

三角形井戸型ポテンシャルをもつ1次元 Schrödinger 方程式の固有値問題

新井 悠友

本研究では半導体の pn 接合に関するポテンシャル障壁に類似した, 三角形井戸型ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0) \\ V_0 x - V_0 & (0 \leq x \leq 1, V_0 > 0) \\ 0 & (x > 1) \end{cases} \quad (1)$$

をもつ1次元の定常的 Schrödinger 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2} \varphi''(x) + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \quad (2)$$

の固有値問題について考える. 具体的には参考文献 [2] に従って (1) の各定義域ごとに (2) の L^2 解を求め, $x = 0, x = 1$ での1階微分までの接続条件を満たす固有値 E を求める.

以下は接続条件を E の変数変換 X_1 を用いて変形したものであり,

$$\begin{cases} Ai'(X_1) + \left(\frac{2V_0}{h^2}\right)^{\frac{1}{3}} \sqrt{X_1} Ai(X_1) = 0 \text{ かつ } Ai'(X_1 - \left(\frac{2V_0}{h^2}\right)^{\frac{1}{3}}) - \left(\frac{2V_0}{h^2}\right)^{\frac{1}{3}} \sqrt{X_1} Ai(X_1 - \left(\frac{2V_0}{h^2}\right)^{\frac{1}{3}}) = 0 \\ Ai'(X_1) + \left(\frac{2V_0}{h^2}\right)^{\frac{1}{3}} \sqrt{X_1} Ai(X_1) \neq 0 \text{ かつ} \\ \frac{Ai'(X_1 - \left(\frac{2V_0}{h^2}\right)^{\frac{1}{3}}) - \left(\frac{2V_0}{h^2}\right)^{\frac{1}{3}} \sqrt{X_1} Ai(X_1 - \left(\frac{2V_0}{h^2}\right)^{\frac{1}{3}})}{Ai'(X_1) + \left(\frac{2V_0}{h^2}\right)^{\frac{1}{3}} \sqrt{X_1} Ai(X_1)} = \frac{Bi'(X_1 - \left(\frac{2V_0}{h^2}\right)^{\frac{1}{3}}) - \left(\frac{2V_0}{h^2}\right)^{\frac{1}{3}} \sqrt{X_1} Bi(X_1 - \left(\frac{2V_0}{h^2}\right)^{\frac{1}{3}})}{Bi'(X_1) + \left(\frac{2V_0}{h^2}\right)^{\frac{1}{3}} \sqrt{X_1} Bi(X_1)} \end{cases} \quad (3)$$

($X_1 = -(\frac{2}{V_0^2 h^2})^{\frac{1}{3}} E$, $Ai(x), Bi(x)$ はそれぞれ第一種, 第二種 Airy 関数)

(3) または (4) が成り立つ $X_1 > 0$ の存在を示せば良い.

任意の $h > 0$ に対して少なくとも $V_0 \leq \frac{h^2}{2}$ のとき (2) の固有値が存在することがわかり,

$V_0 \leq \frac{h^2}{2}$ のとき固有値 E は $-\frac{V_0}{2} < E < 0$ で存在し, 固有関数 φ は $\alpha \neq 0$ と固有値 E を用いて,

$$\varphi(x) = \begin{cases} \alpha \left(Ai(X_0) - Bi(X_0) \frac{Ai'(X_1) + \frac{\sqrt{-2E}}{h} Ai(X_1)}{Bi'(X_1) + \frac{\sqrt{-2E}}{h} Bi(X_1)} \right) e^{\frac{\sqrt{-2E}}{h} x} & (x < 0) \\ \alpha \left(Ai(X) - \frac{Ai'(X_1) + \frac{\sqrt{-2E}}{h} Ai(X_1)}{Bi'(X_1) + \frac{\sqrt{-2E}}{h} Bi(X_1)} Bi(X) \right) & (0 \leq x \leq 1) \\ \alpha e^{-\frac{\sqrt{-2E}}{h} x} \left(Ai(X_1) - Bi(X_1) \frac{Ai'(X_1) + \frac{\sqrt{-2E}}{h} Ai(X_1)}{Bi'(X_1) + \frac{\sqrt{-2E}}{h} Bi(X_1)} \right) e^{-\frac{\sqrt{-2E}}{h} x} & (x > 1) \end{cases}$$

$$(X = \left(\frac{2V_0}{h^2}\right)^{\frac{1}{3}} x - \left(\frac{2}{V_0^2 h^2}\right)^{\frac{1}{3}} (V_0 + E), X_0 = -\left(\frac{2}{V_0^2 h^2}\right)^{\frac{1}{3}} (V_0 + E), X_1 = -\left(\frac{2}{V_0^2 h^2}\right)^{\frac{1}{3}} E)$$

と表せるという結果が得られた.

また, 数値計算を行うことにより以下が成り立つと予想できる.

(a) $V_0 \leq \frac{h^2}{2}$ では (2) の固有値 E はただ1つである.

(b) 任意の $h > 0$ に対して任意の V_0 で固有値が存在する.

(c) V_0 が大きくなるほど, 固有値の数は増加する.

現在はこれらを数学的に検証する研究を進めている.

参考文献

[1] 霜田光一, 桜井捷海 『エレクトロニクスの基礎』, 裳華房, 1983.

[2] 中村周 『量子力学のスペクトル理論』, 共立出版, 2012.

[3] Frank W. J. Olver, Diego Dominici et al, "Chapter 9 Airy and Related Functions", NIST Digital Library of Mathematical Functions, 2024-09-15. (<https://dlmf.nist.gov/9>)