

1次元井戸型ポテンシャル中の波束の時間発展

(東海大学・理¹, 長崎総合科学大学・新創研²) ○石川 滋¹, 山邊 時雄²

無限に深い1次元井戸型ポテンシャル中の粒子の運動を調べるため、局在化した波動関数を導入して、その時間発展を検討した。

井戸型ポテンシャル中に局在化した波動関数をつくるために、区間 $0 < x < a$ で定義される次のポテンシャル関数を導入する。

$$V(x) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} \left(\sqrt{p^2 - \frac{1}{4}} \cot \frac{\pi x}{2a} - \sqrt{q^2 - \frac{1}{4}} \tan \frac{\pi x}{2a} \right)^2 \quad (1)$$

ここで p と q は $1/2$ より大きい実数である。この関数は $x=0=a$ で無限大となり、

$$x = \frac{2a}{\pi} \arctan \frac{(4p^2 - 1)^{1/4}}{(4q^2 - 1)^{1/4}} \quad (2)$$

のとき極小値 0 をとる。このポテンシャル中を運動する粒子のシュレディンガー方程式の最低固有値とその固有関数を示す。

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{4ma^2} \left[(p+1)(q+1) - \frac{1}{4} - \sqrt{\left(p^2 - \frac{1}{4}\right)\left(q^2 - \frac{1}{4}\right)} \right] \quad (3)$$

$$\psi(x) = A_{pq} \sin^{p+1/2} \frac{\pi x}{2a} \cos^{q+1/2} \frac{\pi x}{2a} \quad (4)$$

$$A_{pq} = \sqrt{\frac{a}{\pi} \frac{\Gamma(p+1)\Gamma(q+1)}{\Gamma(p+q+2)}} \quad (5)$$

図1にポテンシャル関数と固有関数を、いくつかの (p, q) について示す。

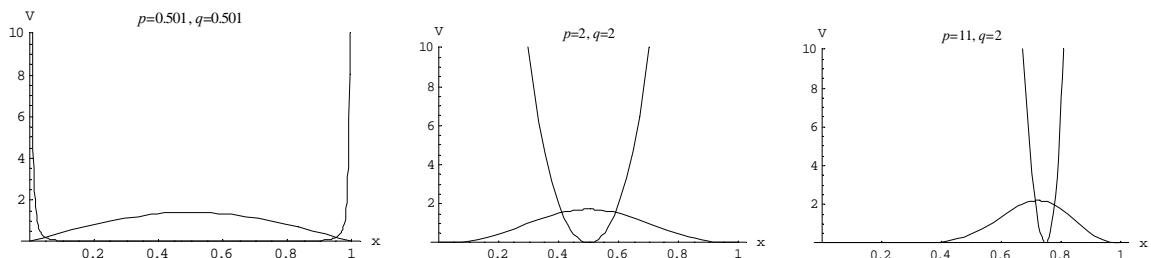


図1. ポテンシャル関数とその固有関数 ($p=q=0.501$, $p=q=2$, $p=11, q=2$)。

固有関数は p と q の値が大きくなるにつれ局在化し、 p と q の一方が他方より大きくなると、局在化する位置が境界にずれてくる。

つぎに、局在化した波動関数が井戸型ポテンシャル中でどのような時間発展を遂げるか検討する。時刻 $t < 0$ で、ポテンシャルエネルギーは式(1)で与えられ、 $t \geq 0$ では、井戸型 ($0 < x < a$ で $V = \text{一定}$ 、 $x < 0, x > a$ で $V = \infty$) になるとしよう。式(4)の波動関数を井戸型ポテンシャルの固有関数 $\phi_k(x)$ を用いて展開する。

$$\psi(x,t) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k \phi_k(x) e^{-iW_k t/\hbar} \quad (6)$$

ここで W_k は $\phi_k(x)$ のエネルギー固有値である。係数 a_k は $t=0$ で式(6)と式(4)が一致することから決定される。

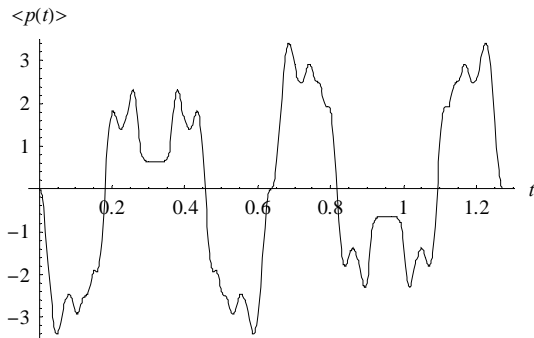


図 2. 運動量の期待値 ($p=11, q=2$)

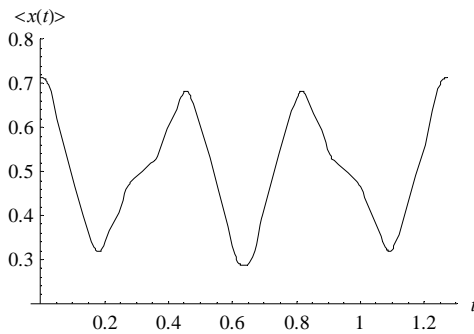


図 3. 位置の期待値 ($p=11, q=2$)

$p=11, q=2$ の場合について、運動量と位置の期待値 $\langle p(t) \rangle$ と $\langle x(t) \rangle$ を求めた。結果を図 2 と図 3 に示す。粒子の位置が境界付近に達すると、運動量の符号が反転し、粒子が跳ね返される様子がわかる。

図 4 に $\langle p(t) \rangle$ と $\langle x(t) \rangle$ の位相空間図を示す。粒子の運動は一定の軌跡をたどらず、古典的な運動とは異なっている。

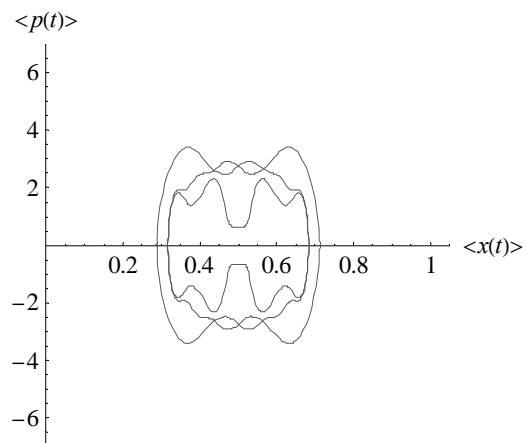


図 4. 位相空間図 ($p=11, q=2$)