物性物理学 1 レポート No.2

61908697 佐々木良輔

問 1

$V(x) = \infty$ $(x \leq 0, a \leq x)$ より境界では波動関数は 0 になっているべきなので, 以下の境界条件を課す.

$$\psi(x)|_{x=0} = \psi(x)|_{x=a} = 0 \tag{1}$$

また $V(x) = 0$ $(0 < x < a)$ なので Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi(x) = E\psi(x) \tag{2}$$

ここで $\psi(x) = C\mathrm{e}^{\lambda x}$ と置くと

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\lambda\psi(x) &= E\psi(x) \\ \therefore\ \lambda &= \pm i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} =: \pm ik \end{aligned} \tag{3}$$

となる. したがって $\psi(x)$ は定数 A, B を用いて

$$\psi(x) = A\mathrm{e}^{ikx} + B\mathrm{e}^{-ikx} \tag{4}$$

となる. ここで境界条件 (1) を用いると

$$\begin{aligned} \psi(0) &= A + B = 0 \\ \therefore\ B &= -A \end{aligned} \tag{5}$$

$$\begin{aligned} \psi(a) &= A(\mathrm{e}^{ika} - \mathrm{e}^{-ika}) \\ &= 2iA\sin ka = 0 \\ \therefore\ k &= \frac{n\pi}{a} \end{aligned} \tag{6}$$

(3) と (5) より

$$\begin{aligned} \frac{n\pi}{a} &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ \therefore\ E_n &= \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2 \end{aligned} \tag{7}$$

以上から E_1, E_2 はそれぞれ以下のようになる.

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \tag{8}$$
$$E_2 = \frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \tag{9}$$

問 2

$\alpha = \sqrt{2mE}/\hbar, \beta = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ である．ここで Vb を一定にしたまま $V \to \infty, b \to 0$ とすると

$$\begin{aligned} \alpha(a-b) &\to \alpha a \\ \beta b &\to 0 \end{aligned}$$

また $\beta b \to 0$ より

$$\begin{aligned} \sinh\beta b &\simeq \beta b \\ \cosh\beta b &\simeq 1 \end{aligned}$$

である. したがって

$$\begin{aligned} \frac{\beta^2-\alpha^2}{\beta}\sinh\beta b &\simeq b(\beta^2-\alpha^2) \\ &= b\frac{2mV_0 - 4mE}{\hbar^2} \\ &\to \frac{2mV_0 b}{\hbar^2} \end{aligned}$$

ただし最後の極限では $V_0 \gg E$ とした．したがって⑦式は

$$\mathrm{e}^{2ika} + 1 = \mathrm{e}^{ika}\left(\frac{2mV_0 b}{\alpha\hbar^2}\sin\alpha a + 2\cos\alpha a\right)$$

両辺を e^{ika} で割ると

$$\begin{aligned} \mathrm{e}^{ika} + \mathrm{e}^{-ika} &= \frac{2mV_0 b}{\alpha\hbar^2}\sin\alpha a + 2\cos\alpha a \\ \cos ka &= \frac{mV_0 b}{\alpha\hbar^2}\sin\alpha a + \cos\alpha a =: f(\alpha a) \end{aligned} \tag{10}$$

(1)

$V_0 b \to 0$ とすると (10) は

$$\cos ka = \cos \alpha a$$

$$k = \alpha = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\therefore \ E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{11}$$

となり自由電子のエネルギー分散関係が得られた.

(2)

$f(x)$ をプロットすると図 1 のようになる. (10) の左辺は cos 関数であり -1 から 1 までの値しか取れないため, 図 1 の赤ハッチの領域のように $|f(\alpha a)| > 1$ となるエネルギー領域では解がないことがわかる. ここで $mV_0 b/\alpha\hbar^2$ を徐々に大きくしたときのグラフは図 2 のようになる. 図 2 から $V_0 b$ が大きくなるとグラフが縦に鋭くなり, 解を持つエネルギー領域が狭くなっていくことがわかる. ここで $V_0 b \to \infty$ とすると解は $\alpha a = n\pi$ のみになる. このときのエネルギー準位は

$$\alpha a = n\pi$$

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{n\pi}{a}$$

$$\therefore \ E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \tag{12}$$

となり, 井戸型ポテンシャルと同様のエネルギー準位を得る.

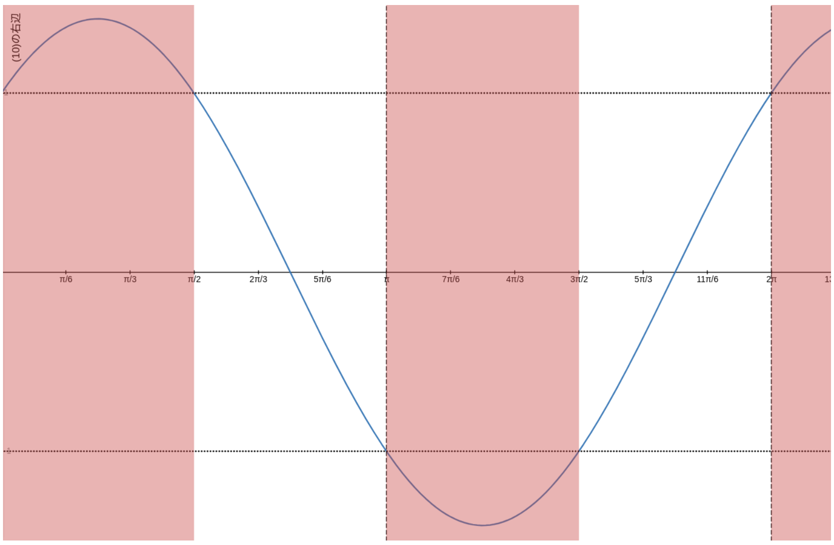

図 1　$f(x)$ のグラフ ($mV_0 b/\alpha\hbar^2 = 1$ のとき)

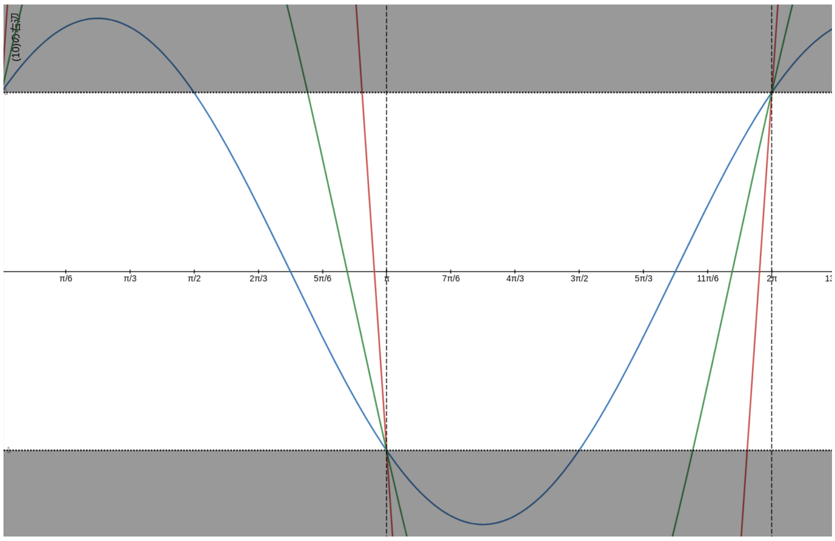

図 2　$f(x)$ のグラフ (青→緑→赤の順で $mV_0b/\alpha\hbar^2$ が大きい)