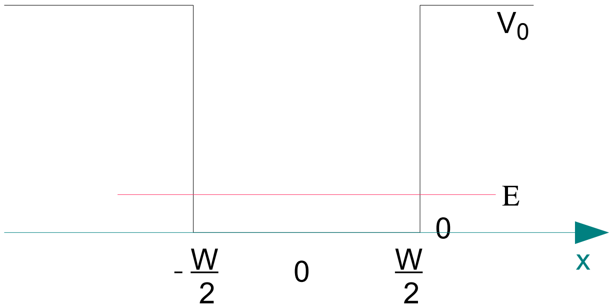
井戸型ﾎﾟﾃﾝｼｬﾙのｴﾈﾙｷﾞｰ固有値と波動関数を求める



$x<\frac{-W}{2}, \frac{W}{2}<x$ のとき、 $-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi+V_0\psi=E\psi$

$\alpha=\frac{\sqrt{2\mathrm{m}(V_0-E)}}{\hbar}$ とおけば、

$x\to-\infty$ で $\psi\to 0$ であるから、 $\psi=A\exp(\alpha x)$ $\quad (x<-\frac{W}{2})$

$x\to\infty$ で $\psi\to 0$ であるから、 $\psi=B\exp(-\alpha x)$ $\quad (\frac{W}{2}<x)$

$\frac{-W}{2}<x<\frac{W}{2}$ のとき、 $-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi=E\psi$

$k=\frac{\sqrt{2\mathrm{mE}}}{\hbar}$ とおけば、 $\psi=C\cos(kx)+D\sin(kx)$ で与えられる。

$x=\pm\frac{W}{2}$ で、関数は連続で傾きも連続であるから、以下の条件が成立する。

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & \cos(\frac{W}{2}k) & -\sin(\frac{W}{2}k) \\ -1 & 0 & \frac{k}{\alpha}\sin(\frac{W}{2}k) & \frac{k}{\alpha}\cos(\frac{W}{2}k) \\ 0 & -1 & \cos(\frac{W}{2}k) & \sin(\frac{W}{2}k) \\ 0 & -1 & \frac{k}{\alpha}\sin(\frac{W}{2}k) & -\frac{k}{\alpha}\cos(\frac{W}{2}k) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \exp(-\frac{W}{2}\alpha)A \\ \exp(-\frac{W}{2}\alpha)B \\ C \\ D \end{pmatrix}=0$$

係数 A～D は、同時には'0'ではないので、

$$\begin{vmatrix} -1 & \cos(\frac{W}{2}k) & -\sin(\frac{W}{2}k) \\ -1 & \frac{k}{\alpha}\sin(\frac{W}{2}k) & \frac{k}{\alpha}\cos(\frac{W}{2}k) \\ 0 & \frac{k}{\alpha}\sin(\frac{W}{2}k) & -\frac{k}{\alpha}\cos(\frac{W}{2}k) \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} -1 & \cos(\frac{W}{2}k) & -\sin(\frac{W}{2}k) \\ -1 & \frac{k}{\alpha}\sin(\frac{W}{2}k) & \frac{k}{\alpha}\cos(\frac{W}{2}k) \\ 0 & \cos(\frac{W}{2}k) & \sin(\frac{W}{2}k) \end{vmatrix} = 0$$

$$2\frac{k^2}{\alpha^2}\sin(\frac{W}{2}k)\cos(\frac{W}{2}k) - \frac{k}{\alpha}(\cos^2(\frac{W}{2}k) - \sin^2(\frac{W}{2}k)) - \frac{k}{\alpha}(\cos^2(\frac{W}{2}k) - \sin^2(\frac{W}{2}k)) - 2\sin(\frac{W}{2}k)\cos(\frac{W}{2}k) = 0$$

$$(1 - \frac{k^2}{\alpha^2})\sin(\frac{W}{2}k)\cos(\frac{W}{2}k) + \frac{k}{\alpha}(\cos^2(\frac{W}{2}k) - \sin^2(\frac{W}{2}k)) = 0$$

この式は、次の二通りに変形される。

$\tan(Wk) = \left(\dfrac{2\frac{k}{\alpha}}{\frac{k^2}{\alpha^2} - 1}\right)$	$(\sin(\frac{Wk}{2}) + \frac{k}{\alpha}\cos(\frac{Wk}{2}))(\cos(\frac{Wk}{2}) - \frac{k}{\alpha}\sin(\frac{Wk}{2})) = 0$ $\tan(\frac{Wk}{2}) = -\frac{k}{\alpha}$ または、 $\tan(\frac{Wk}{2}) = \frac{\alpha}{k}$

B で、A,C,D を表す。

$$\begin{pmatrix} -1 & \cos(\frac{W}{2}k) & -\sin(\frac{W}{2}k) \\ -1 & \frac{k}{\alpha}\sin(\frac{W}{2}k) & \frac{k}{\alpha}\cos(\frac{W}{2}k) \\ 0 & \cos(\frac{W}{2}k) & \sin(\frac{W}{2}k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \exp(-\frac{W}{2}\alpha)A \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \exp(-\frac{W}{2}\alpha)B \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \exp(-\frac{W}{2}\alpha)A \\ C \\ D \end{pmatrix} = \frac{1}{\frac{k}{\alpha}\cos(Wk) + \sin(Wk)} \begin{pmatrix} -\frac{k}{\alpha}\cos(Wk) & -\sin(Wk) & \frac{k}{\alpha} \\ \sin(\frac{W}{2}k) & -\sin(\frac{W}{2}k) & \frac{k}{\alpha}\cos(\frac{W}{2}k) + \sin(\frac{W}{2}k) \\ -\cos(\frac{W}{2}k) & \cos(\frac{W}{2}k) & \cos(\frac{W}{2}k) - \frac{k}{\alpha}\sin(\frac{W}{2}k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \exp(-\frac{W}{2}\alpha)B \end{pmatrix}$$

$\frac{k}{\alpha}\cos(Wk) = \frac{1}{2}(\frac{k^2}{\alpha^2} - 1)\sin(Wk)$ であるので、 $\frac{k}{\alpha}\cos(Wk) + \sin(Wk) = (\frac{k^2}{\alpha^2} + 1)\sin(\frac{W}{2}k)\cos(\frac{W}{2}k)$

$$A = \frac{\frac{k}{\alpha}}{\frac{k}{\alpha}\cos(Wk) + \sin(Wk)}B = \frac{\frac{k}{\alpha}}{(\frac{k^2}{\alpha^2} + 1)\sin(\frac{W}{2}k)\cos(\frac{W}{2}k)}B$$

$\tan(\frac{Wk}{2})=-\frac{k}{\alpha}$ のとき

$$A=\frac{\frac{k}{\alpha}}{(\frac{k^2}{\alpha^2}+1)\sin(\frac{W}{2}k)\cos(\frac{W}{2}k)}B=\frac{-B}{(1+\tan^2(\frac{W}{2}k))\cos^2(\frac{W}{2}k)}=-B$$

$$C=\frac{\frac{k}{\alpha}\cos(\frac{W}{2}k)+\sin(\frac{W}{2}k)}{\frac{k}{\alpha}\cos(Wk)+\sin(Wk)}\exp(-\frac{W}{2}\alpha)B=0$$

$$D=\frac{\cos(\frac{W}{2}k)-\frac{k}{\alpha}\sin(\frac{W}{2}k)}{(\frac{k^2}{\alpha^2}+1)\sin(\frac{W}{2}k)\cos(\frac{W}{2}k)}\exp(-\frac{W}{2}\alpha)B=\frac{\exp(-\frac{W}{2}\alpha)B}{(\tan^2(\frac{W}{2}k)+1)\sin(\frac{W}{2}k)\cos^2(\frac{W}{2}k)}=\frac{\exp(-\frac{W}{2}\alpha)}{\sin(\frac{W}{2}k)}B$$

$\tan(\frac{Wk}{2})=\frac{\alpha}{k}$ のとき $\cot(\frac{Wk}{2})=\frac{k}{\alpha}$ であるので、

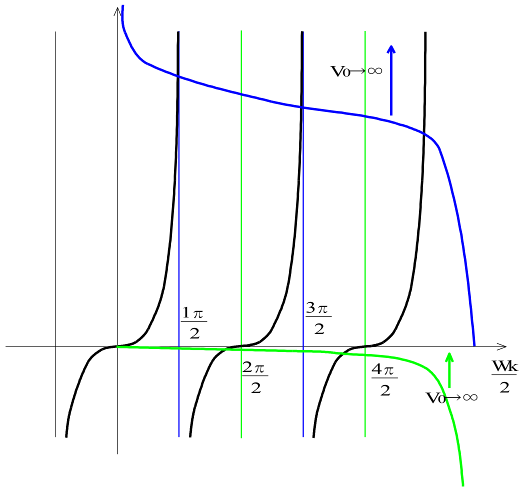
$$A=\frac{\frac{k}{\alpha}}{(\frac{k^2}{\alpha^2}+1)\sin(\frac{W}{2}k)\cos(\frac{W}{2}k)}B=\frac{B}{(1+\cot^2(\frac{W}{2}k))\sin^2(\frac{W}{2}k)}=B$$

$$D=\frac{\cos(\frac{W}{2}k)-\frac{k}{\alpha}\sin(\frac{W}{2}k)}{(\frac{k^2}{\alpha^2}+1)\sin(\frac{W}{2}k)\cos(\frac{W}{2}k)}\exp(-\frac{W}{2}\alpha)B=0$$

$$C=\frac{\frac{k}{\alpha}\cos(\frac{W}{2}k)+\sin(\frac{W}{2}k)}{(\frac{k^2}{\alpha^2}+1)\sin(\frac{W}{2}k)\cos(\frac{W}{2}k)}\exp(-\frac{W}{2}\alpha)B=\frac{\exp(-\frac{W}{2}\alpha)B}{(\cot^2(\frac{W}{2}k)+1)\sin^2(\frac{W}{2}k)\cos(\frac{W}{2}k)}=\frac{\exp(-\frac{W}{2}\alpha)}{\cos(\frac{W}{2}k)}B$$

$\tan(\frac{Wk}{2})=-\frac{k}{\alpha}$ 、 $\tan(\frac{Wk}{2})=\frac{\alpha}{k}$ を満たす Wk を求めるために、α が、kの関数であることを考慮してグラフを作成する。

交点が、条件を満足する Wk を与える。

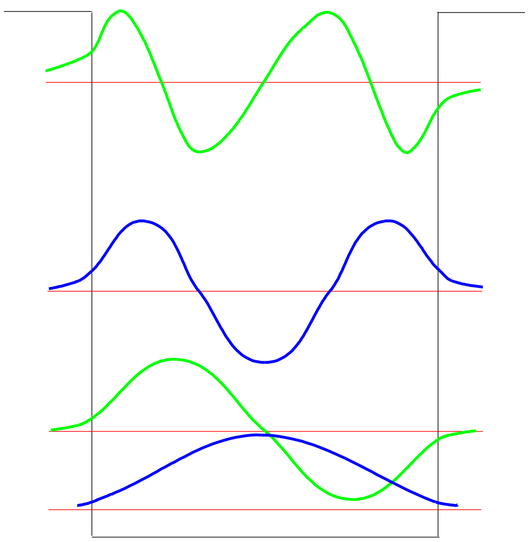


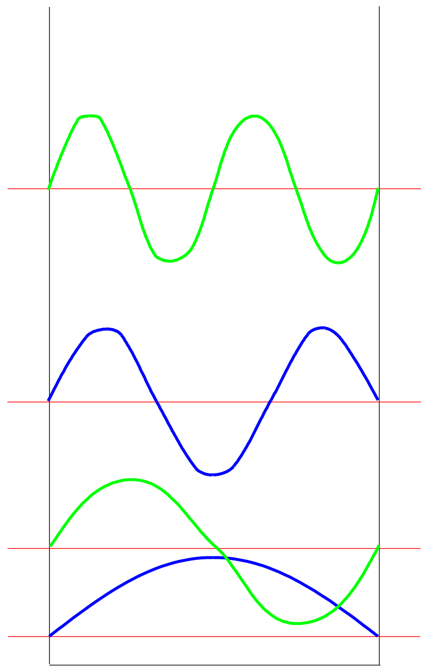
$V_0 \to \infty$では、 $\frac{Wk}{2}=\frac{n\pi}{2}$ より、 $k=\frac{n\pi}{W}$ である。

V_0が無限大から有限値になると、 Wk は$n\pi$より小さくなる。V_0が小さくなるほど、$n\pi$からのずれは大きくなる。

井戸内の波の波長をλとすれば、 $\lambda=\frac{2\pi}{k}$ である。井戸内の電子の波の波長λは、kに反比例するので、$V_0 \to \infty$の時の波長 $\lambda=\frac{2W}{n}$ に対して、V_0が小さくなるほど同じ量子数nに対応する波の波長は長くなる。

エネルギー固有値と波動関数は、次のようになる。


V_0: 有限値の時


V_0: 無限大の時