束縛状態:1 次元ポテンシャル井戸

Masahiro Yamamoto

July 25, 2020

1 理論

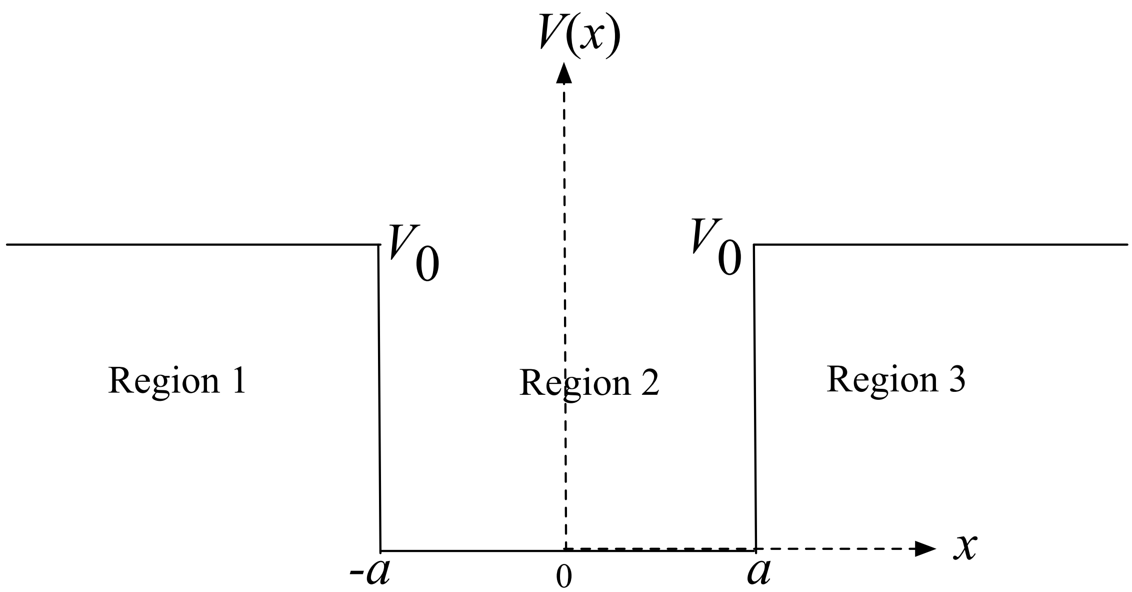

Figure 1: 1 次元ポテンシャル井戸

図のような 1 次元ポテンシャル井戸を考える。$V_0 \geq 0, a \geq 0$ として,

$$V(x) = \begin{cases} +V_0 & x < -a & \text{(Region 1)} \\ 0 & -a \leq x \leq a & \text{(Region 2)} \\ +V_0 & x > a & \text{(Region 3)} \end{cases} \tag{1}$$

エネルギ E が $0 < E < V_0$ での Schrödinger 方程式 $[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x^2} + V(x)]\psi(x) = E\psi(x)$ の解を求めよう。波動関数は以下のようにおくことができる。

$$\psi_1(x) = Ae^{k_1 x} \qquad x < -a \tag{2}$$

$$\psi_2(x) = B\sin(k_2 x) + C\cos(k_2 x) \qquad -a \leq x \leq -a \tag{3}$$

$$\psi_3(x) = De^{-k_1 x} \qquad x > a \tag{4}$$

ここで,

$$k_1 = \left[\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right]^{1/2}, \qquad k_2 = \left[\frac{2mE}{\hbar^2}\right]^{1/2} \tag{5}$$

とする。井戸の外側では，波動関数が指数関数的に減衰することを意味する。Region の境界で，波動関数とその微分の連続性より，

$$Ae^{-k_1a} = B\sin(-k_2a) + C\cos(-k_2a) = -B\sin(k_2a) + C\cos(k_2a) \tag{6}$$

$$B\sin(k_2a) + C\cos(k_2a) = De^{-k_1a} \tag{7}$$

$$k_1Ae^{-k_1a} = k_2B\cos(-k_2a) - k_2C\sin(-k_2a) = k_2B\cos(k_2a) + k_2C\sin(k_2a) \tag{8}$$

$$-k_1De^{-k_1a} = k_2B\cos(k_2a) - k_2C\sin(k_2a) \tag{9}$$

$$(6)+(7): \quad 2C\cos(k_2a) = (A+D)e^{-k_1a} \tag{10}$$

$$(7)-(6): \quad 2B\sin(k_2a) = (D-A)e^{-k_1a} \tag{11}$$

$$(8)-(9): \quad 2k_2C\sin(k_2a) = k_1(A+D)e^{-k_1a} \tag{12}$$

$$(8)+(9): \quad 2k_2B\cos(k_2a) = k_1(A-D)e^{-k_1a} \tag{13}$$

$$(12)/(10): \quad k_1 = k_2\frac{\sin(k_2a)}{\cos(k_2a)} = k_2\tan(k_2a) \tag{14}$$

$$(13)/[-(11)]: \quad k_1 = -k_2\frac{\cos(k_2a)}{\sin(k_2a)} = -k_2\cot(k_2a) \tag{15}$$

ここで，$0 = C = A + D, 0 = B = A - D$ は除外している。 (14), (15) 式を両辺に a をかけて，書き換える。

$$\left[\frac{2ma^2(V_0-E)}{\hbar^2}\right]^{1/2} = \left(\frac{2ma^2E}{\hbar^2}\right)^{1/2}\tan\left(\frac{2ma^2E}{\hbar^2}\right)^{1/2} \tag{16}$$

$$\left[\frac{2ma^2(V_0-E)}{\hbar^2}\right]^{1/2} = -\left(\frac{2ma^2E}{\hbar^2}\right)^{1/2}\cot\left(\frac{2ma^2E}{\hbar^2}\right)^{1/2} \tag{17}$$

以下のような無次元量で置き換えることができる。

$$\epsilon = \frac{2ma^2E}{\hbar^2}, \qquad v_0 = \frac{2ma^2V_0}{\hbar^2} \tag{18}$$

次元解析をすると，以下のように無次元であることがわかる。

$$\left[\frac{\text{kg m}^2\text{ J}}{(\text{J s})^2}\right] = \left[\frac{\text{kg m}^2}{\text{J s}^2}\right] = \left[\frac{\text{kg m}^2}{\text{kg m}^2\text{ s}^{-2}\text{ s}^2}\right] = [1] \tag{19}$$

最終的に以下の式が得られる。

$$\sqrt{\epsilon}\tan\sqrt{\epsilon} = \sqrt{v_0-\epsilon} \tag{20}$$

$$-\sqrt{\epsilon}\cot\sqrt{\epsilon} = \sqrt{v_0-\epsilon} \tag{21}$$

$$\tag{22}$$

これらの連立の式を求めることも可能であるが，これらの両辺の式をグラフに書いて交点を求めれば，図より束縛状態が得られる。

$v_0 = 12$ の場合を以下の図に示す。3 つの束縛状態が存在する。(Problem 4-38, Fig.4.4 Physical Chemistry : A Molecular Approach Donald A. McQuarrie and John D. Simon 1997 Univ. Sci. Books)

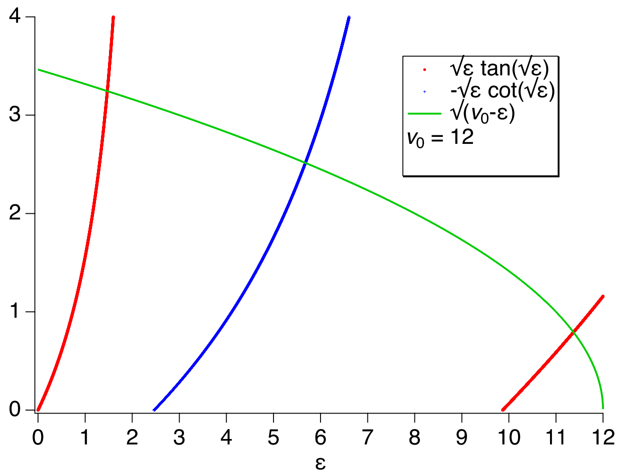

Figure 2: 1 次元ポテンシャル井戸 $v_0 = 12$ の束縛状態

2 ダンベル系モデル計算

名古屋大の亀山，鳥本，大阪大の桑畑らは，ZnS-AgInS_2 系の 2 段階加熱法によって Fig.2 にあるようなダンベルを作成することに成功した。ダンベルの両端の楕円体とロッドの部分は化学組成が異なり物質でありある種のヘテロ接合界面を形成している。[1] 組成を $(\mathrm{AgIn})_x\mathrm{Zn}_{2(1-x)}\mathrm{S}_2$ とあらわすとすると，$x = 0.92/0.24/0.92$ (A) 系ではロッドの部分の幅は 4.1 ± 0.9 nm, 長さは 22 ± 8.5 nm である。両端の楕円体の幅は 5.6 ± 0.85 nm で，長さは 11 ± 2.1 nm である。また，光電子分光の結果から，$V_0 = 0.92$ eV である。$x = 0.39/0.24/0.39$ (B) 系では，ロッドの部分の幅は 3.7 ± 0.5 nm, 長さは 19 ± 6.3 nm である。両端の楕円体の幅は 4.3 ± 0.7 nm で，長さは 7.9 ± 2.7 nm である。また，光電子分光の結果から，$V_0 = 0.60$ eV である。

2.1 A:$x = 0.92/0.24/0.92$ 系

$2a = 11$ nm $= 11 \times 10^{-9}$ m $= 1.1 \times 10^{-8}$ m, $a = 5.5 \times 10^{-9}$ m, $m = 9.1093837015 \times 10^{-31}$ kg, $\hbar = 1.054571817 \times 10^{-34}$ J s, $V_0 = 0.92$ eV $= 1.474 \times 10^{-19}$ J, $v_0 = 730.45$ である。

緑の線と赤あるいは青の線の交点が束縛状態となる。17 個の束縛状態が存在する。

2.2 B:0.39/0.24/0.39 系

$2a = 7.9$ nm $= 7.9 \times 10^{-9}$ m, $a = 3.95 \times 10^{-9}$ m, $m = 9.1093837015 \times 10^{-31}$ kg, $\hbar = 1.054571817 \times 10^{-34}$ J s, $V_0 = 0.60$ eV $= 9.61306 \times 10^{-20}$ J, $v_0 = 245.71$

緑の線と赤あるいは青の線の交点が束縛状態となる。10 個の束縛状態が存在する。

References

[1] T. Kameyamam, S. Koyama, T. Yamamoto, S. Kuwabata, T. Torimoto, *J. Phys. Chem.* C **122**, 13705-13715 (2018)

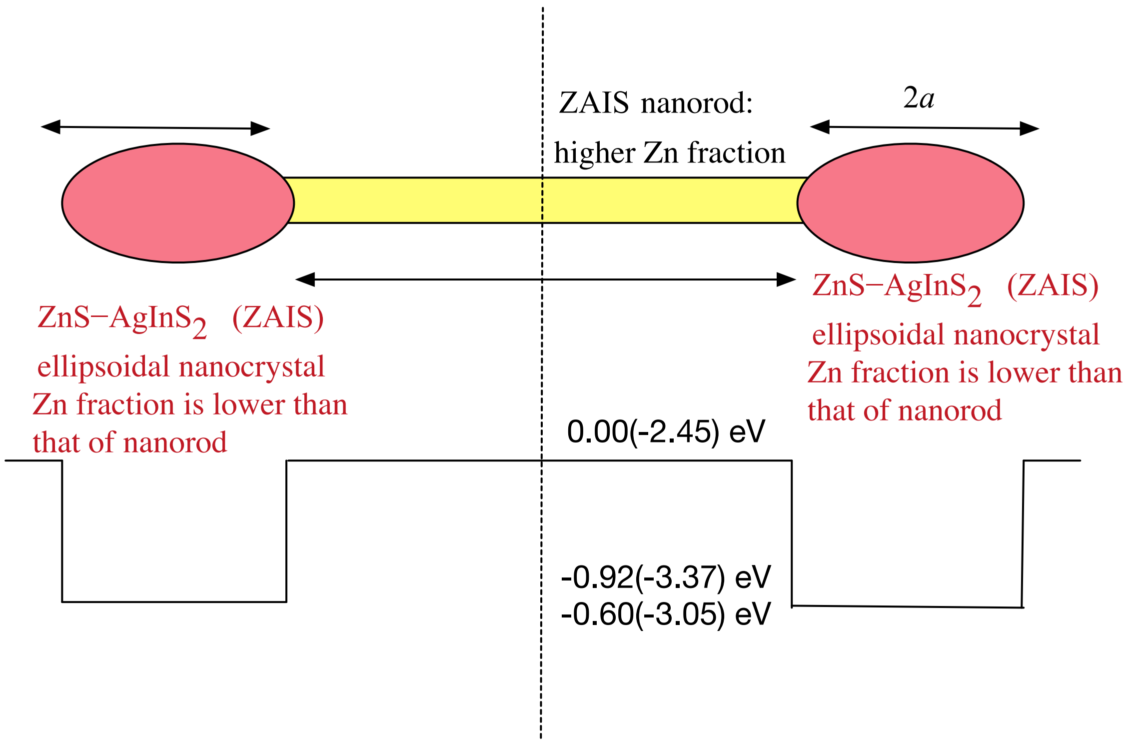

Figure 3: ダンベル：赤の部分の電子系を 1 次元ポテンシャル井戸の束縛状態とみなす

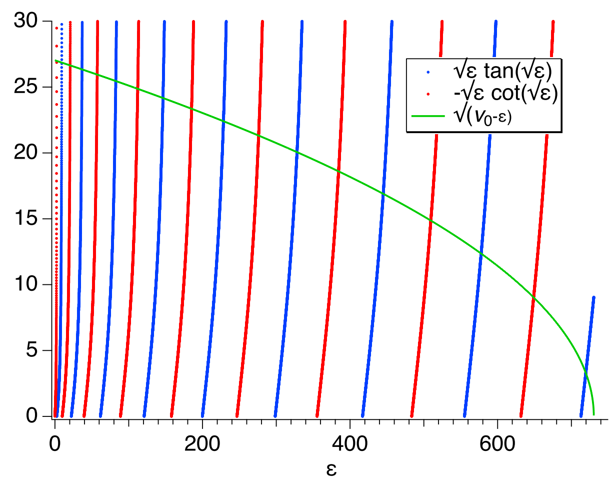

Figure 4: 0.92/0.24/0.92 系の 1 次元ポテンシャル井戸の束縛状態

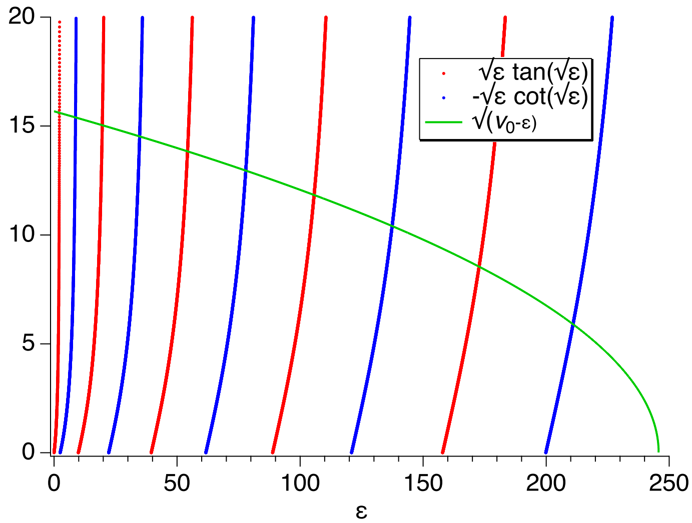

Figure 5: 0.39/0.24/0.39 系の 1 次元ポテンシャル井戸の束縛状態