井戸型ポテンシャル

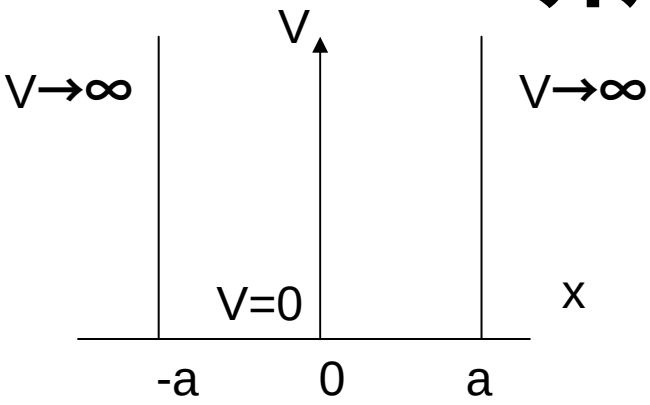


図. 井戸型ポテンシャル

$$-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{d^2\psi}{dx^2}=\mathrm{E}\psi$$

Eを求める.

$$\Psi = Ae^{ikx}$$ **とすれば,**

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m}Ae^{ikx}=EAe^{ikx} \quad E=\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

境界条件

$$x=\pm\mathrm{a}$$ **のとき** $$\psi=0$$

波動関数

$$\Psi = Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$$

$$Ae^{ika}+Be^{-ika}=0$$

$$Ae^{-ika}+Be^{ika}=0$$

係数A,Bは同時に0とはならない条件から,

$$\begin{vmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ e^{-ika} & e^{ika} \end{vmatrix}=0$$

$$e^{2ika}-e^{-2ika}=0 \Rightarrow e^{4ika}=1$$

4*ka*=2π*n*である必要があるから，
k=nπ/(2a)

$$Ae^{\frac{in\pi}{2}} + Be^{-\frac{in\pi}{2}} = 0$$

$$B = -Ae^{in\pi} = (-1)^{n+1} A$$

$$\Psi = A\left[e^{\frac{in\pi}{2a}x} + (-1)^{n+1} e^{-\frac{in\pi}{2a}x} \right]$$

規格化して完全解を求めると，

$$\int_{-a}^{a} \Psi^* \Psi dx = \int A^2 \left[e^{-\frac{in\pi}{2a}x} + (-1)^{n+1} e^{\frac{in\pi}{2a}x} \right] \left[e^{\frac{in\pi}{2a}x} + (-1)^{n+1} e^{-\frac{in\pi}{2a}x} \right]$$

$$= \int A^2 \left(2 + (-1)^{n+1} e^{-\frac{in\pi}{a}x} + (-1) e^{\frac{in\pi}{a}x} \right) dx$$

$$= \int A^2 \left(2 - e^{\frac{in\pi}{a}x} - e^{-\frac{in\pi}{a}x} \right) dx = 2A^2 \int 2\sin^2 \frac{n\pi}{2a} dx$$

$$= 2A^2 2a = 1$$

$$\therefore A = \frac{1}{2\sqrt{a}}$$

nが奇数なら，$\Psi = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \frac{n\pi}{2a} x$

nが偶数なら，$\Psi = \frac{1}{\sqrt{a}} i \sin \frac{n\pi}{2a} x$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{2a} \right)^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{8ma^2}$$

段型ポテンシャル

それぞれのポテンシャルでの波動方程式

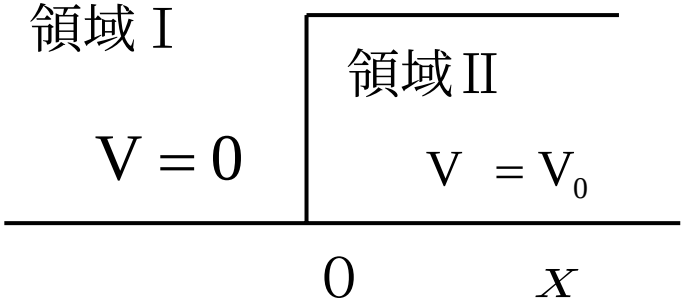


図6.2　段型ポテンシャル

I）
$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\mathrm{E}\psi=0 \qquad k_{\mathrm{I}}=\left[\frac{2\mathrm{mE}}{\hbar^2}\right]^{1/2}$$

II）
$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(\mathrm{E}-\mathrm{V}_0)\psi=0$$
$$k_{\mathrm{II}}=\left[\frac{2\mathrm{m}(\mathrm{E}-\mathrm{V}_0)}{\hbar^2}\right]^{1/2}$$

(a)$\mathrm{E}>\mathrm{V}_0$**の場合，**

(**領域 I**)

$$\psi_{\mathrm{I}}=\mathrm{A}_{\mathrm{I}}\exp(ik_{\mathrm{I}}x)+\mathrm{B}_{\mathrm{I}}\exp(-ik_{\mathrm{I}}x)$$

(**領域 II**)

$$\psi_{\mathrm{II}}=\mathrm{A}_{\mathrm{II}}\exp(ik_{\mathrm{II}}x)$$

(b) $\mathrm{E}<\mathrm{V}_0$**の場合，**

(**領域 I**)

$$\psi_{\mathrm{I}}=\mathrm{A}_{\mathrm{I}}\exp(ik_{\mathrm{I}}x)+\mathrm{B}_{\mathrm{I}}\exp(-ik_{\mathrm{I}}x)$$

(**領域 II**)

$$\psi_{\mathrm{II}}=\mathrm{A}_{\mathrm{II}}\exp(-k_{\mathrm{II}}'x)$$

トンネル障壁

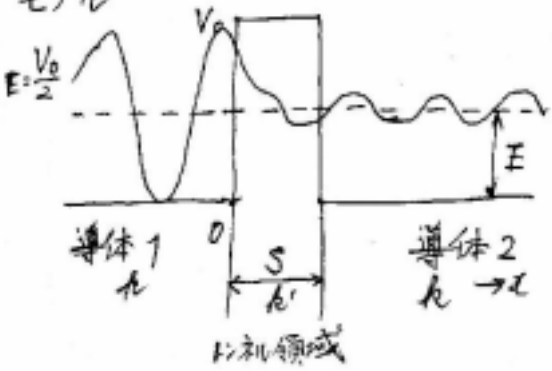
走査型トンネル顕微鏡

トンネルギャップ：S

波の減衰：$\left|\frac{F}{A}\right|^2$

トンネル電流（電子透過確率：$D(E_x)$）

モデル



波動方程式

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\psi'' = \{E - V(x)\}\psi$$

$$\psi = \begin{cases} Ae^{+ikx} + Be^{-ikx} & (x<0) \cdots \text{反射波の存在} \\ Ce^{-k'x} + De^{+k'x} & (0<x<S) \cdots \text{式の符号に注意} \\ Fe^{+ikx} & (x>0) \cdots \text{入射波のみ} \end{cases}$$

ただし $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$, $\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} = V_0 - E$ である。

$$\left|\frac{F}{A}\right|^2 \simeq \frac{16k'^2k^2}{k^2+k'^2} e^{-2k'S}$$ と見積られる。

調和振動子を量子力学的に解く

$$\mathrm{V}(x) = \tfrac{1}{2}\mathrm{K}x^2$$ K:ばね定数

$$\omega = 2\pi\nu = \sqrt{\mathrm{K}/\mathrm{m}}$$

シュレディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}\mathrm{K}x^2\psi = \mathrm{E}\psi$$

次元のない量の導入

$$y = \left(\frac{1}{\hbar}\sqrt{Km}\right)^{\frac{1}{2}} x = \sqrt{\frac{2\pi m\nu}{\hbar}}x$$

$$\alpha = \frac{2E}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{K}} = \frac{2E}{h\nu}$$

シュレディンガー方程式を書き改めると,

$$\frac{d^2\Psi}{dy^2} + \left(\alpha - y^2\right)\Psi = 0$$

$$\Psi_n = N_n H_n(\alpha x)\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right)$$

$$H_n(\xi) = (-1)^n \exp\left(\xi^2\right)\frac{\partial^n}{\partial\xi^n}\left(-\xi^2\right)$$

$$N_n = \left(\frac{\alpha}{\pi^{\frac{1}{2}} 2^n n!}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\Psi_0 = \alpha^{\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$$

ポテンシャルVが関数になると波動関数を求めることが難しくなる.（なんとか解析的にもとまる.）

波動関数

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}\right)+V(x,y,z)\varphi=E\varphi$$

・調和振動子

$$-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{1}{2}\mathrm{K}x^2\psi=\mathrm{E}\psi \quad \Rightarrow \quad \Psi_n=N_nH_n(\alpha x)\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2x^2\right)$$

$$H_n(\xi)=(-1)^n\exp(\xi^2)\frac{\partial^n}{\partial\xi^n}(-\xi^2)$$

エルミット多項式

・水素原子（クーロン力）

$$\frac{1}{\mathrm{R}}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\mathrm{R}}{dr}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[\mathrm{E}-\mathrm{V}(r)]=-\frac{1}{\mathrm{Y}}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\mathrm{Y}}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\mathrm{Y}}{\partial\phi^2}\right]=\lambda \quad \Rightarrow \quad \Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi)$$

$$\mathrm{R}_{n\ell}(r)=-\left\{\left(\frac{2}{n\mathrm{a}_0}\right)^3\frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+1)!]^3}\right\}^{1/2}\exp\left(-\frac{1}{2}\rho\right)\rho^\ell\,\mathrm{L}_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)$$

,

$$\mathrm{Y}_{\ell m}(\theta,\phi)=\mathrm{N}_{\ell\mathrm{m}}\mathrm{P}_\ell^m(\cos\theta)\Phi_m(\phi)=\left[\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}\right]^{1/2}\mathrm{P}_\ell^{\mathrm{m}}(\cos\theta)\exp(im\phi)$$

ラゲール陪関数

ルジャンドル陪関数

・水素類似原子（Z倍のクーロン力）

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\mathrm{R}}{dr}\right)+\frac{Ze^2}{r}\mathrm{R}+\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\mathrm{R}=\mathrm{E}\,\mathrm{R} \quad \Rightarrow \quad \chi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

化学結合で用いられる量子力学

- シュレディンガー方程式が難しいので，近似をうまく用いた近似解である．

結晶を持つ材料では周期ポテンシャルを解く方法があるが，こちらも近似解である．