第 9 章付録

(9.34)における行列式の計算

$$
\begin{vmatrix}
1 & 1 & -1 & -1 \\
i\alpha & -i\alpha & -\beta & \beta \\
e^{i\alpha(a-b)} & e^{-i\alpha(a-b)} & -\lambda e^{-\beta b} & -\lambda e^{\beta b} \\
i\alpha e^{i\alpha(a-b)} & -i\alpha e^{-i\alpha(a-b)} & -\beta\lambda e^{-\beta b} & \beta\lambda e^{\beta b}
\end{vmatrix}
$$

$$
= \begin{vmatrix}
1 & 0 & -1 & 0 \\
i\alpha & -2i\alpha & -\beta & 2\beta \\
e^{i\alpha(a-b)} & -2i\sin a(a-b) & -\lambda e^{-\beta b} & -2\lambda\sinh\beta b \\
i\alpha e^{i\alpha(a-b)} & -2i\,\alpha\cos a(a-b) & -\beta\lambda e^{-\beta b} & 2\beta\lambda\cosh\beta b
\end{vmatrix}
$$

$$
= \begin{vmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 \\
i\alpha & -2i\alpha & i\alpha-\beta & 2\beta \\
e^{i\alpha(a-b)} & -2i\sin a(a-b) & e^{i\alpha(a-b)}-\lambda e^{-\beta b} & -2\lambda\sinh\beta b \\
i\alpha e^{i\alpha(a-b)} & -2i\,\alpha\cos a(a-b) & i\alpha e^{i\alpha(a-b)}-\beta\lambda e^{-\beta b} & 2\beta\lambda\cosh\beta b
\end{vmatrix}
$$

$$
= \begin{vmatrix}
-2i\alpha & i\alpha-\beta & 2\beta \\
-2i\sin a(a-b) & e^{i\alpha(a-b)}-\lambda e^{-\beta b} & -2\lambda\sinh\beta b \\
-2i\,\alpha\cos a(a-b) & i\alpha e^{i\alpha(a-b)}-\beta\lambda e^{-\beta b} & 2\beta\lambda\cosh\beta b
\end{vmatrix}
$$

$$
\begin{aligned}
&= -2i\alpha\left(e^{i\alpha(a-b)}-\lambda e^{-\beta b}\right)2\beta\lambda\cosh\beta b \\
&\quad + (i\alpha-\beta)2\lambda\sinh\beta b\,(2i\,\alpha\cos a(a-b)) \\
&\quad - 2\beta 2i\sin a(a-b)\left(i\alpha e^{i\alpha(a-b)}-\beta\lambda e^{-\beta b}\right) \\
&\quad + 2\beta\left(e^{i\alpha(a-b)}-\lambda e^{-\beta b}\right)2i\,\alpha\cos a(a-b) \\
&\quad - 2i\alpha 2\lambda\sinh\beta b\left(i\alpha e^{i\alpha(a-b)}-\beta\lambda e^{-\beta b}\right) + (i\alpha-\beta)2i\sin a(a-b)\,2\beta\lambda\cosh\beta b
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= \left(-e^{i\alpha(a-b)}+\lambda e^{-\beta b}\right)4i\alpha\beta\lambda\cosh\beta b + (i\alpha-\beta)4i\alpha\lambda\cos a(a-b)\sinh\beta b \\
&\quad + \left(4\alpha\beta e^{i\alpha(a-b)}+4i\beta^2\lambda e^{-\beta b}\right)\sin a(a-b) \\
&\quad + 4i\alpha\beta\left(e^{i\alpha(a-b)}-\lambda e^{-\beta b}\right)\cos a(a-b) \\
&\quad + \left(4\alpha^2\lambda e^{i\alpha(a-b)}+4i\alpha\beta\lambda^2 e^{-\beta b}\right)\sinh\beta b + (-4\alpha \\
&\quad - 4i\beta^2\lambda)\ \sin a(a-b)\cosh\beta b
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= 4\alpha\beta\lambda\left(-ie^{i\alpha(a-b)}\cosh\beta b - i\cos a(a-b)\sinh\beta b\right. \\
&\quad \left. - ie^{-\beta b}\cos a(a-b) - \sin a(a-b)\cosh\beta b\right) \\
&\quad + 4i\alpha\beta\lambda^2 e^{-\beta b}(\cosh\beta b+\sinh\beta b) \\
&\quad + 4\alpha^2\lambda\left(-\cos a(a-b)\sinh\beta b + e^{i\alpha(a-b)}\sinh\beta b\right) \\
&\quad + 4\alpha\beta e^{i\alpha(a-b)}(\sin a(a-b)+i\cos a(a-b)) + 4\beta^2\lambda(ie^{-\beta b}\sin a(a-b) \\
&\quad - i\sin a(a-b)\cosh\beta b)
\end{aligned}
$$

$$= \alpha\beta\lambda\Big(-2ie^{ix}(e^{y}+e^{-y}) - i(e^{ix}+e^{-ix})(e^{y}-e^{-y}) - 2ie^{-y}(e^{ix}+e^{-ix}) + i(e^{ix}$$

$$- e^{-ix})(e^{y}+e^{-y})\Big) + 4i\alpha\beta\lambda^2 e^{-\beta b}\left(e^{\beta b}\right)$$
$$+ 4\alpha^2\lambda\sinh\beta b\left(-\cos a(a-b) + e^{i\alpha(a-b)}\right) + 4\alpha\beta e^{i\alpha(a-b)}\left(ie^{-i\alpha(a-b)}\right)$$
$$+ 4i\beta^2\lambda\sin a(a-b)\,(e^{-\beta b} - \cosh\beta b)$$
$$[\, x = \alpha(a-b), y = \beta b \,]$$

$$= \alpha\beta\lambda\Big(-2ie^{ix}(e^{y}+e^{-y}) - i(e^{ix}+e^{-ix})(e^{y}-e^{-y}) - 2ie^{-y}(e^{ix}+e^{-ix}) + i(e^{ix}$$

$$- e^{-ix})(e^{y}+e^{-y})\Big) + 4i\alpha\beta\lambda^2 + 4i\alpha^2\lambda\sin a(a-b)\sinh\beta b + 4i\alpha\beta$$

$$+ 4\beta^2\lambda\sin a(a-b)\left(ie^{-\beta b}\sin a(a-b) - i\sin a(a-b)\cosh\beta b\right)$$
$$= -2i\alpha\beta\lambda 2\cos x\, 2\cosh y + 4i\alpha\beta\lambda^2 + 4\alpha^2\lambda\sin a(a-b)\sinh\beta b + 4i\alpha\beta$$
$$+ 4i\beta^2\lambda\sin a(a-b)\left(-\sinh\beta b\, e^{-\beta b}\right) = 0$$

$$4i\alpha\beta(\lambda^2+1) = 4i\lambda(\beta^2-\alpha^2)\sin a(a-b)\sinh\beta b + 8\, i\alpha\beta\lambda\cos a(a-b)\cosh\beta b$$
$$\lambda^2 + 1 = \left(\frac{\beta^2-\alpha^2}{\alpha\beta}\sin a(a-b)\sinh\beta b + 2\cos a(a-b)\cosh\beta b\right)\lambda$$

(9.34)からの波動関数の導出

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ i\alpha & -i\alpha & -\beta & \beta \\ e^{i\alpha(a-b)} & e^{-i\alpha(a-b)} & -\lambda e^{-\beta b} & -\lambda e^{\beta b} \\ i\alpha e^{i\alpha(a-b)} & -i\alpha e^{-i\alpha(a-b)} & -\beta\lambda e^{-\beta b} & \beta\lambda e^{\beta b} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$b \to 0$ のとき

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ i\alpha & -i\alpha & -\beta & \beta \\ e^{i\alpha a} & e^{-i\alpha a} & -\lambda & -\lambda \\ i\alpha e^{i\alpha a} & -i\alpha e^{-i\alpha a} & -\beta\lambda & \beta\lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

1 行目×β ＋2 行目，3 行目×β ＋ 4 行目　で 2 つの方程式をつくる．

$$\begin{pmatrix} \beta + i\alpha & \beta - i\alpha & -2\beta & 0 \\ e^{i\alpha a}(\beta + i\alpha) & e^{-i\alpha a}(\beta - i\alpha) & -2\beta\lambda & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

1 行目×$(-\lambda)$ ＋2 行目 →1 行目　で 1 つの方程式をつくる．

$$\begin{pmatrix} (\beta + i\alpha)\left(e^{i\alpha a} - \lambda\right) & (\beta - i\alpha)\left(e^{-i\alpha a} - \lambda\right) & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = (0)$$

したがって，

$$B = -\frac{(\beta + i\alpha)\left(e^{i\alpha a} - \lambda\right)}{(\beta - i\alpha)(e^{-i\alpha a} - \lambda)}A$$

Sを定数として，

$$A = S(\beta - i\alpha)\left(e^{-i\alpha a} - \lambda\right),\quad B = -S(\beta + i\alpha)\left(e^{i\alpha a} - \lambda\right)$$

(9.19)より，波動関数は

$$\phi_1 = Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x}$$

$$\frac{\phi_1}{S} = (\beta - i\alpha)\left(e^{-i\alpha a} - \lambda\right)e^{i\alpha x} - (\beta + i\alpha)\left(e^{i\alpha a} - \lambda\right)e^{-i\alpha x}$$

$$= \beta\left(e^{i\alpha(x-a)} - e^{-i\alpha(x-a)}\right) - \beta\lambda\left(e^{i\alpha x} - e^{-i\alpha x}\right)$$

$$-i\alpha\left(e^{i\alpha(x-a)} + e^{-i\alpha(x-a)}\right) + i\alpha\lambda\left(e^{i\alpha x} + e^{-i\alpha x}\right)$$

$$= 2i\beta\left(\sin\alpha(x-a) - e^{ika}\sin\alpha x\right) - 2i\alpha\left(\cos\alpha(x-a) - e^{ika}\cos\alpha x\right)$$

（$\lambda = e^{ika}$を代入した）

規格化は後で行うので，$2i\beta$で割って，

$$\phi_1 = \left(\sin\alpha(x-a) - e^{ika}\sin\alpha x\right) - \frac{\alpha}{\beta}\left(\cos\alpha(x-a) - e^{ika}\cos\alpha x\right)$$

$$\phi_1 = \left(\sin\alpha a\left(\frac{x}{a} - 1\right) - e^{ika}\sin\alpha a\left(\frac{x}{a}\right)\right) - \frac{\alpha}{\beta}\left(\cos\alpha a\left(\frac{x}{a} - 1\right) - e^{ika}\cos\alpha a\left(\frac{x}{a}\right)\right)$$

ここで，

$$\alpha = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},\qquad \beta = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

なので，$V_0 \to \infty$のとき

$$\frac{\alpha}{\beta} = \sqrt{\frac{E}{V_0 - E}} \to 0$$

したがって，最初の( )の中身だけが残り，

$$\phi_1 = \left(\sin\alpha a\left(\frac{x}{a} - 1\right) - e^{ika}\sin\alpha a\left(\frac{x}{a}\right)\right)$$

ただし，規格化定数を上記に掛ける必要がある．