u(x) = C e^{-\kappa x} \quad (7)$$

規格化条件より

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1 \quad (8)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |u(x)v(t)|^2 dx \quad (9)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} |u(x)|^2 |e^{-\frac{iEt}{\hbar}}|^2 dx \quad (10)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} |u(x)|^2 dx \quad (11)$$

$u(x)$ は奇関数であり、連続であることを考慮して整理すると、

$$u(x) = \begin{cases} D e^{\kappa x} & (x < -a) \\ A \sin kx & (-a < x < a) \\ -D e^{-\kappa x} & (a < x) \end{cases} \quad (12)$$

ただし

$$-De^{-\kappa a} = A \sin ka \quad (13)$$

$$\kappa De^{-\kappa a} = Ak \cos ka \quad (14)$$

$$E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} \quad (15)$$

$$V_0 - E = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \quad (16)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u(x)|^2 dx = 1 \quad (17)$$

これを解くと

$$\kappa a = -\frac{1}{\tan ka} ka \quad (18)$$

$$\left(\frac{\sin ka}{ka}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{2mV_0 a^2} \quad (19)$$

$$D = -Ae^{\kappa a} \sin ka \quad (20)$$

$$A^2 = \left(\frac{1}{\kappa} \sin^2 ka + a - \frac{1}{2k} \sin 2ka\right)^{-1} \quad (21)$$

(18) で $\kappa a > 0$, $ka > 0$ より $\tan ka < 0$ なので

$$ka \in \bigcup_{n=0}^{\infty} \left(\pi n + \frac{\pi}{2}, \pi n + \pi\right) \quad (22)$$

(19) の左辺は ka を変数とみるとシンク関数の 2 乗であり、 $\left(\frac{1}{ka}\right)^2$ で押さえられている。

$$\left(\frac{1}{ka}\right)^2 \geq \left(\frac{\sin ka}{ka}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{2mV_0 a^2} \quad (23)$$

$$k \leq \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} \quad (24)$$

適当な定数の値で (24) の範囲における、(19) の (左辺) - (右辺) をプロットすると図 1 のようになる。図 1 から分かるように (19) の解となる k は有限個しかない。

$\left(\frac{\sin ka}{ka}\right)^2$ の周期が $\frac{\pi}{a}$ であるということと、(22) の条件から (19) の解 k_n は

$$k_{0_n} = \left(\frac{3}{4} + n\right) \cdot \frac{\pi}{a} \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (25)$$

付近にあることが分かる。また、(24) と (25) から n の範囲は

$$0 \leq n \leq \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} \cdot \frac{a}{\pi} - \frac{3}{4} \quad (26)$$

となる。よって、各 k_{0_n} を始点としてニュートン法を用いることで k_n を求めることができる。

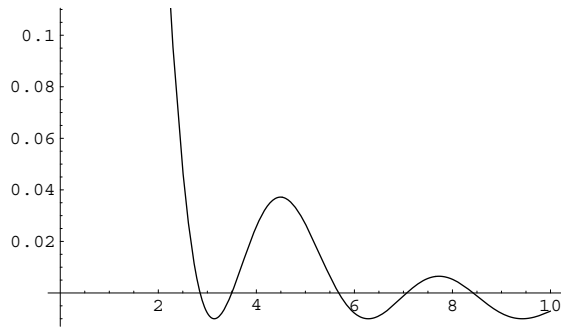


図 1: $f(x) = \left(\frac{\sin x}{x}\right)^2 - 0.01$ ($0 < x < 10$)

3 例

3.1 原子スケールの場合

原子サイズの空間に電子を 600V の電氣的な壁で閉じ込めた場合を考える。

$$\begin{aligned} a &= 1 \times 10^{-10} \\ V_0 &= 600 \text{ [eV]} = 600 \times 1.60 \times 10^{-19} \text{ [J]} \\ m &= 9.1 \times 10^{-31} \end{aligned}$$

図 2 より、 k は 4 個存在することがわかる。

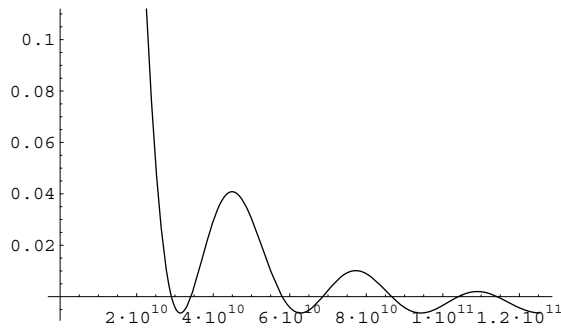


図 2: (19) のグラフ

$u_n(x)$ におけるエネルギー E_n と、 $|x| > a$ の確率 P_n は

$$\begin{aligned} E_0 &= 5.16573 \times 10^{-18} & P_0 &= 0.00407894 \\ E_1 &= 2.05702 \times 10^{-17} & P_1 &= 0.0176938 \\ E_2 &= 4.58472 \times 10^{-17} & P_2 &= 0.0474754 \\ E_3 &= 7.96989 \times 10^{-17} & P_3 &= 0.134651 \end{aligned}$$

となる。
存在確率は

$$|\psi(x, t)|^2 = (u(x))^2$$

である。

$u_n(x)$ の各グラフの y 軸は $x = -a$ のところに描かれているので、それより左がトンネル効果によって壁の外に出ている部分である。

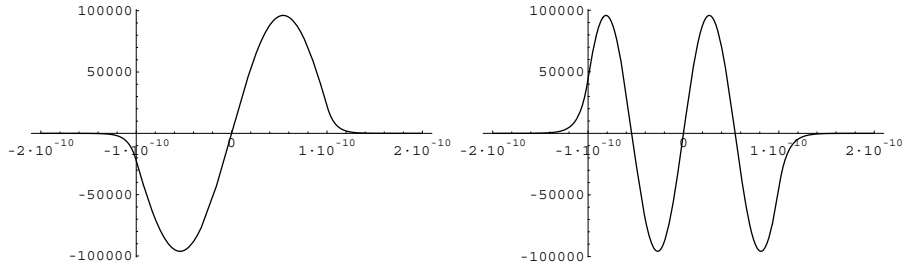


図 3: $u_0(x)$

図 4: $u_1(x)$

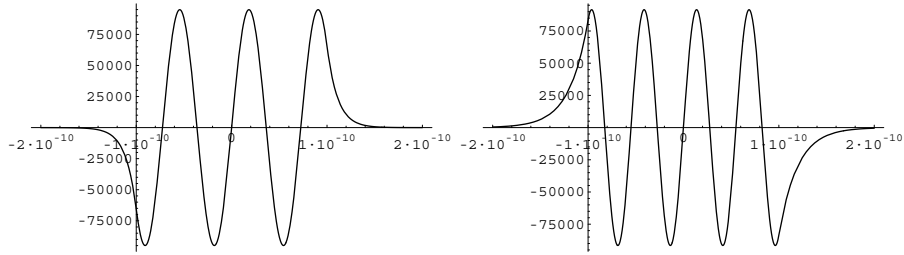


図 5: $u_2(x)$

図 6: $u_3(x)$

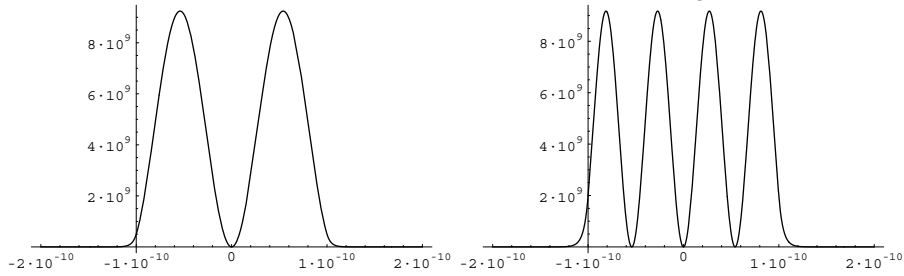


図 7: $(u_2(x))^2$

図 8: $(u_1(x))^2$

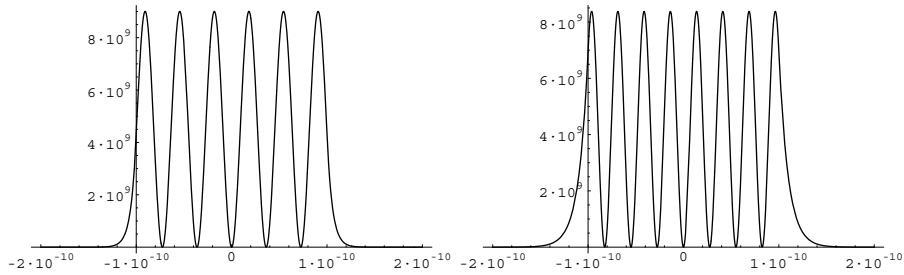


図 9: $(u_2(x))^2$

図 10: $(u_3(x))^2$

3.2 原子核スケールの場合

原子核サイズの空間に中性子を 3GeV のエネルギーで閉じ込めた場合を考える。

$$a = 0.5 \times 10^{-15}$$

$$V_0 = 3 [\text{GeV}] = 3 \times 10^9 \times 1.60 \times 10^{-19} [\text{J}]$$

$$m = 1.0086 \times 10^{-27}$$

図 11 より、 k は 2 個存在することがわかる。

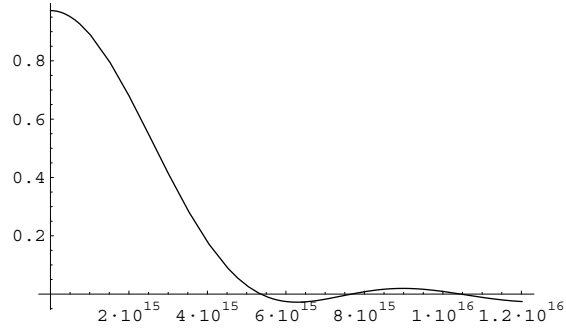


図 11: (19) のグラフ

E_n と P_n は

$$E_0 = 9.53873 \times 10^{-11} \quad P_0 = 0.0311452$$

$$E_1 = 3.6316 \times 10^{-11} \quad P_1 = 0.190788$$

となる。

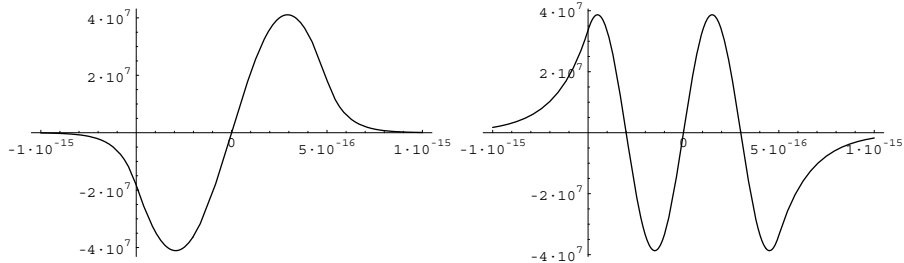


図 12: $u_0(x)$

図 13: $u_1(x)$

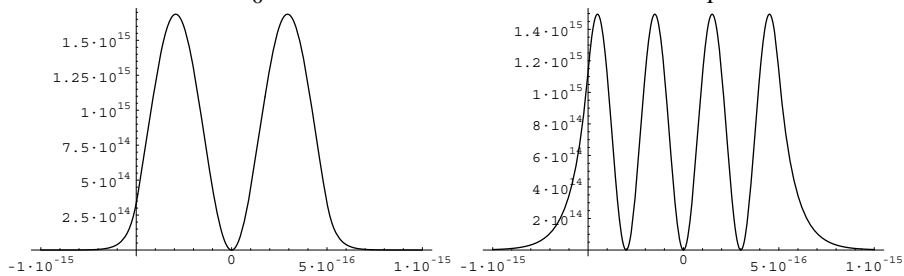


図 14: $(u_0(x))^2$

図 15: $(u_1(x))^2$

3.3 マクロスケールの場合

ボールを $1m$ の穴の中に入れた場合を考える。

$$\begin{aligned}a &= 0.5 \\V_0 &= mgh = 0.98 \\m &= 0.1\end{aligned}$$

n の範囲は

$$0 \leq n \leq n_{max} = 668136301274782265156496911237120$$

と、非常に広い。
各係数の値は、

$$\begin{aligned}k_{n_{max}} &= 4.19802 \times 10^{33} \\K_{n_{max}} &= 3.74075 \times 10^{33}\end{aligned}$$

であり、 $u(x)$ は $|x| > a$ では非常に早く減衰し、 $|x| < a$ では非常に高い角速度で振動する。よって、存在確率は穴の中では一定、外では0とみなすことができる。

4 結論

マクロスケールにおいては古典力学同様、持っているエネルギー以上のポテンシャルの壁を越えることはほぼ不可能であるが、ミクロスケールでは壁を越える確率は全くないわけではない。実際、 α 崩壊はこのようにして α 粒子が核力の壁を越えることで起こる。

5 Mathematica での例

グラフの描写等に使った、*Mathematica* の関数は以下の通りである。 a, V_0, m を与えると、 E_n と P_n を求め、 $u_n(x)$ と $(u_n(x))^2$ のグラフを描くようになっている。

```
func[a_, V0_, m_] := Module[
  {h, kmax, k0, f, k, n, d, A, u, e, p},

  h = 6.626176*10^-34/(2*Pi);
  kmax = (2*m*V0)^(1/2)/h;
  k0[n_] := (3/8 + 1/4*n^2)*2*Pi/a;
  nmax = Floor[n] /. Solve[k0[n] == kmax, n][[1]];
  f[x_] := (Sin[x*a]/(x*a))^2 - h^2/(2*m*V0*a^2);
  k[n_] := x /. FindRoot[f[x], {x, k0[n]}][[1]];
  n[n_] := -k[n]/Tan[k[n]*a];
  d[n_] := -A[n]*Exp[-k[n]*a/Tan[k[n]*a]]*Sin[k[n]*a];
  A[n_] := (Sin[k[n]*a]^2/((n[n]*a - Sin[2*k[n]*a]/(2*k[n]))^(-1/2));
  u[n_][x_ /; x < -a] := d[n]*Exp[n[n]*x];
  u[n_][x_ /; -a <= x <= a] := A[n]*Sin[k[n]*x];
  u[n_][x_ /; a < x] := -d[n]*Exp[-n[n]*x];
  e[n_] := h^2*k[n]^2/(2*m);
  p[n_] := d[n]^2/((n[n]*a)*Exp[-2*n[n]*a]);

  Plot[f[x], {x, 0, kmax}];
  Print["E=" <> ToString[Table[e[i], {i, 0, nmax}]]];
  Print["P=" <> ToString[Table[p[i], {i, 0, nmax}]]];
  Table[Plot[Evaluate[u[i]][x], {x, -2*a, 2*a}, PlotRange -> All,
    AxesOrigin -> {-a, 0}], {i, 0, nmax}];
  Table[Plot[Evaluate[u[i]][x]^2, {x, -2*a, 2*a}, PlotRange -> All,
    AxesOrigin -> {-a, 0}], {i, 0, nmax}];
]

func[10^-10, 600*1.60*10^-19, 9.10*10^-31]

func[0.5*10^-15, 3*10^9*1.60*10^-19, 1.0086*1.66*10^-27]
```