

令和 3 年度

1 次元水素原子系における非リュードベリ・スペクトルの  
数値的研究

Numerical study of non-Rydberg spectrum  
in one-dimensional hydrogen

令和 3 年 3 月 16 日

高知工科大学大学院工学研究科基盤工学専攻環境数理コース

全研究室

1235012 清水岬

## 目次

1	1 章 序論	4
1.1	イントロダクション	4
1.2	構成	4
2	2 章 研究背景	5
2.1	3 次元水素原子	5
2.2	1 次元水素原子	5
2.3	ホイッタカー関数	5
2.4	クーロン問題	5
3	3 章 非クーロンポテンシャル下の束縛系における非 Loundon 型接続条件	7
3.1	イントロダクション	7
3.1.1	点状相互作用	7
3.1.2	原点付近の微小な領域での核ポテンシャルによる $\gamma$ の実現	18
3.2	設定と結果	19
3.2.1	1 山核ポテンシャルのパラメータ変動	20
3.2.2	3 山核ポテンシャルのパラメータ変動	21
3.3	Cos 型核ポテンシャル	21
3.3.1	1 山 Cos 型核ポテンシャル	23
3.3.2	3 山 Cos 型核ポテンシャル	23
3.4	まとめと展望	25
4	4 章 クーロンポテンシャル下の束縛系における非 Loundon 型接続条件	26
4.1	イントロダクション	26
4.2	設定と結果	28
4.2.1	クーロンのみの場合のスペクトルとポテンシャル構造	28
4.2.2	クーロンポテンシャルの強度変更	29
4.2.3	3 山核ポテンシャルが存在する場合のクーロン変動	30
4.2.4	1 山核ポテンシャル – 変動	31
4.2.5	3 山核ポテンシャル – 変動	32
4.2.6	3 山核ポテンシャル – 変動の波動関数	35
4.2.7	3 山核ポテンシャルのパラメータ 変動	38
4.2.8	3 山核ポテンシャル 変動の波動関数	41
4.2.9	1 山 Cos 型核ポテンシャル – 変動	44
4.2.10	3 山 Cos 型核ポテンシャル 変動	45
4.2.11	3 山 Cos 型核ポテンシャル – 変動の波動関数	47
4.2.12	3 山 Cos 型核ポテンシャルカットオフ変動	50
4.2.13	3 山 Cos 型核ポテンシャルのパラメータ 変動	51

4.2.14	3 山 Cos 型核ポテンシャルのパラメータ 変動の波動関数 . . . . .	52
4.3	クーロン系におけるエキゾチックな点状相互作用 . . . . .	60
4.4	まとめと展望 . . . . .	61
5	計算資源	62
6	謝辞	63

# 1 1 章 序論

## 1.1 イントロダクション

1 次元クーロンポテンシャルの量子力学において波動関数の原点における特異性の取り扱いについて、長い間議論が絶えなかった。1 核 1 電子であるもっとも簡単な原子である水素原子は、量子力学の創世記から長らく盛んに議論が行われていた。ボーアやシュレディンガーなどによる量子力学の確立はシュレディンガーによる水素原子スペクトルの導出の時である。伝統的には 1 次元水素原子のスペクトルを考察する際、Loundon による波動関数を原点で接続条件を 0 とする接続条件が用いられてきた。しかし、先行研究よりそれ以外の接続条件も数学的に許されることが示されている [1][2]。近年実験技術の向上により電場磁場の印加によって 1 次元水素を実現することが可能となった。これに伴い現在、実際にそのような非 Loundon 型接続条件をいかに実現するのかを探ることが重要となってきた。ポテンシャルの中心部分の発散がシュレディンガー演算子のエルミート性に非自明な影響を及ぼすことで、問題を正しく扱うために自己共役拡張の導入が必要となることが問題を困難にしている。数値解析的に求めるという手法は自己共役拡張は量子流速の連続性に帰結することから困難にしている箇所を回避することが可能となる。このことから私は数値解析の手法を用いた。本研究では、数値解析の手法を用い、クーロンポテンシャルの特異性をカットオフにより一旦回避した上で、カット以下の距離に新たな滑らかなポテンシャルを導入し、カットオフ距離を 0 に近づく極限をとることで実際に非 Loundon 型接続条件を実現させた。その結果、1 次元水素において束縛状態として非 Rydberg 型スペクトルが出現しうること示した。具体的にはカットオフ内部に Cos 関数型から作った 3 山ポテンシャルを導入し、その強度をカットオフ距離が減少するほど適宜増大する形でこれを実現した。この手法は、クーロンポテンシャルの存在しない 1 次元自由粒子が、1 点のみで力を受ける点状相互作用のある自由粒子問題にも応用ができて、そこでも従来知られている 3 つのデルタ関数による一般的相互作用の構成を滑らかな関数で置き換える有用な手法になっていることを示した。今回の手法は、従来デルタ関数という特異な関数の組み合わせで一般的な点状相互作用を実現してきた。これは従来の手法に比べ、実験的実現性という点で優れている。

## 1.2 構成

本論文は 3 構成となっている。2 章では用語や背景等の説明をする。3 章では非クーロン下における 3 山ポテンシャルの固有値を数値解析的に示した。4 章ではクーロンポテンシャル下での 3 山ポテンシャルの固有値を数値解析的に示した。5 章では付録として計算資源を示した。

## 2 2 章 研究背景

### 2.1 3 次元水素原子

3 次元水素原子は (1) のように表される。

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\nabla^2 \psi(\vec{r}, t) - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\vec{r}|} \psi(\vec{r}, t) \quad (1)$$

$r$  は相対距離を示している。 $\psi(x, t)$  は波動関数を示している。 $\epsilon_0$  は電気定数を示している。 $e$  は電気素量を示している。また、 $\hbar=1$ , 電子質量  $m=1/2$  としている。

3 次元であることから球対称性である。

### 2.2 1 次元水素原子

1 次元の水素原子は (2) の時間依存性を仮定すれば (3) 式のように記述される。1 次元の水素原子は水素を細い管に詰めたり、磁場で押しつぶすことで再現が可能である。

$$\psi(x, t) = \psi(x) e^{-iEt} \quad (2)$$

$$-\psi''(x, t) - \frac{1}{|x|} \psi(x, t) = E \psi(x, t) \quad (3)$$

$1/|x|$  はクーロンポテンシャルの強度を示している。 $E$  は固有エネルギーを示している。

### 2.3 ホイッタカー関数

1 次元水素原子の解としてはホイッタカー関数 (4), (5) が知られている。(4) は第 1 種ホイッタカー関数であり、(5) は第 2 種ホイッタカー関数である。 $F_1$  と  $U_1$  はそれぞれ合流型超幾何級数である。 $F_1$  と  $U_1$  は線型独立な解である。 $F_1$  は原点で有限となり無限遠で無限大となる。 $U_1$  は原点で無限大となり無限遠で有限となる。第 2 種ホイッタカー関数は無限遠で発散をしていないことから 1 次元水素原子の解として知られている。

$$M_{k, \mu}(z) = e^{-\frac{z}{2}} z^{-\frac{1}{2} + \mu} F_1\left(\frac{1}{2} + \mu - k, 1 + 2\mu; z\right) \quad (4)$$

$$W_{k, \mu}(z) = e^{-\frac{z}{2}} z^{-\frac{1}{2} + \mu} U_1\left(\frac{1}{2} + \mu - k, 1 + 2\mu; z\right) \quad (5)$$

### 2.4 クーロン問題

1 次元水素原子の問題点についてはラウドンが最初に考察をした。クーロンポテンシャルの  $-1/|x|$  の特異性により解の波動関数は 0 となる必要がある。このことから 3 次元水素原子の s 軌道と同様にスベ

クトルもリュードベリー型となる。リュードベリー型は以下 (6) のようになる。

$$E = -\frac{1}{n^2} (n = 1, 2, \dots) \quad (6)$$

ラウンドはこのことからクーロンポテンシャルを微小な幅でカットオフをし、カットオフの幅の極限を取るという方法でこれを導入した。

### 3 3 章 非クーロンポテンシャル下の束縛系における非 Loundon 型接続条件

#### 3.1 イントロダクション

私たちはカットオフをした内部に特異なポテンシャルを想定することでラウドンの求めたものとは異なる波動関数が存在しうることを数値解析的に示す。またこれに伴いリュードベリ型ではない新しいタイプのスペクトルが発現しうることを示す。カットオフは2つの方法が考えられ、1つ目の方法はカットオフ内部を0ポテンシャルとする方法であり。2つ目の方法は2カットオフした左右の波動関数を繋ぐような1定のポテンシャルを考える方法である。今回、私たちはカットオフ内部を0ポテンシャルとする方法を用いた。また、カットオフ内に想定する特異な構造のポテンシャルを核ポテンシャルと呼びこれを考察していく。

##### 3.1.1 点状相互作用

まずは特異なポテンシャルである核ポテンシャルを考察するにあたりクーロン相互作用のない点状相互作用を考察していく。流速 (7) が原点で連続であると考えたと (8) のようになる。

$$j = i[\Psi(x)^* \Psi'(x) - \Psi'(x) \Psi(x)^*] \quad (7)$$

j は流速を示している。

$$\Psi(0_-)^* \Psi'(0_-) - \Psi'(0_-)^* \Psi(0_-) = \Psi(0_+)^* \Psi'(0_+) - \Psi'(0_+)^* \Psi(0_+) \quad (8)$$

これは自己共役拡張により以下の一般的条件 (9),(10) となる。

$$\Psi'(0_+) = e^i \lambda [\Psi'(0_-) + v \Psi(0_-)] \quad (9)$$

$$\Psi(0_+) = e^i \lambda [u \Psi'(0_-) + \gamma \Psi(0_-)] \quad (10)$$

自己共役拡張のパラメータである  $u, v$  は (11) のような関係式をとる。

$$-vu = 1 \quad (11)$$

(9),(10) 式の  $u=0$  のときは一般に  $v$  の接続条件とよばれる。境界条件としては (12),(13) となる。

$$\Psi'(0_+) - \Psi'(0_-) = v \Psi(0_-) \quad (12)$$

$$\Psi(0_+) = \Psi(0_-) \quad (13)$$

また、(9),(10) 式の  $u=0$  のときは一般に  $u$  の接続条件とよばれる。境界条件としては (14),(15) となる。

$$\Psi'(0_+) = \Psi(0_-) \quad (14)$$

$$\Psi(0_+) - \Psi'(0_-) = u \Psi'(0_-) \quad (15)$$

次は  $v$  のある系の有限線分上でのシュレディンガー方程式の固有値のスペクトルと波動関数を見ていく。両端でディクレ条件を課し原点部分に  $v$  型点状相互作用  $v$  があるとする。  $v$  型点状相互作用  $v$  は  $x=0$  の位置に存在しているとする。この固有値を数値解析的に求めた。求まった固有値のスペクトルは

(図 1) のようになる。横軸は点状相互作用の値  $v$  の強度を示している。縦軸は波数  $k$  を示しており  $k$  は (16) となる。

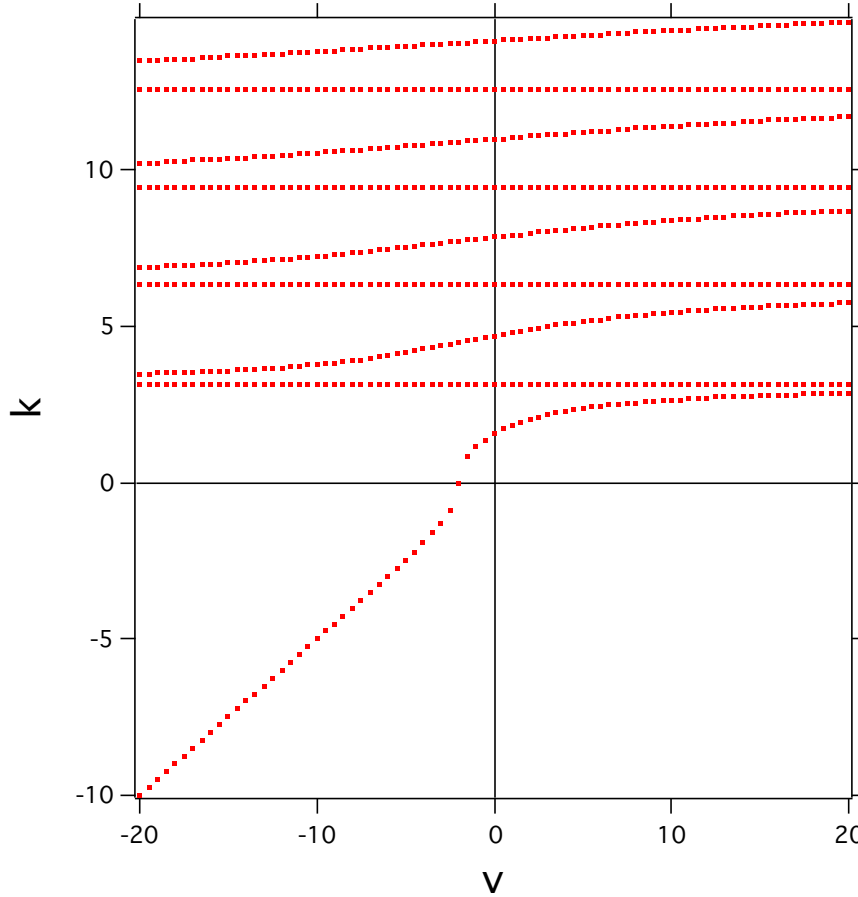


図 1: 型点状相互作用  $v$  がある系のスペクトル

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{h} \quad (16)$$

点状相互作用の強度を変動させても影響を受けない一定の準位はノードが原点を通るものである。点状相互作用の強度を変動させるに連れ準位が縮退していく様子を確認することができる。また、低準位ほど点状相互作用の影響を受けることを確認することができた。次に波動関数を見ていく。まずは (図 1) における点状相互作用の影響を受けている準位ごとの波動関数についてみていく。(図 2) の点状相互作用の影響を受けている準位に記されている番号には、等しい番号が記されている波動関数が対応している。

点状相互作用の強度が  $v=10$  のときにおける変動をしている準位の波動関数を低準位から順に表したものを (図 3),(図 4),(図 5),(図 6),(図 7) と示す。

それぞれの波動関数から原点を中心に原点付近の左右の波動関数は等しいが波動関数の微分に飛びがある様子を確認することができた。次に点状相互作用の影響を受けている基底準位 (図 8) の波動関数について見ていく。(図 8) の点状相互作用の影響を受けている基底準位に記されている番号には、等



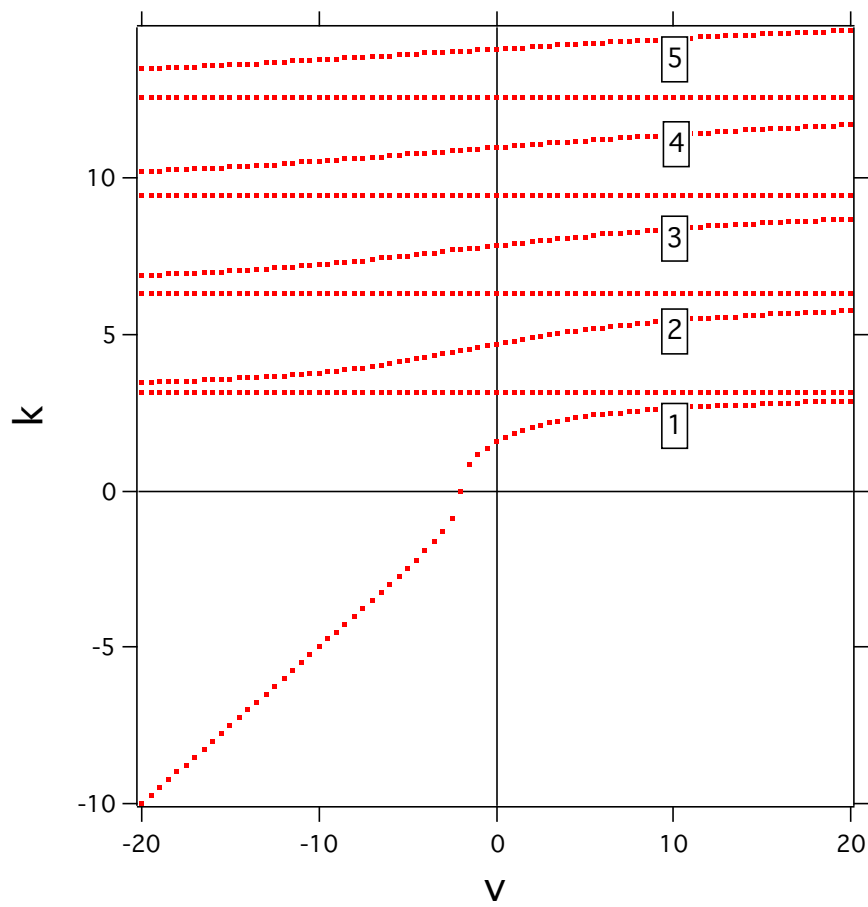


図 2: 型点状相互作用がある系のスペクトル

しい番号が記されている波動関数が対応している。

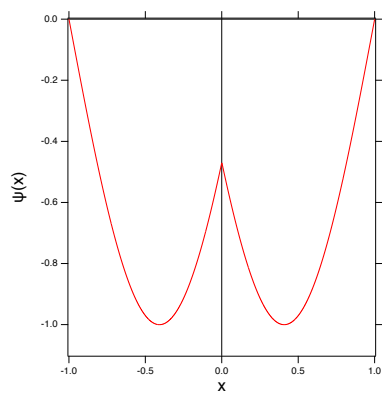


図 3: 1 の波動関数

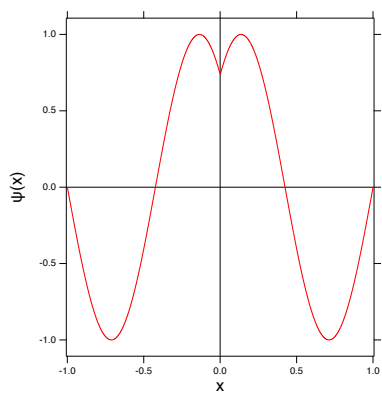


図 4: 2 の波動関数

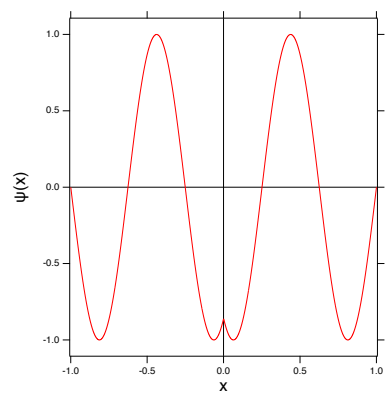


図 5: 3 の波動関数

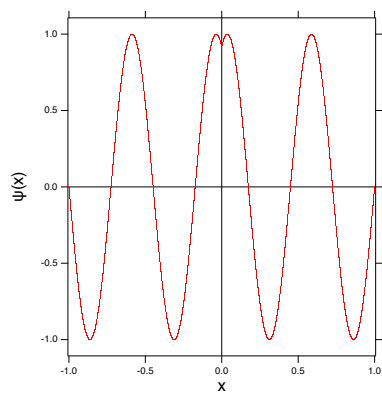


図 6: 4 の波動関数

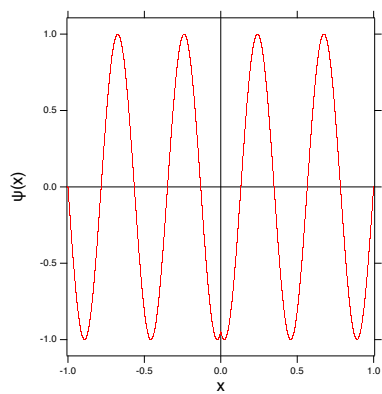


図 7: 5 の波動関数

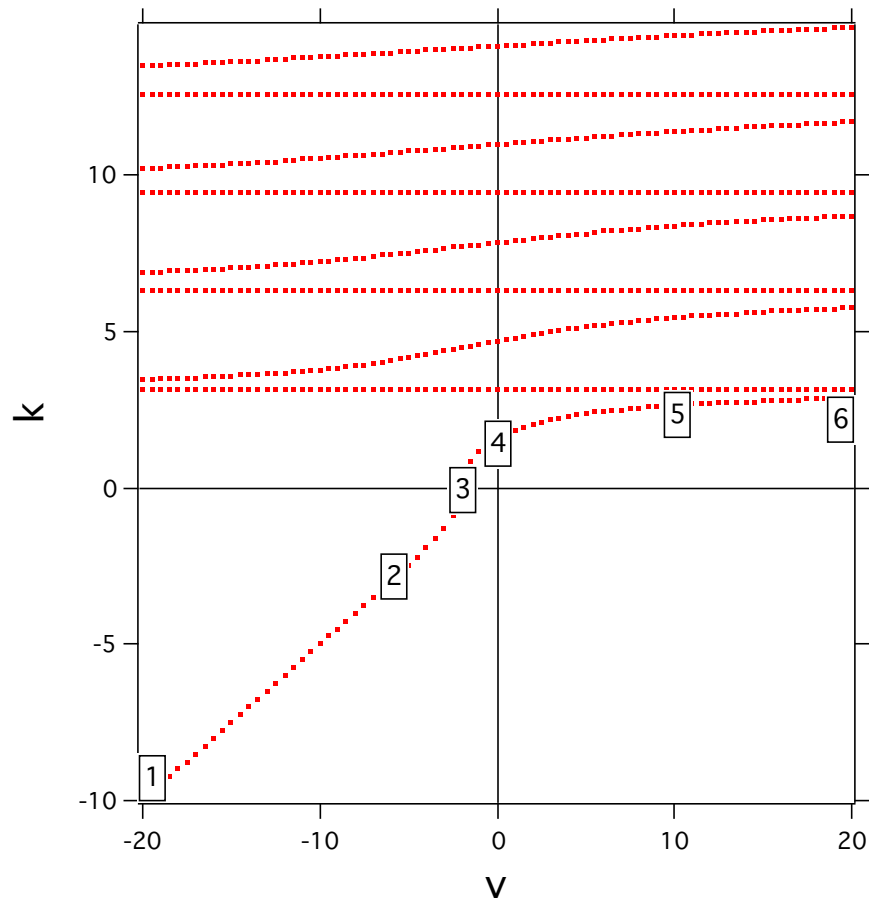


図 8: 型点状相互作用がある系のスペクトル

点状相互作用の強度が 1 から順に  $v=-20, -5, 0, -1.5, 10, 20$  のときの基底準位の波動関数を順に表したものを (図 9), (図 10), (図 11), (図 12), (図 13), (図 14) と示す。

低準位ほど点状相互作用の影響を受けていることを改めて確認することができた。

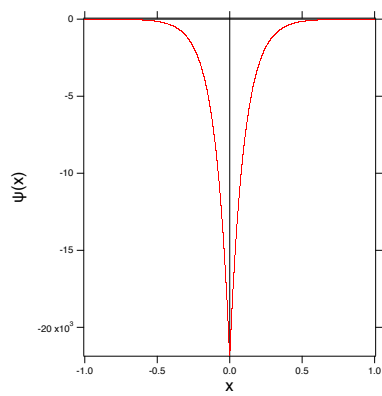


図 9: 1 の波動関数

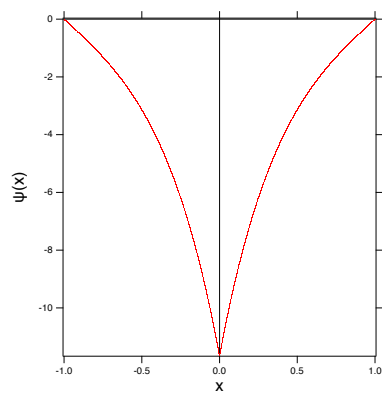


図 10: 2 の波動関数

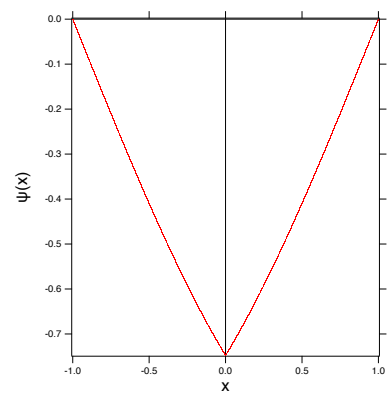


図 11: 3 の波動関数

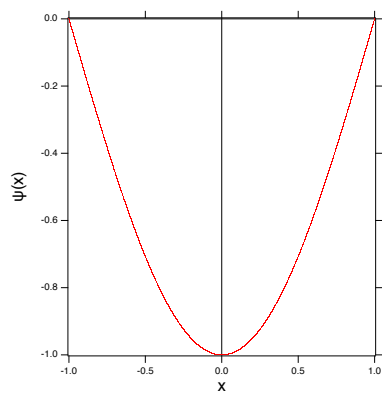


図 12: 4 の波動関数

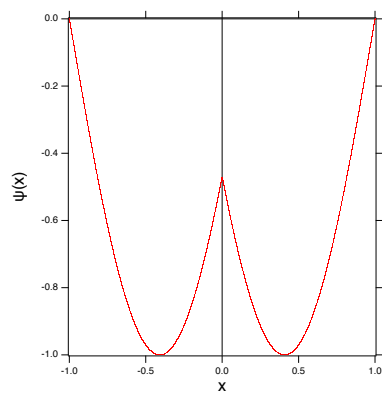


図 13: 5 の波動関数

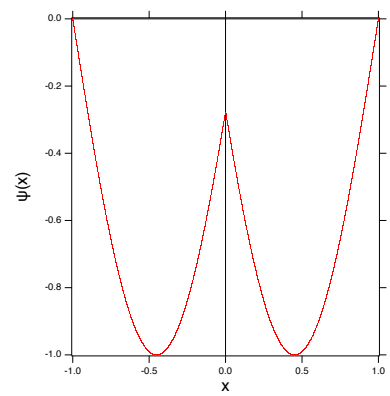


図 14: 6 の波動関数

次は、 $\delta$  のある系の有限線分上でのシュレディンガー方程式の固有値のスペクトルと波動関数を見ていく。両端でディレクレ条件を課し原点部分に  $\delta$  型点状相互作用  $v$  があるとする。この固有値を数値解析的に求めた。求まった固有値のスペクトルは (図 15) のようになる。横軸は点状相互作用の値  $u$  の強度を示している。縦軸は波数  $k$  を示しており  $k$  は (17) となる。

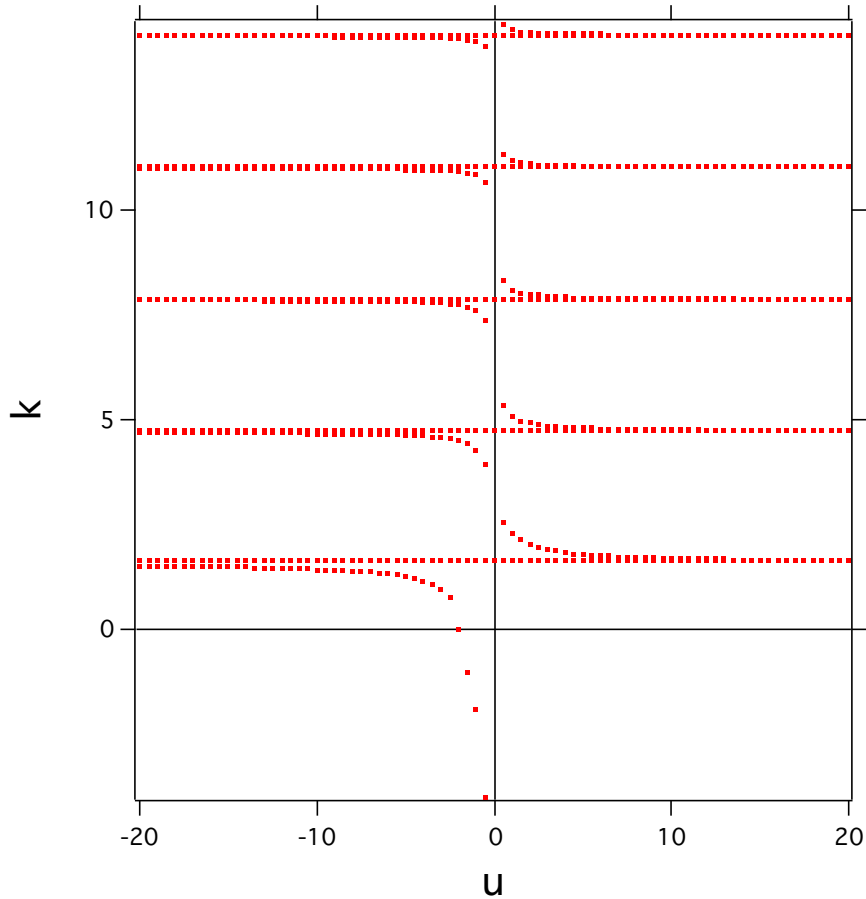


図 15:  $\delta$  型点状相互作用がある場合のスペクトル

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{h} \quad (17)$$

点状相互作用の強度を変動させても影響の受けない一定の準位はノードが原点を通るものである。点状相互作用の強度を変動させるに連れ準位が縮退していく様子を確認することができる。また、低準位ほど点状相互作用の影響を受けることを確認することができた。

次に波動関数を見ていく。まずは点状相互作用の影響を受けている準位ごと (図 16) の波動関数についてみていく。(図 16) の点状相互作用の影響を受けている準位に記されている番号には、等しい番号が記されている波動関数が対応している。

点状相互作用の強度が  $u=10$  のときの変動をしている準位の波動関数を低準位から順に表したものを (図 17),(図 18),(図 19),(図 20),(図 21) と示す。

それぞれの波動関数から原点を中心に原点付近の左右の波動関数の微分が等しいが波動関数に飛び

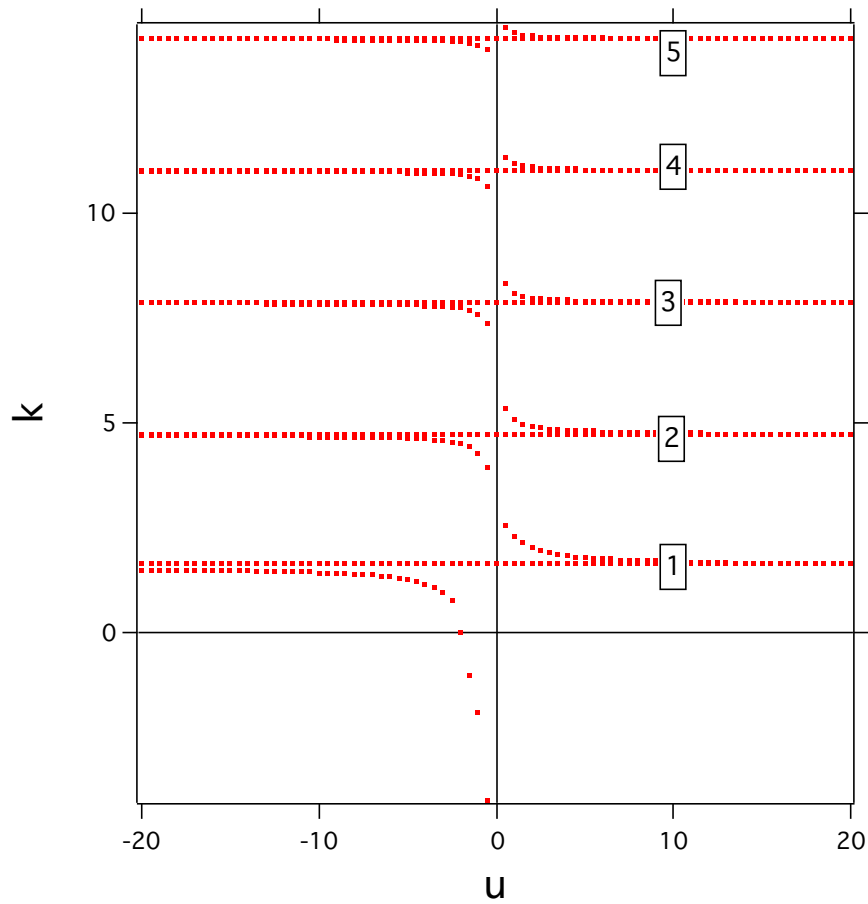


図 16:  $\delta$  型点状相互作用がある場合のスペクトル

がある様子が確認できた。次に点状相互作用の影響を受けている基底準位 (図 22) の波動関数について見ていく。(図 22) の点状相互作用の影響を受けている基底準位に記されている番号には、等しい番号が記されている波動関数が対応している。

点状相互作用の強度が 1 から順に  $v=-20, -10, -0.5, 0.5, 10, 20$  のときの基底準位の波動関数を順に表したものを (図 23), (図 24), (図 25), (図 26), (図 27), (図 28) と示す。

それぞれの波動関数から原点を付近ほど点状相互作用の影響を受けている様子が確認できた。

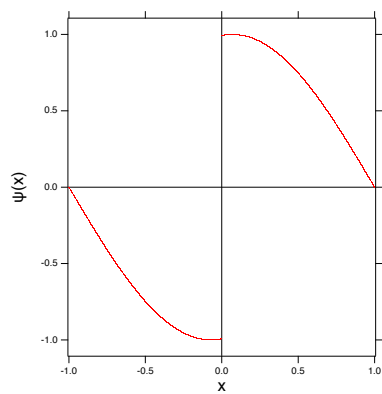


図 17: 1 の波動関数

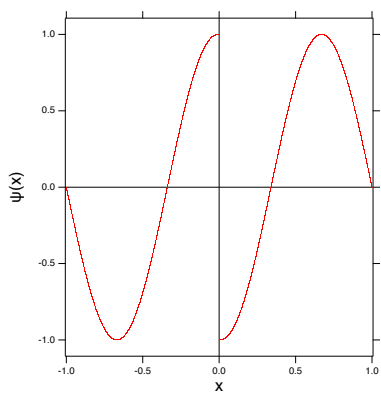


図 18: 2 の波動関数

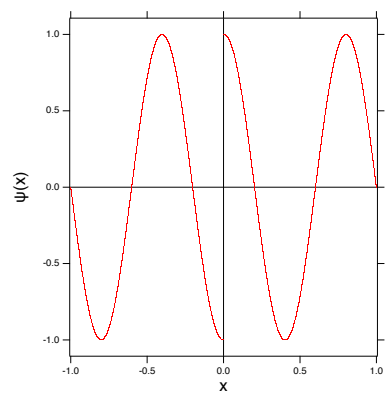


図 19: 3 の波動関数

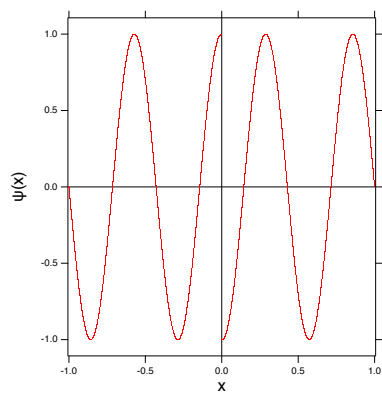


図 20: 4 の波動関数

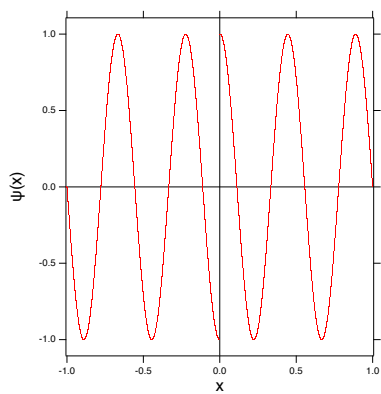


図 21: 5 の波動関数

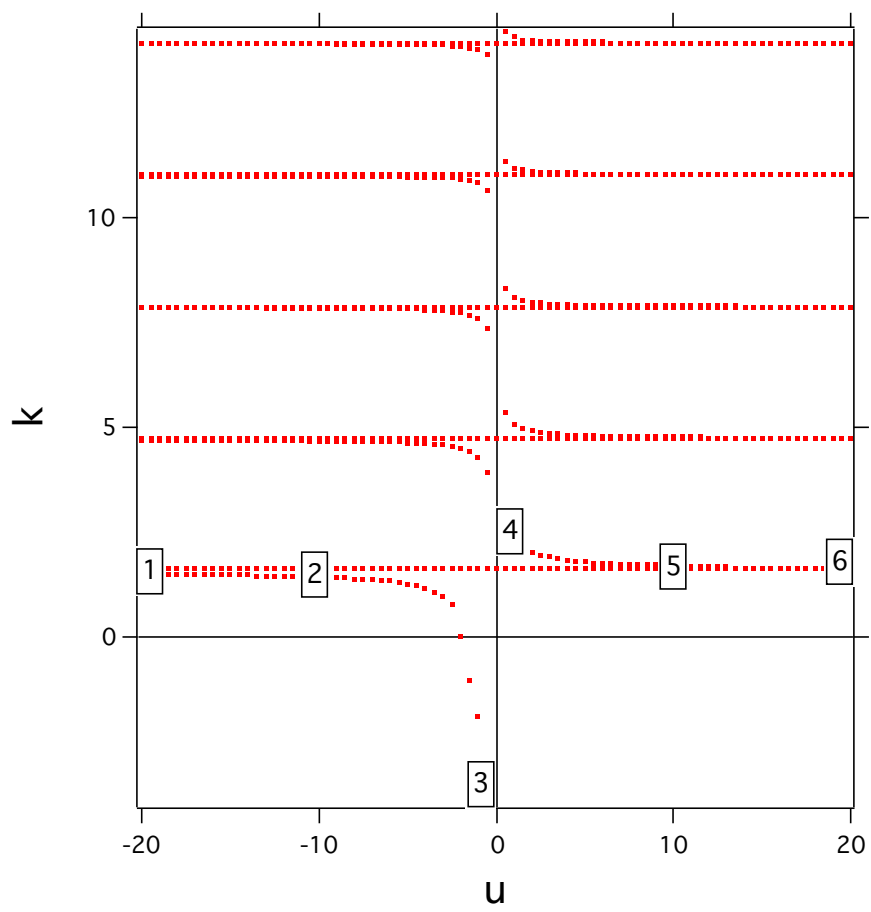


図 22: 型点状相互作用がある場合のスペクトル



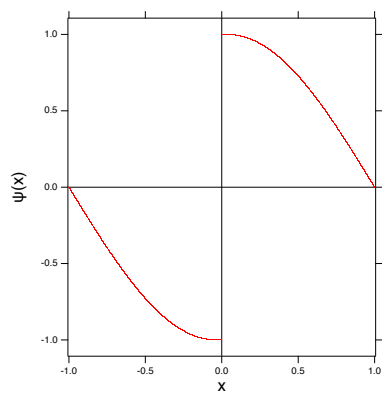


図 23: 1 の波動関数

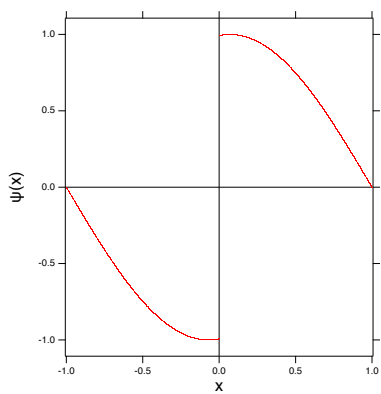


図 24: 2 の波動関数

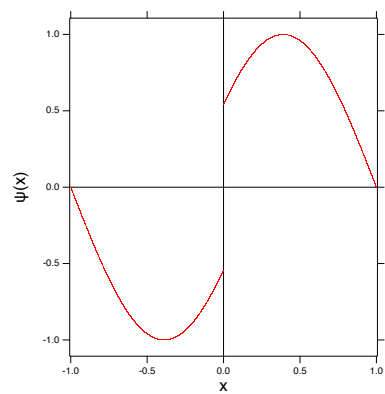


図 25: 3 の波動関数

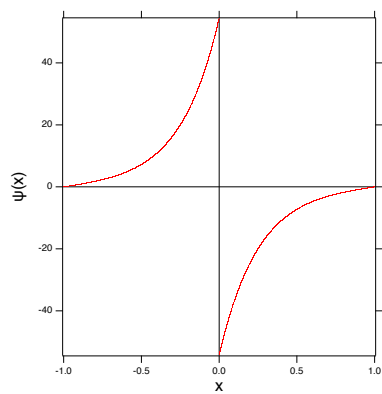


図 26: 4 の波動関数

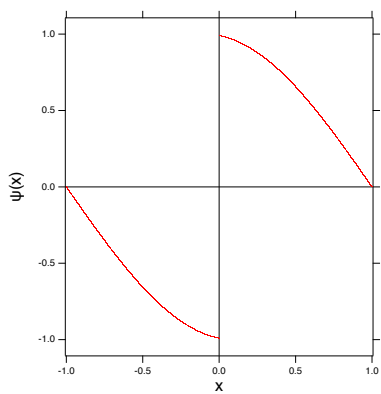


図 27: 5 の波動関数

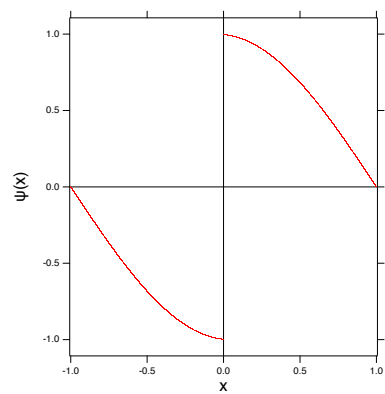


図 28: 6 の波動関数

### 3.1.2 原点付近の微小な領域での核ポテンシャルによる $\psi'$ の実現

まずは非クーロン下の場合についてみていく。1次元の原点に  $\delta$  型の点状相互作用  $v$  があるとする。また、原点を中心とした左右  $d/2$  の位置に  $\delta$  型の点状相互作用  $u$  があるとする。これら3つのポテンシャルを一番外側のポテンシャルのみの要素に書き換えると以下のような (18),(19),(20) 式となる。

$$v_n = \frac{u}{d^2} \quad (18)$$

$$u_n1 = -\frac{1}{d} - \frac{1}{u} \quad (19)$$

$$u_n2 = -\frac{1}{d} - \frac{1}{u} \quad (20)$$

またこの式の  $d \rightarrow 0$  をとることで更に以下の (21),(22) 式となる。

$$\psi'(d) = \psi'(-d) \quad (21)$$

$$\psi(d) - \psi(-d) = u\psi'(\pm d) \quad (22)$$

この式は3つの  $\delta$  型点状相互作用を組み合わせることによって  $\psi'$  型のポテンシャルを実現することが可能であることを示している。

次にクーロン下の場合をみていく。非クーロン下の場合と同様の手法を用いることで以下 (23),(24),(25) 式となる。

$$u1 = -\frac{1}{2d} - \log(d) + \frac{1}{4}(1 + \sin(2\omega) + \cos(2\omega)) * \tan\frac{\theta_-}{2} + \frac{1}{4}(1 - \sin(2\omega) - \cos(2\omega)) \tan\frac{\theta_+}{2} \quad (23)$$

$$v = -\frac{1}{d} + \frac{1}{d^2} \frac{\csc(2\omega)}{\tan(\frac{\theta_-}{2}) - \tan(\frac{\theta_+}{2})} \quad (24)$$

$$u2 = -\frac{1}{2d} - \log(d) + \frac{1}{4}(1 + \sin(2\omega)) - \cos(2\omega) \tan\frac{\theta_-}{2} + \frac{1}{4}(1 - \sin(2\omega) + \cos(2\omega)) \tan\frac{\theta_+}{2} \quad (25)$$

は左右のパラメータを示しており、 $\omega$  は原点付近の波動関数の振る舞いのパラメータを示している。まずはこのポテンシャルにおける非クーロン下でのスペクトルを考察していく。

### 3.2 設定と結果

クーロンポテンシャルの存在しない、井戸型ポテンシャル内の粒子について考察していく。使用する波動関数は以下 (26) 式ようになる。

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t) + V(x)\psi(x,t) \quad (26)$$

$V(x)$  はエネルギーポテンシャルを示している。解としては式 (27) となる。

$$\phi(x) = C_1 \exp(ikx) + C_2 \exp(-ikx) \quad (27)$$

$C_1, C_2$  は定数である。

カットオフ内に想定をする特異ポテンシャルである核ポテンシャルは以下のように設定する。3 山核ポテンシャルの場合のエネルギーポテンシャルは以下の構造 (28),(図 29) となる。

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (-L < x < -\frac{d}{2}) \\ u1 & (-\frac{d}{2} < x < -\frac{3a}{2}) \\ v & (-\frac{3a}{2} < x < \frac{3a}{2}) \\ u2 & (\frac{3a}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ 0 & (\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (28)$$

このエネルギーポテンシャルをタイプ A とする。 $v, u1, u2$  のパラメータである  $v$  は左右の対称性に関

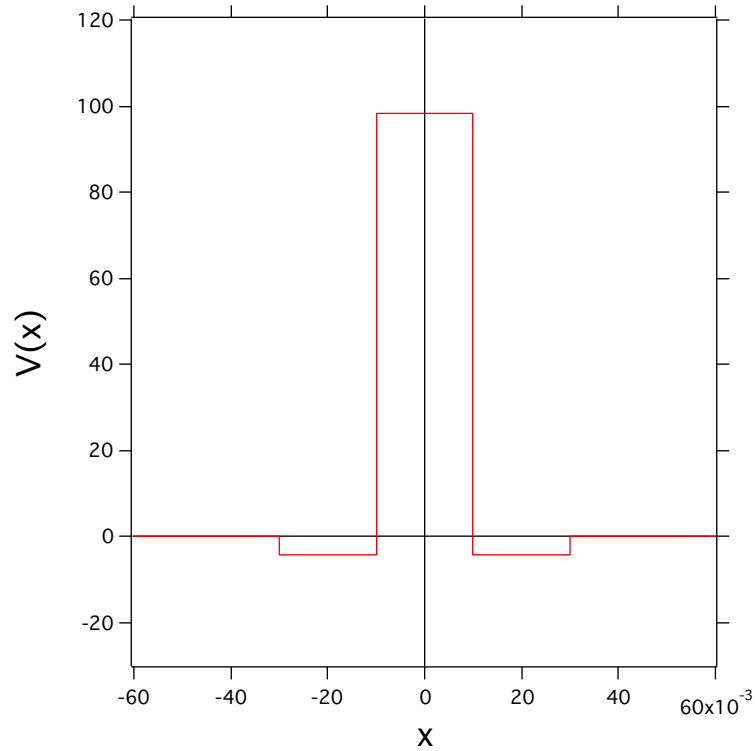


図 29: 3 山核ポテンシャル

するパラメータであることから は 変動以外の場合においては左右が対称である  $L/4$  を用いる。また、1 山核ポテンシャルの場合のエネルギーポテンシャルは以下の構造 (29) となる。

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (-L < x < -\frac{d}{2}) \\ v & (-\frac{d}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ 0 & (\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (29)$$

このエネルギーポテンシャルをタイプ A' とする。

### 3.2.1 1 山核ポテンシャルのパラメータ変動

核ポテンシャルが 1 山ポテンシャルの場合を考察していく。1 山核ポテンシャルのエネルギーポテンシャルを (30) とする。これはタイプ A' の場合である。

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (-L < x < -\frac{d}{2}) \\ v & (-\frac{d}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ 0 & (\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (30)$$

得られたスペクトルは (図 30),(図 31) となる。d=0.06,a=0.06 の場合の 1 山核ポテンシャルの強度パラ

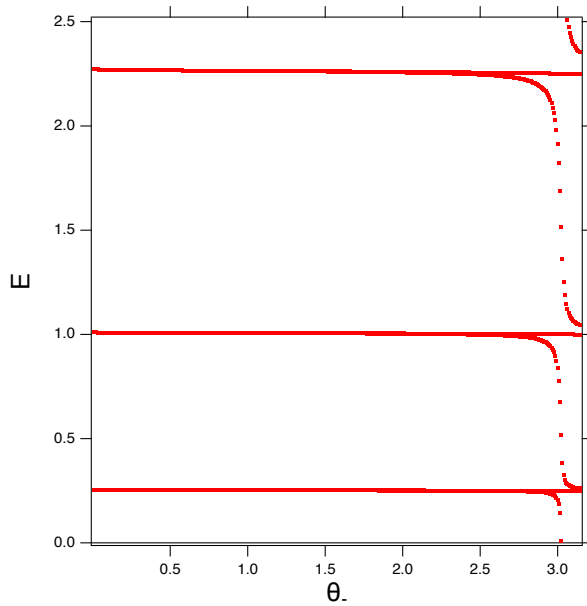


図 30: 1 山核ポテンシャルのパラメータ変動全体図

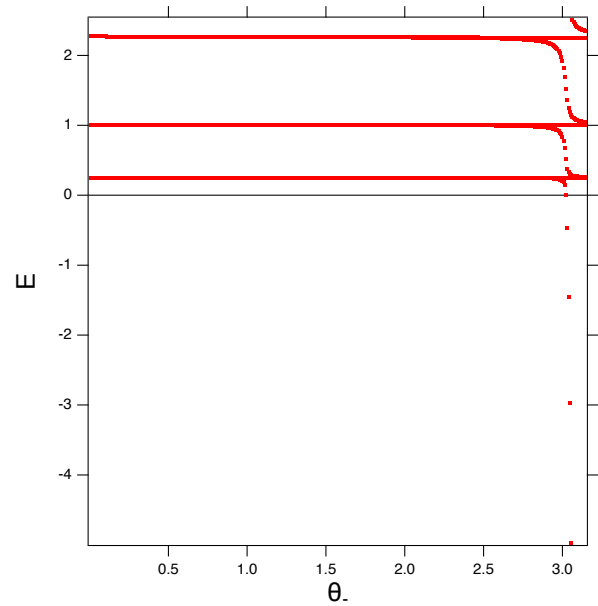


図 31: 1 山核ポテンシャルのパラメータ変動

メータである  $\theta$  を変動した際のスペクトルである。ある一定の値以上に  $\theta$  を大きくするに連れ固有値が急激に分離し、定常のものとエネルギーが落ち込むものとが確認された。1 山ポテンシャルの幅を d とする。またカットオフの幅を d とする。

### 3.2.2 3山核ポテンシャルのパラメータ変動

核ポテンシャルが3山核ポテンシャルの場合を考察していく。3山核ポテンシャルの場合のエネルギーポテンシャルを(31)とする。これはタイプAの場合である。

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (-L < x < -\frac{d}{2}) \\ u1 & (-\frac{d}{2} < x < -\frac{3a}{2}) \\ v & (-\frac{3a}{2} < x < \frac{3a}{2}) \\ u2 & (\frac{3a}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ 0 & (\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (31)$$

得られたスペクトルは(図32),(図33)となる。d=0.06, a=0.02 の場合の3山核ポテンシャルの強度パラ

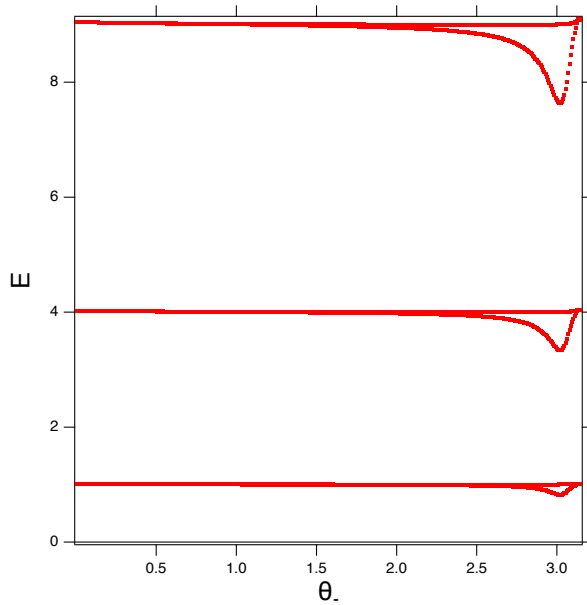


図 32: 3山核ポテンシャルのパラメータ変動全体図

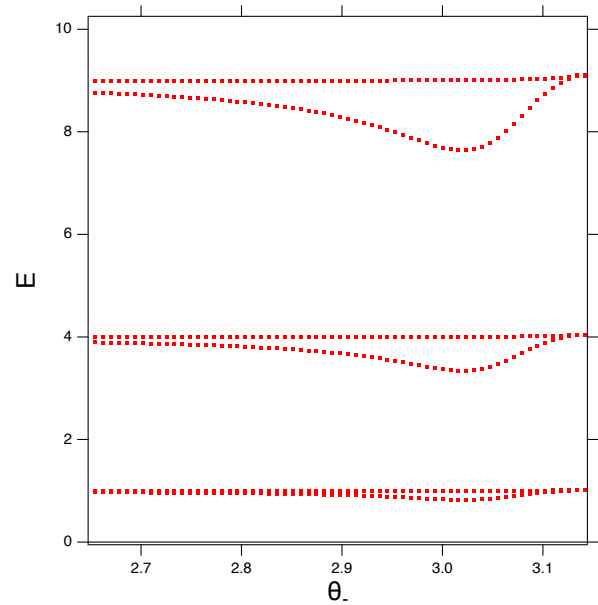


図 33: 3山核ポテンシャルのパラメータ変動

メータである  $\theta$  を変動した際のスペクトルである。  $\theta$  を大きくするに連れ固有値が分離し、定常のものとエネルギーが落ち込むものとが確認された。3山核ポテンシャルの1山核ポテンシャルの幅を  $a$  とする。また3山核ポテンシャルの幅を  $d$  とする。

### 3.3 Cos 型核ポテンシャル

これまで考察してきたエネルギーは矩形のエネルギーである。実験では矩形のエネルギーポテンシャルよりもより滑らかなエネルギーの方が再現可能であることから、より滑らかなエネルギーを考察していきたい。このことから核ポテンシャルを変形する因子を導入する。因子としては以下(32)のようになる。

$$f_a(x) = \frac{\pi}{2a} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \quad (32)$$

$a$  は核ポテンシャルの幅である。この因子を導入することでカットオフ内に想定をする比較的滑らかな特異ポテンシャルである核ポテンシャルは以下のように設定する。3 山 Cos 型核ポテンシャルの場合のエネルギーポテンシャルは以下の構造 (33),(図 34) となる。

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (-L < x < -\frac{d}{2}) \\ u1 f_a(x+a) & (-\frac{d}{2} < x < -\frac{3a}{2}) \\ v f_a(x) & (-\frac{3a}{2} < x < \frac{3a}{2}) \\ u2 f_a(x-a) & (\frac{3a}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ 0 & (\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (33)$$

このエネルギーポテンシャルをタイプ B とする。また、1 山 Cos 型核ポテンシャルの場合のエネル

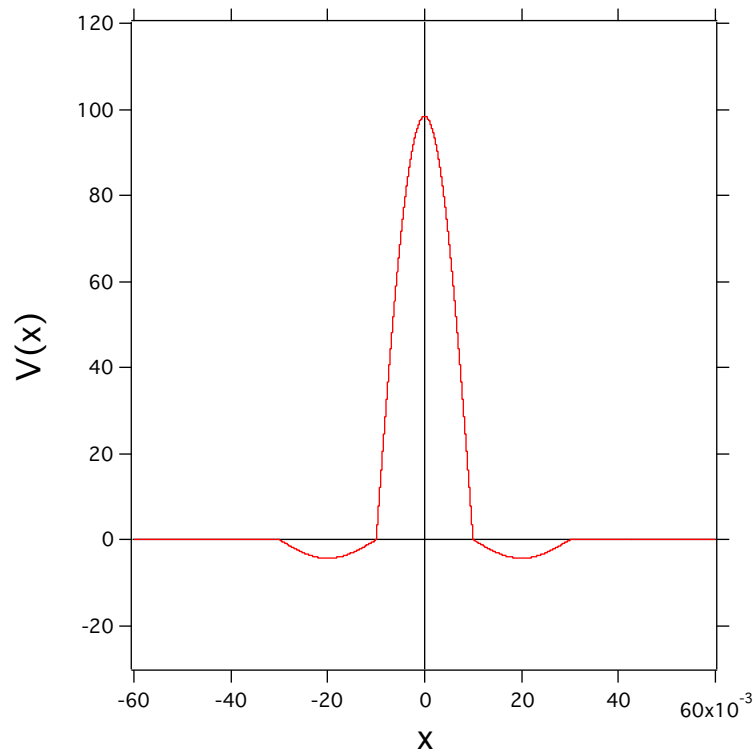


図 34: 3 山 Cos 型核ポテンシャル

ギーポテンシャルは以下の構造 (34) となる。

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (-L < x < -\frac{d}{2}) \\ v f_a(x) & (-\frac{d}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ 0 & (\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (34)$$

このエネルギーポテンシャルをタイプ B' とする。

### 3.3.1 1 山 Cos 型核ポテンシャル

核ポテンシャルが 1 山 Cos 型ポテンシャルの場合を考察していく。1 山 Cos 型核ポテンシャルの場合のエネルギーポテンシャルを (35) とする。これはタイプ B' の場合である。

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (-L < x < -\frac{d}{2}) \\ v f_a(x) & (-\frac{d}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ 0 & (\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (35)$$

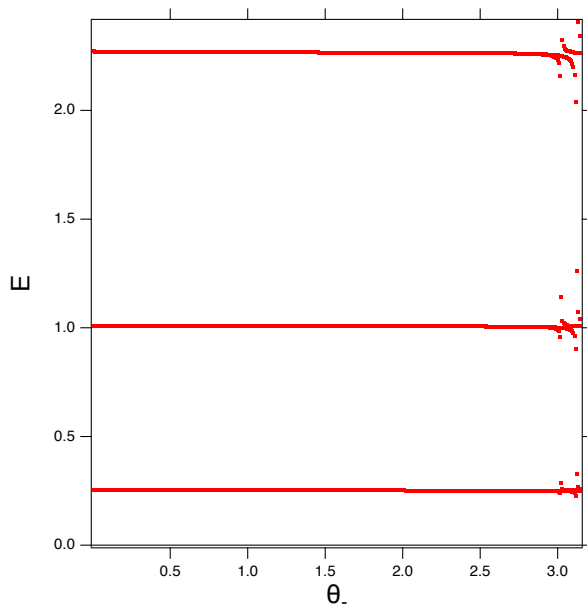


図 35: 1 山 Cos 型核ポテンシャル変動全体図

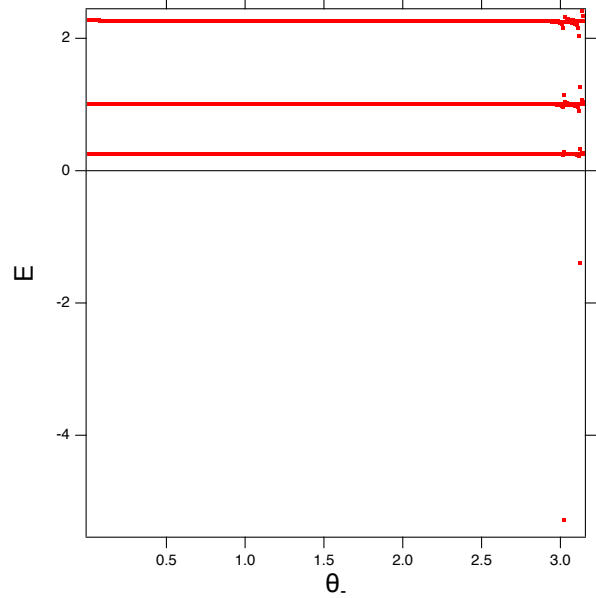


図 36: 1 山 Cos 型核ポテンシャル変動

得られたスペクトルは (図 35), (図 36) となる。d=0.06, a=0.06 の場合の 1 山 Cos 型核ポテンシャルの強度パラメータである  $v$  を変動した際のスペクトルである。ある一定の値以上に  $v$  を大きくすると連れ固有値が急激に分離することが確認された。また分離が同時ではないことが確認できる。さらにある一定の値周辺で準位が発散している様子を確認することができる。1 山 Cos 型核ポテンシャルの幅を d とする。またカットオフの幅を d とする。

### 3.3.2 3 山 Cos 型核ポテンシャル

核ポテンシャルが 3 山 Cos 型ポテンシャルの場合を考察していく。3 山 Cos 型核ポテンシャルの場合のエネルギーポテンシャルを (36) とする。これはタイプ B の場合である。

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (-L < x < -\frac{d}{2}) \\ u1 f_a(x+a) & (-\frac{d}{2} < x < -\frac{3a}{2}) \\ v f_a(x) & (-\frac{3a}{2} < x < \frac{3a}{2}) \\ u2 f_a(x-a) & (\frac{3a}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ 0 & (\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (36)$$

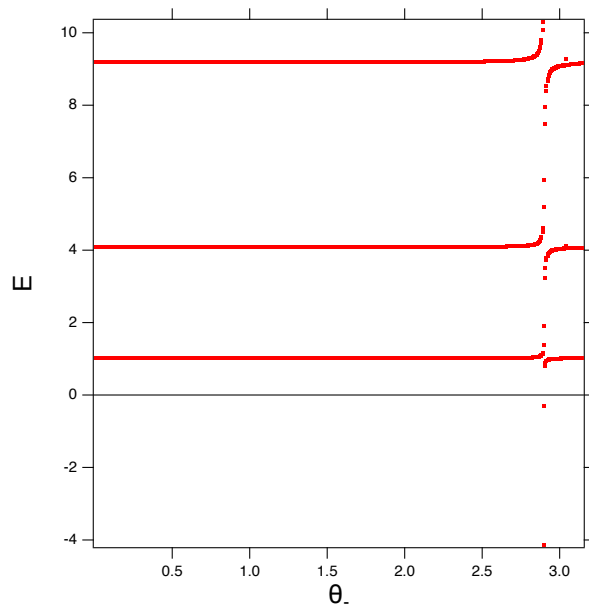


図 37: 3 山 Cos 型核ポテンシャル変動全体図

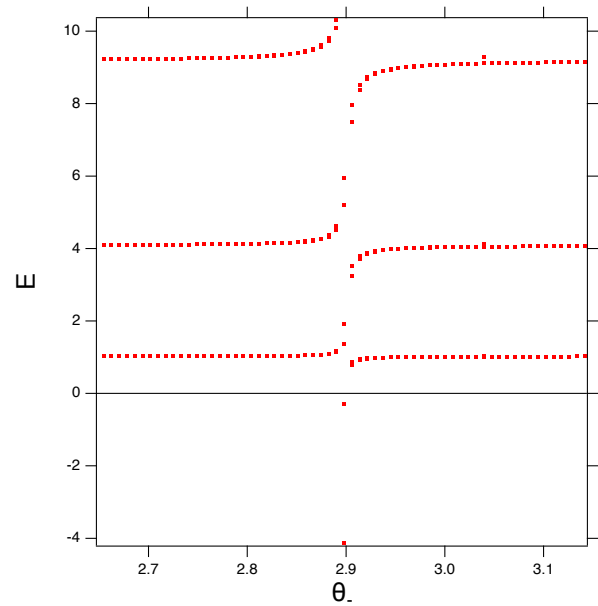


図 38: 3 山 Cos 型核ポテンシャル変動

得られたスペクトルは(図 37),(図 38)となる。 $d=0.06, a=0.06$  の場合の 3 山 Cos 型核ポテンシャルの強度パラメータである  $\lambda$  を変動した際のスペクトルである。ある一定の値以上に  $\lambda$  を大きくするに連れ固有値が急激に分離することが確認された。また、ある一定の値周辺で準位が発散している様子を確認することができる。1 山 Cos 型核ポテンシャルの幅を  $a$  とする。またカットオフの幅を  $d$  とする。



### 3.4 まとめと展望

1 山核ポテンシャル、3 山核ポテンシャル、1 山 Cos 型核ポテンシャル、3 山 Cos 型核ポテンシャルにおけるスペクトルを求めた。数値解析的に特異なスペクトルを再現することができた。ポテンシャルを構成するパラメータを変動するにつれスペクトルが分離する様子を確認することができた。また、3 山ポテンシャルと 3 山 Cos 型ポテンシャルでは差異が見られるが双方共特異な準位を示すことが分かった。次の章からはクーロンポテンシャル系での 3 山ポテンシャルを考察していく。

## 4 4 章 クーロンポテンシャル下の束縛系における非 Loundon 型接続条件

### 4.1 イントロダクション

クーロンポテンシャルの存在する場合のスペクトルを考察する。1次元クーロンポテンシャル下の波動関数は式 (3) となる。また、解はホイットカー関数 (5) となる。今回は 3 章と同様に中心部分をカットオフしその中心にポテンシャルを設置し、それによる影響を数値解析的に求めた。また、クーロンポテンシャルの幅を広く取ること安定な解であるか調べた。クーロン下における 3 山核ポテンシャルにおけるエネルギーポテンシャルは以下 (37),(図 39) の構造となる。

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{1}{|x|} (-L < x < -\frac{d}{2}) \\ u1 (-\frac{d}{2} < x < -\frac{3a}{2}) \\ v (-\frac{3a}{2} < x < \frac{3a}{2}) \\ u2 (\frac{3a}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ -\frac{1}{|x|} (\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (37)$$

はクーロンポテンシャルである。このエネルギーポテンシャルをタイプ A' とする。また、クーロン

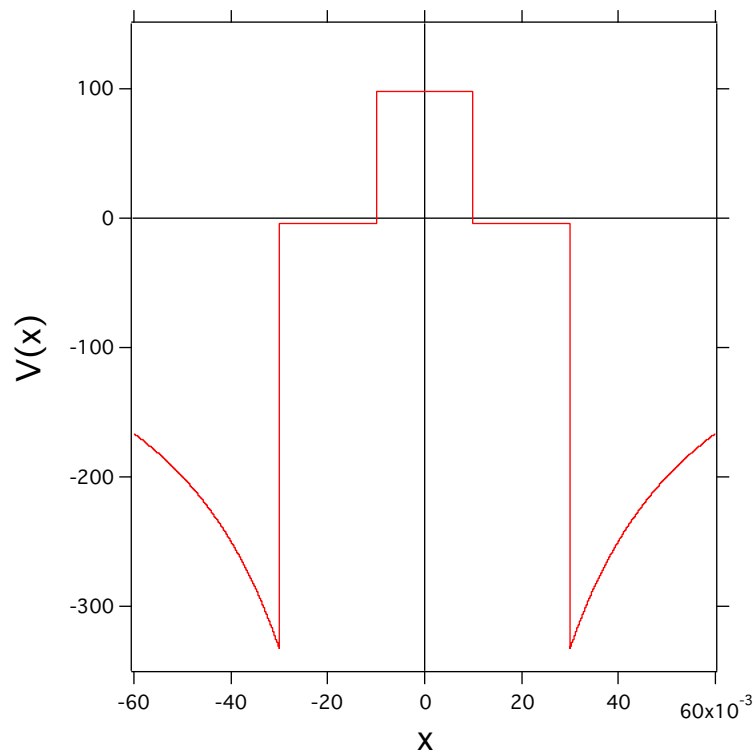


図 39: クーロン下における 3 山核ポテンシャル

下における 1 山核ポテンシャルの場合のエネルギーポテンシャルは以下の構造 (38) となる。

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{1}{|x|} (-L < x < -\frac{d}{2}) \\ v (-\frac{d}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ -\frac{1}{|x|} (\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (38)$$

このエネルギーポテンシャルをタイプ A'' とする。

クーロン下における 3 山 Cos 型核ポテンシャルにおけるエネルギーポテンシャルは以下 (39),(図 40) の構造となる。

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{1}{|x|} (-L < x < -\frac{d}{2}) \\ u1 f_a(x+a) (-\frac{d}{2} < x < -\frac{3a}{2}) \\ v f_a(x) (-\frac{3a}{2} < x < \frac{3a}{2}) \\ u2 f_a(x-a) (\frac{3a}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ -\frac{1}{|x|} (\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (39)$$

このエネルギーポテンシャルをタイプ B'' とする。また、クーロン下における 1 山 Cos 型核ポテン

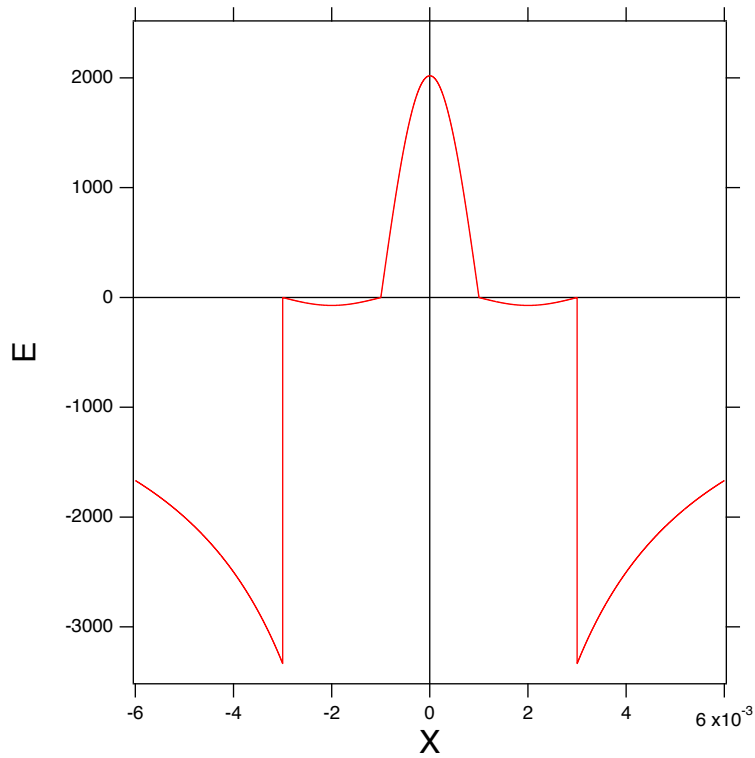


図 40: クーロン下における 3 山 Cos 型核ポテンシャル

シャルの場合のエネルギーポテンシャルは以下の構造 (40) となる。

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{1}{|x|} (-L < x < -\frac{d}{2}) \\ v f_a(x) (-\frac{d}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ -\frac{1}{|x|} (\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (40)$$

このエネルギーポテンシャルをタイプ B''' とする。

## 4.2 設定と結果

### 4.2.1 クーロンのみの場合のスペクトルとポテンシャル構造

まずはクーロンポテンシャルのみの場合を考察していく。クーロンポテンシャルのみが存在する場合のエネルギーポテンシャルを (41) とする。

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{1}{|x|} & (-L < x < -\frac{d}{2}) \\ 0 & (-\frac{d}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ -\frac{1}{|x|} & (\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (41)$$

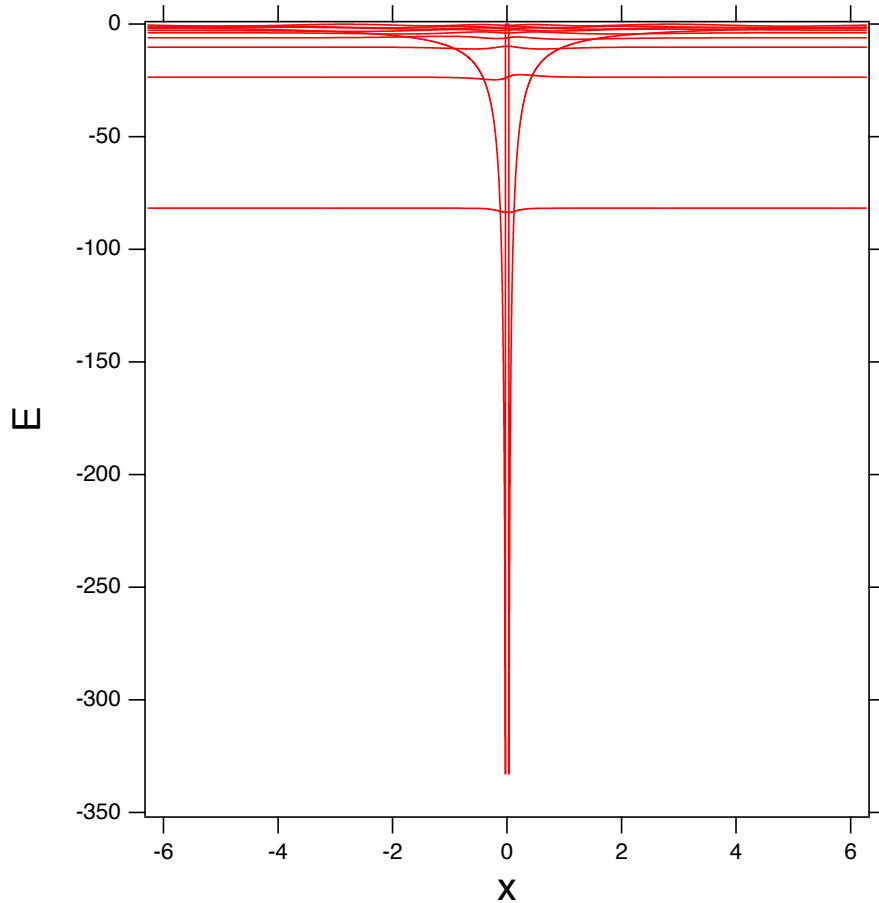


図 41: クーロンポテンシャルのみのスペクトルとポテンシャル構造

得られたスペクトルは (図 41) となる。クーロンポテンシャルのみが存在し、中心部分の微小な範囲でカットオフしたものはリュードベリスペクトルを得ることが確認できた。

#### 4.2.2 クーロンポテンシャルの強度変更

クーロンポテンシャルのみが存在する系でのクーロンポテンシャル強度変更を考察していく。クーロンポテンシャルのみが存在する場合のエネルギーポテンシャルを (42) とする。

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{1}{|x|} (-L < x < -\frac{d}{2}) \\ 0 (-\frac{d}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ -\frac{1}{|x|} (\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (42)$$

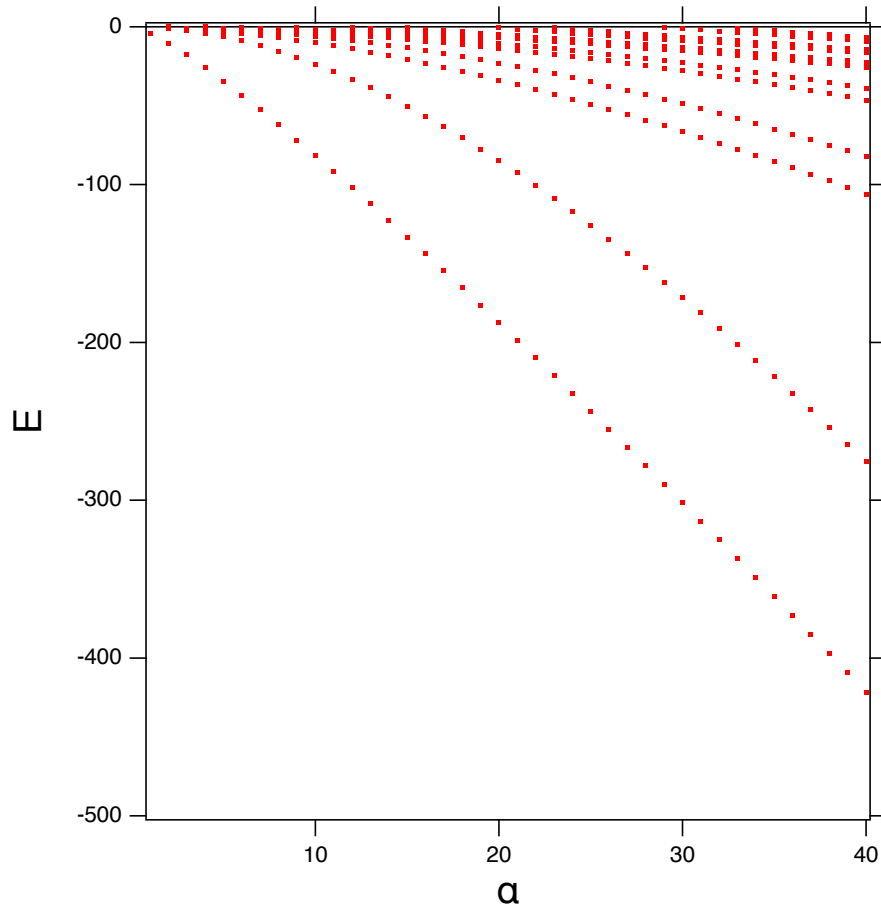


図 42: クーロンポテンシャルの強度変更

得られたスペクトルは (図 42) となる。 $d=0.06$  の場合のクーロンポテンシャルの強度パラメータ  $\alpha$  を変動した際のスペクトルである。クーロンポテンシャルを大きくするに連れ準位が落ち込んでいく様子を確認することができた。また、クーロンポテンシャルが大きい場合は核ポテンシャル有限法による効果が出ていることがわかる。つまり構成法により核ポテンシャルにトラップされる人為的準位レベルが発現していることを示している。カットオフの幅が極限である場合はこの準位は存在しない。また、カットオフの幅を  $d$  とする。

#### 4.2.3 3山核ポテンシャルが存在する場合のクーロン変動

3山核ポテンシャルが存在する系でのクーロンポテンシャル強度変更を考察していく。3山核ポテンシャルが存在する場合のエネルギーポテンシャルを(43)とする。これはタイプA'の場合である。

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{1}{|x|} (-L < x < -\frac{d}{2}) \\ u1(-\frac{d}{2} < x < -\frac{3a}{2}) \\ v(-\frac{3a}{2} < x < \frac{3a}{2}) \\ u2(\frac{3a}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ -\frac{1}{|x|} (\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (43)$$

得られたスペクトルは(図43)となる。1山ポテンシャルの幅が0.02であり、カットオフの幅が0.06

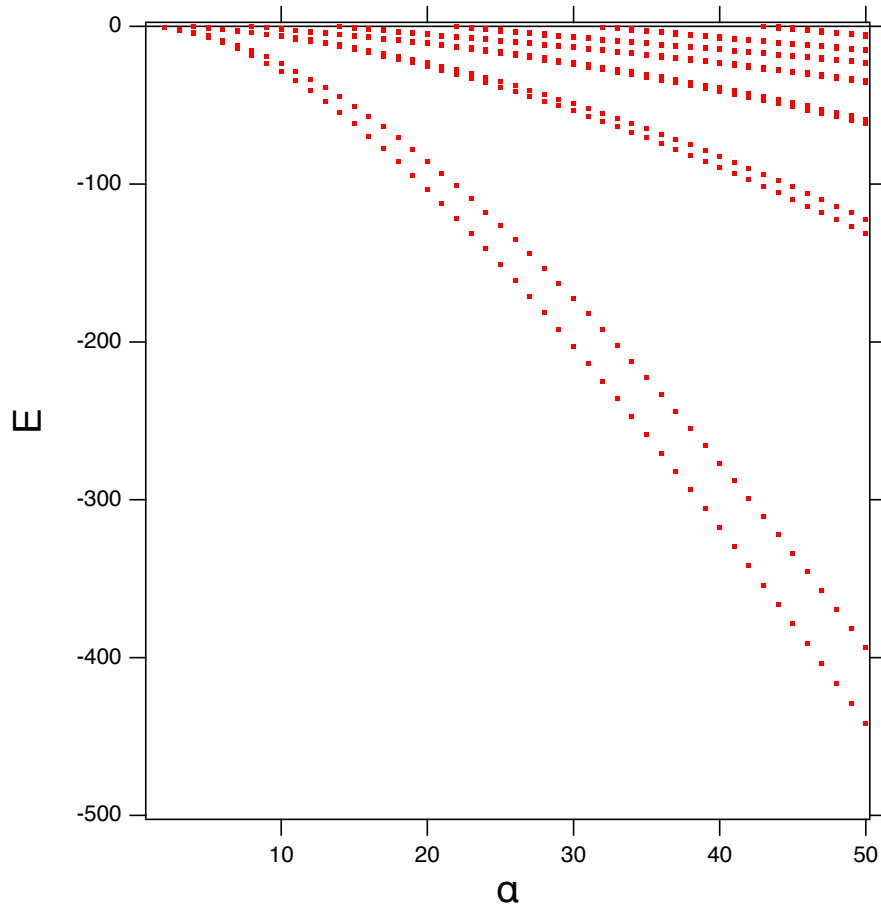


図 43: 3山核ポテンシャルが存在する場合のクーロン変動

であり、カットオフ内部の3山核ポテンシャルの強度パラメータである  $\alpha$  が300である場合でのクーロンポテンシャルのパラメータである  $\alpha$  を変動した結果である。  $\alpha$  を大きくするに連れ準位が分裂する様子が確認できた。また  $\alpha$  に依存し準位が滑らかに落ちていく様子を確認することができた。

#### 4.2.4 1 山核ポテンシャル $\mu$ 変動

1 山核ポテンシャルが存在する系での核ポテンシャルのパラメータである  $\mu$  変動の場合を考察していく。  
1 山核ポテンシャルが存在する場合のエネルギーポテンシャルを (44) とする。これはタイプ A''' の場合である。

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{1}{|x|}(-L < x < -\frac{d}{2}) \\ v(-\frac{d}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ -\frac{1}{|x|}(\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (44)$$

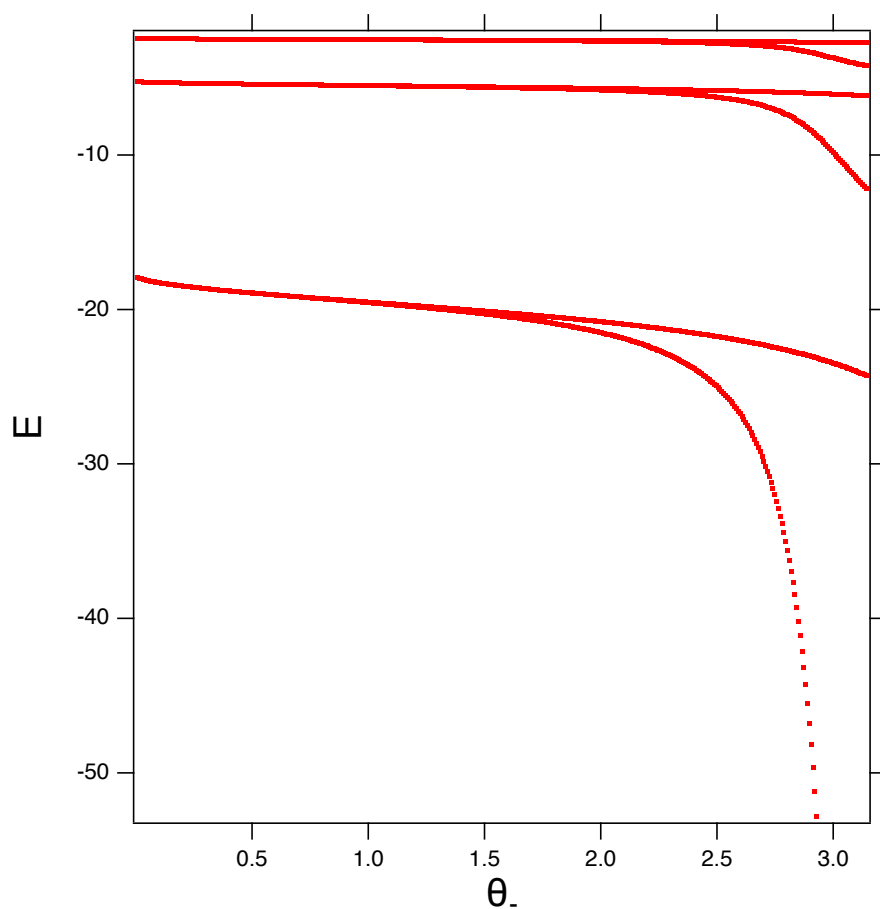


図 44: クーロンポテンシャルの強度が 10 で 1 山核ポテンシャル変動

得られたスペクトルは (図 44) となる。1 山ポテンシャルの幅が 0.06 であり、カットオフの幅が 0.06 であり、クーロンポテンシャルが 10 の場合のカットオフ内部に 1 山核ポテンシャルのパラメータである  $\mu$  を変動した結果である。 $\mu$  を増加させるに連れ準位が分裂し、分裂した低準位が  $\mu$  に依存し滑らかに落ちていく様子が確認できた。また、基底準位は速く落ちていく様子も確認できた。

#### 4.2.5 3 山核ポテンシャル 変動

3 山核ポテンシャルが存在する系での核ポテンシャルのパラメータである 変動の場合を考察していく。3 山核ポテンシャルが存在する場合のエネルギーポテンシャルを (45) とする。これはタイプ A' の場合である。

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{1}{|x|}(-L < x < -\frac{d}{2}) \\ u1(-\frac{d}{2} < x < -\frac{3a}{2}) \\ v(-\frac{3a}{2} < x < \frac{3a}{2}) \\ u2(\frac{3a}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ -\frac{1}{|x|}(\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (45)$$

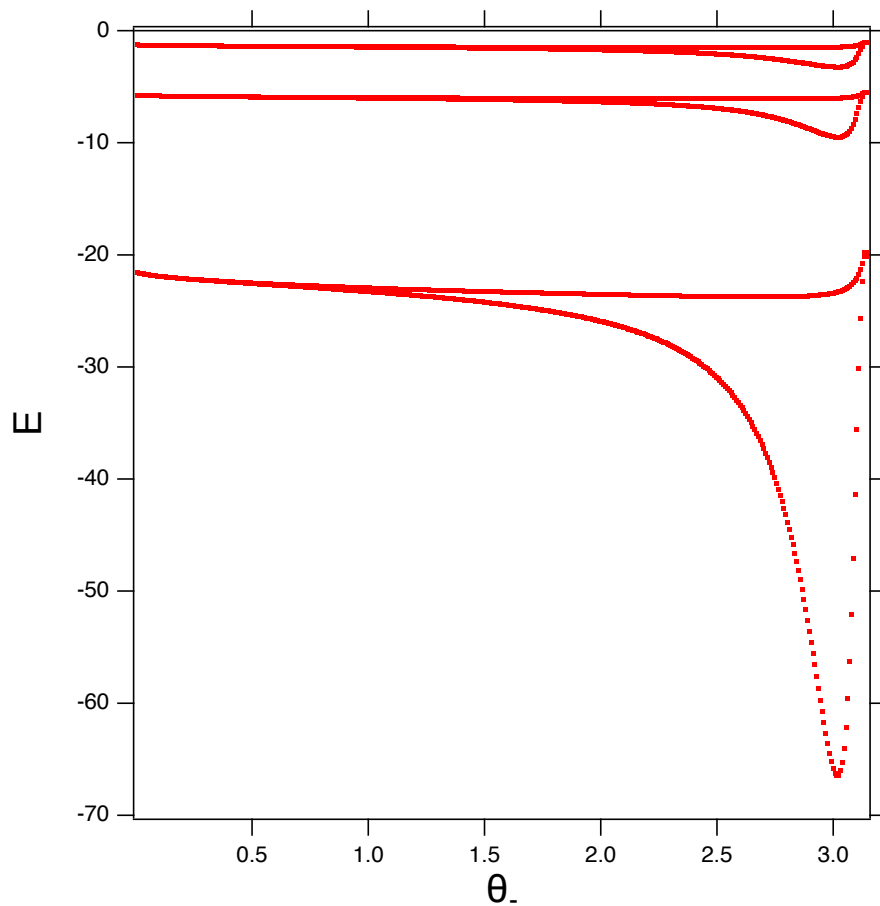


図 45: クーロンポテンシャルの強度が 10 で  
3 山核ポテンシャル変動

得られたスペクトルは (図 45),(図 46),(図 47) となる。1 山ポテンシャルの幅が 0.02 であり、カットオフの幅が 0.06 であり、クーロンポテンシャルが 10,20,30 の場合のカットオフ内部の 3 核山ポテンシャルの強度パラメータである 変動した結果である。全ての場合で を増加させるに連れ準位が分裂し、分裂した低準位が に依存し滑らかに落ちていく様子を確認することができた。



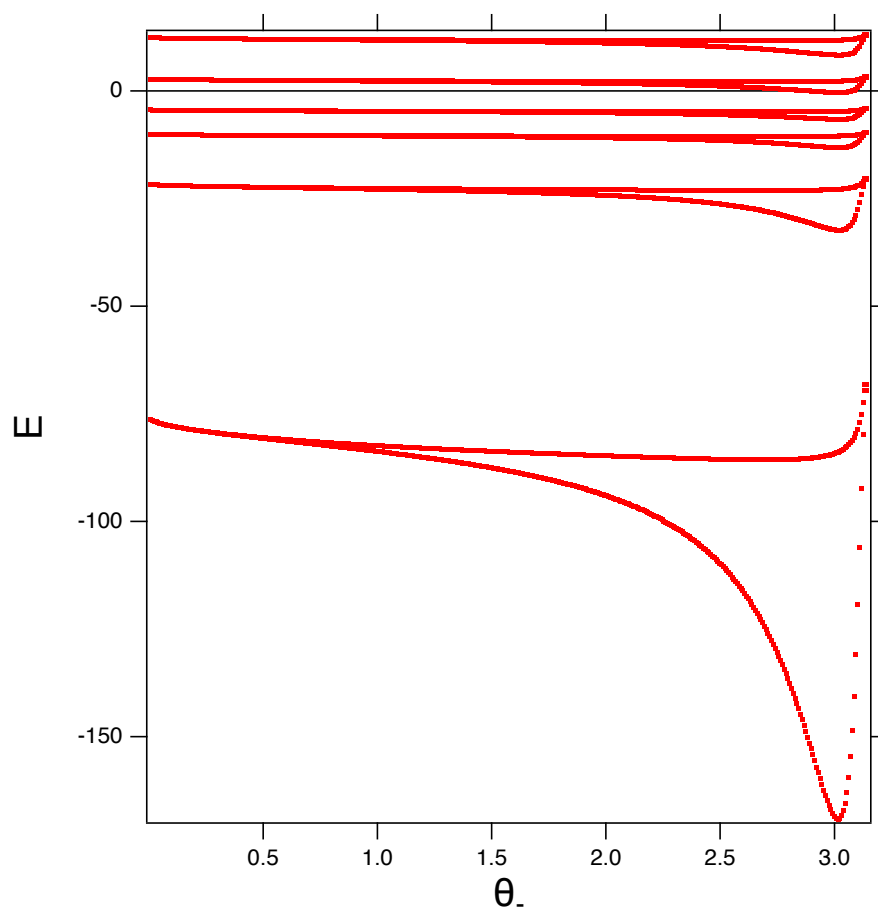


図 46: クーロンポテンシャルの強度が 20 で  
3 山核ポテンシャル変動

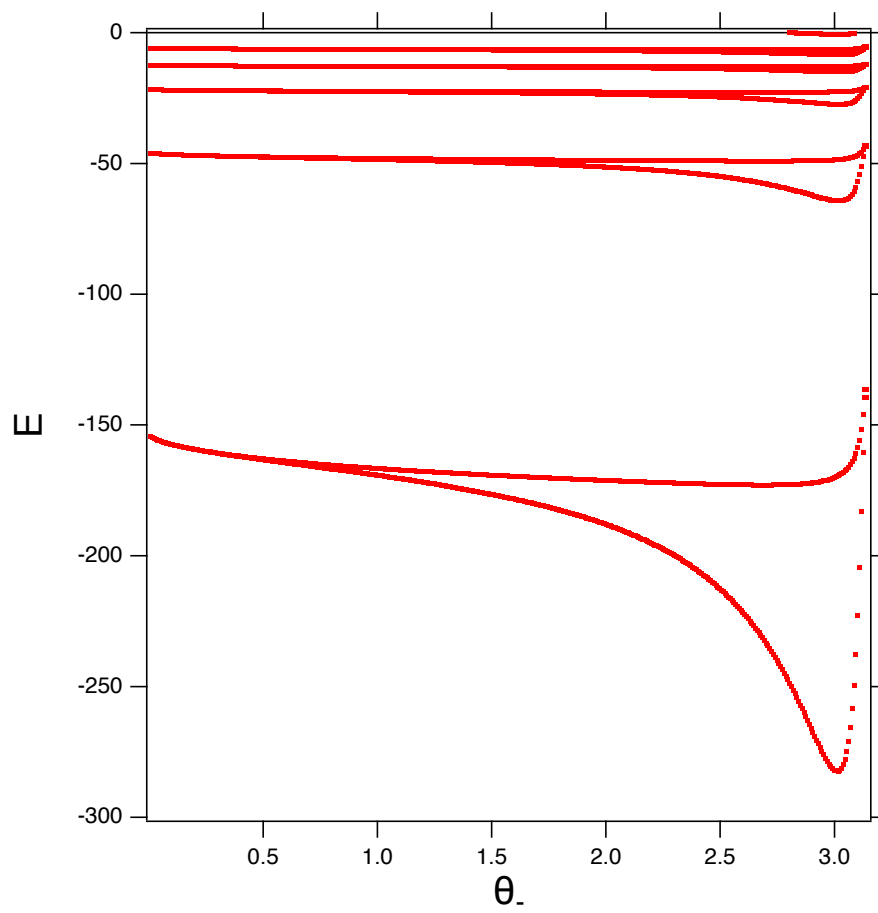


図 47: クーロンポテンシャルの強度が 30 で 3 山核ポテンシャル変動

#### 4.2.6 3山核ポテンシャル – 変動の波動関数

3山核ポテンシャル – 変動のスペクトル (図 45) における波動関数を考察していく。用いるエネルギーポテンシャルは (46) である。これはタイプ A' の場合である。

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{1}{|x|} & (-L < x < -\frac{d}{2}) \\ u1 & (-\frac{d}{2} < x < -\frac{3a}{2}) \\ v & (-\frac{3a}{2} < x < \frac{3a}{2}) \\ u2 & (\frac{3a}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ -\frac{1}{|x|} & (\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (46)$$

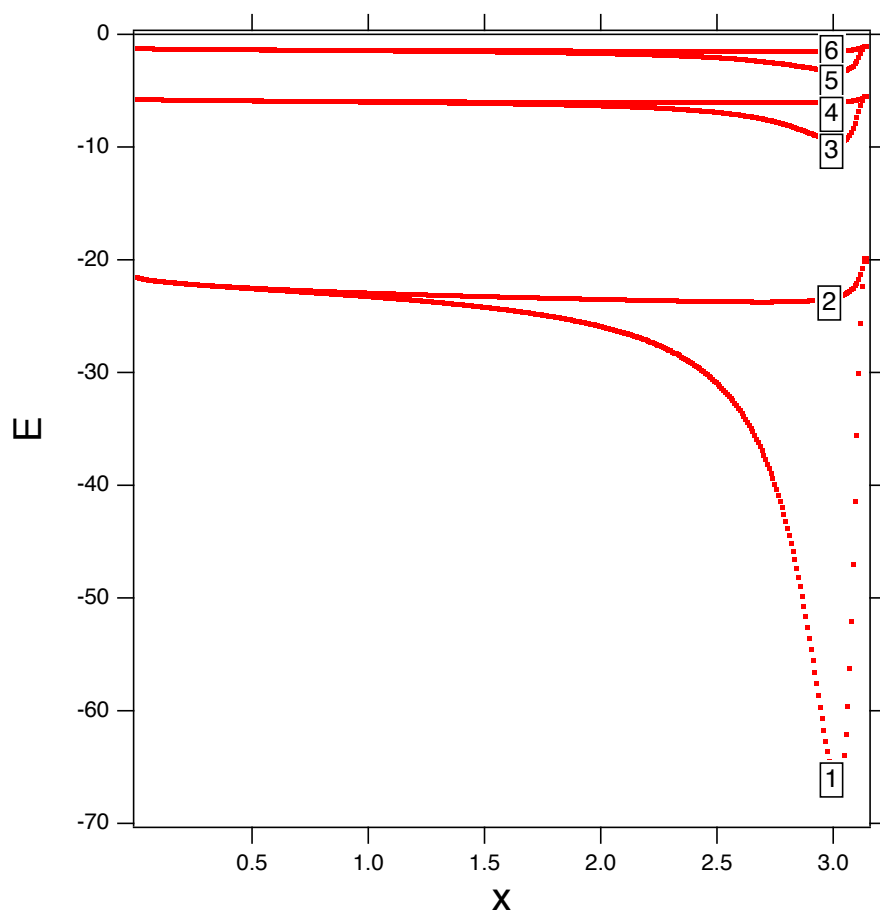


図 48: クーロンポテンシャルが 10 で 3 山核ポテンシャル変動のスペクトル

– が 2.983 における波動関数を低準位から順に表したものを (図 49),(図 50),(図 51),(図 52),(図 53),(図 54) と示す。(図 48) の準位に記されている番号には、等しい番号が記されている波動関数が対応している。

偶関数を中心に核ポテンシャルによる影響が確認できる。

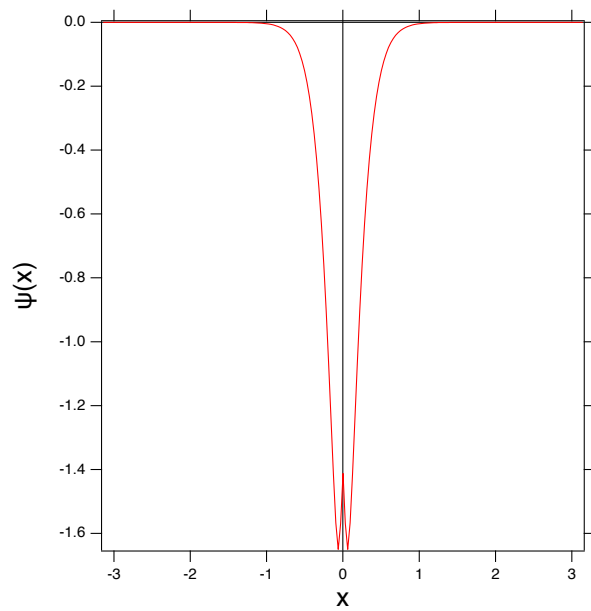


図 49: 1 の波動関数

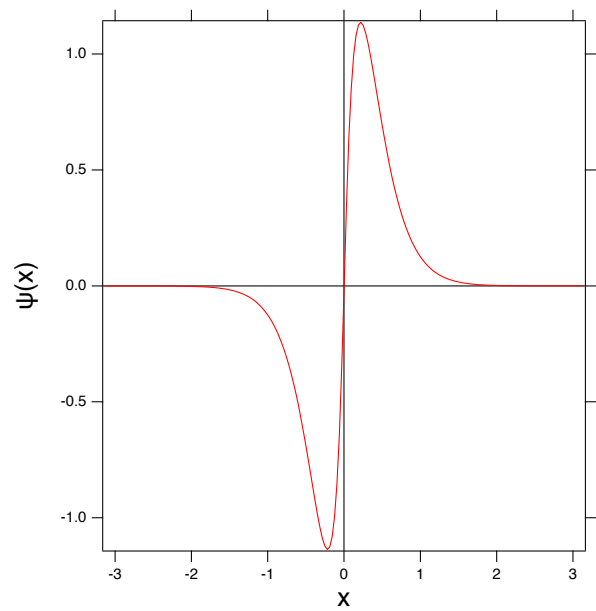


図 50: 2 の波動関数

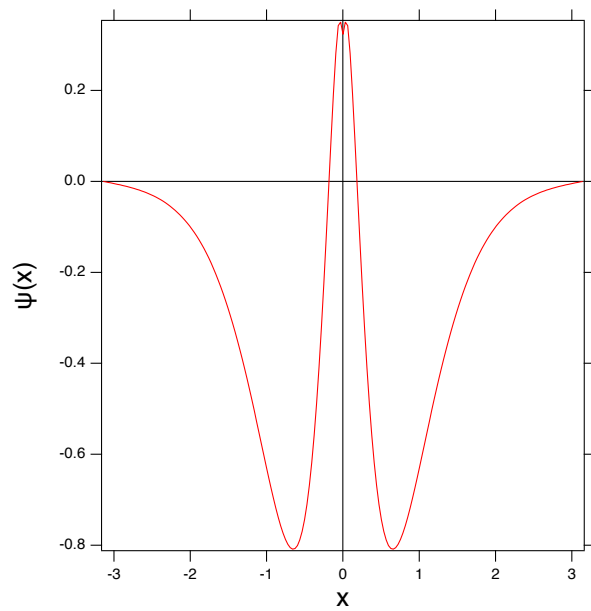


図 51: 3 の波動関数

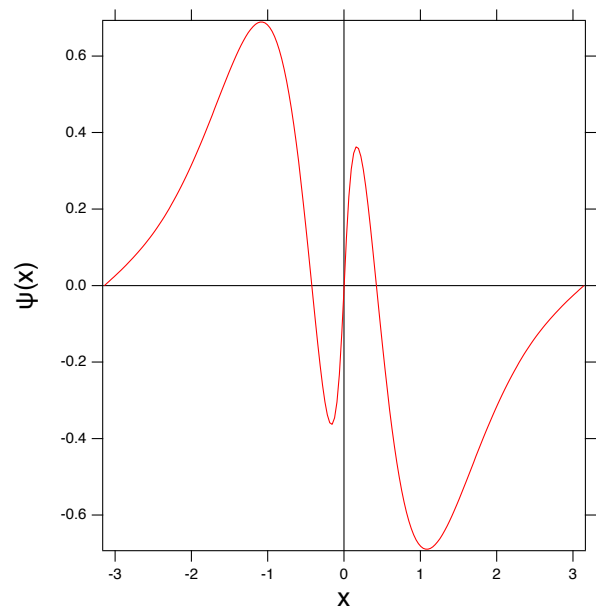


図 52: 4 の波動関数

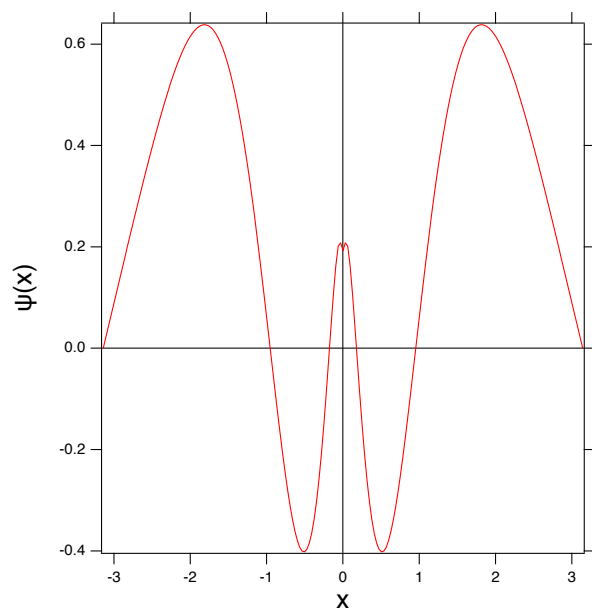


図 53: 5 の波動関数

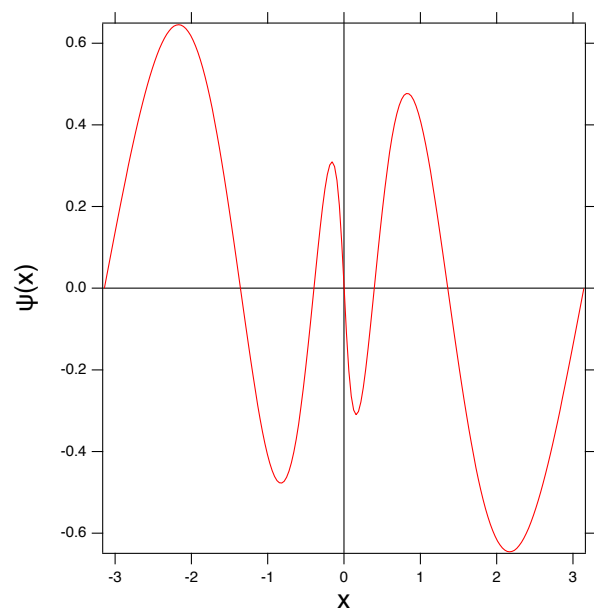


図 54: 6 の波動関数

#### 4.2.7 3山核ポテンシャルのパラメータ 変動

3山核ポテンシャルが存在する系での核ポテンシャルのパラメータである  $\omega$  の変動の場合を考察していく。3山核ポテンシャルが存在する場合のエネルギーポテンシャルを (47) とする。これはタイプ A' の場合である。

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{1}{|x|} (-L < x < -\frac{d}{2}) \\ u1(-\frac{d}{2} < x < -\frac{3a}{2}) \\ v(-\frac{3a}{2} < x < \frac{3a}{2}) \\ u2(\frac{3a}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ -\frac{1}{|x|} (\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (47)$$

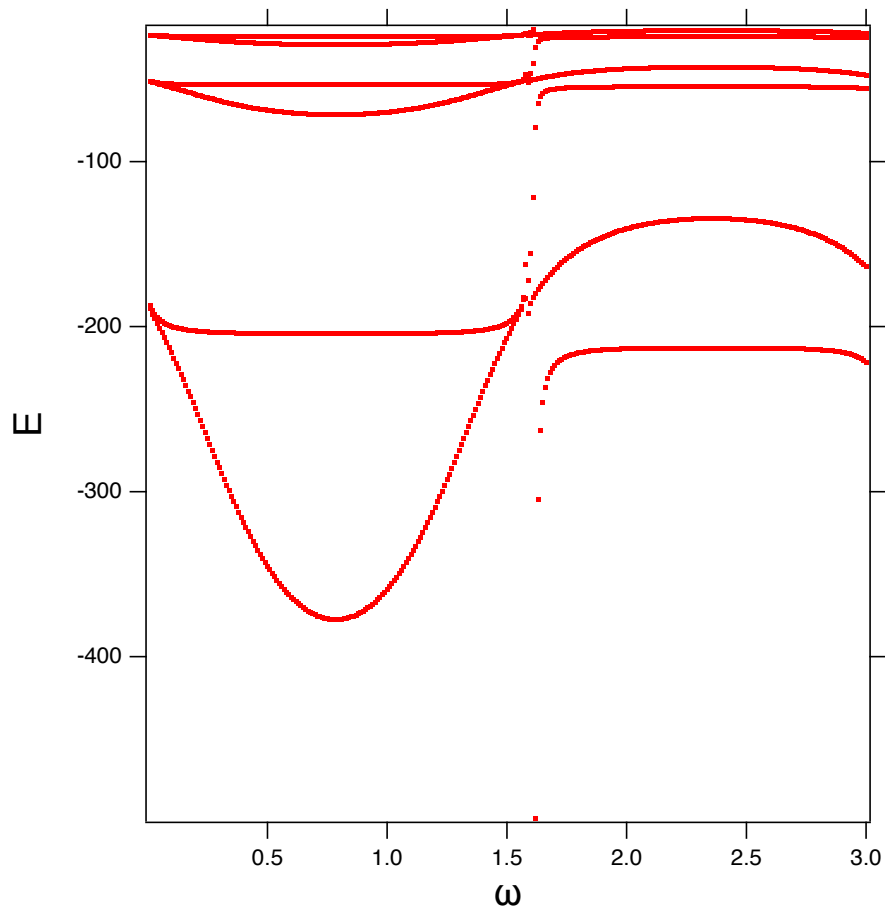


図 55: 3山核ポテンシャルのパラメータ 変動

得られたスペクトルは (図 55),(図 56),(図 57) となる。1山ポテンシャルの幅が 0.01 であり、カットオフの幅が 0.03 であり、核ポテンシャルのパラメータである  $\omega$  が 2.983, 1.57, 0.157 であり、クーロンポテンシャルが 30 の場合のカットオフ内部に 3山核ポテンシャルのパラメータである  $\omega$  を変動した結果である。 $\omega$  を変動させるに連れ準位が分裂、縮退する様子が確認できた。 $\omega$  が  $L/2$  周辺で発散をする様子を確認することができた。また、 $L/2$  の左右で準位の変動の仕方が異なることも確認することができた。 $\omega$  が小さいほど準位の縮退が見られた。

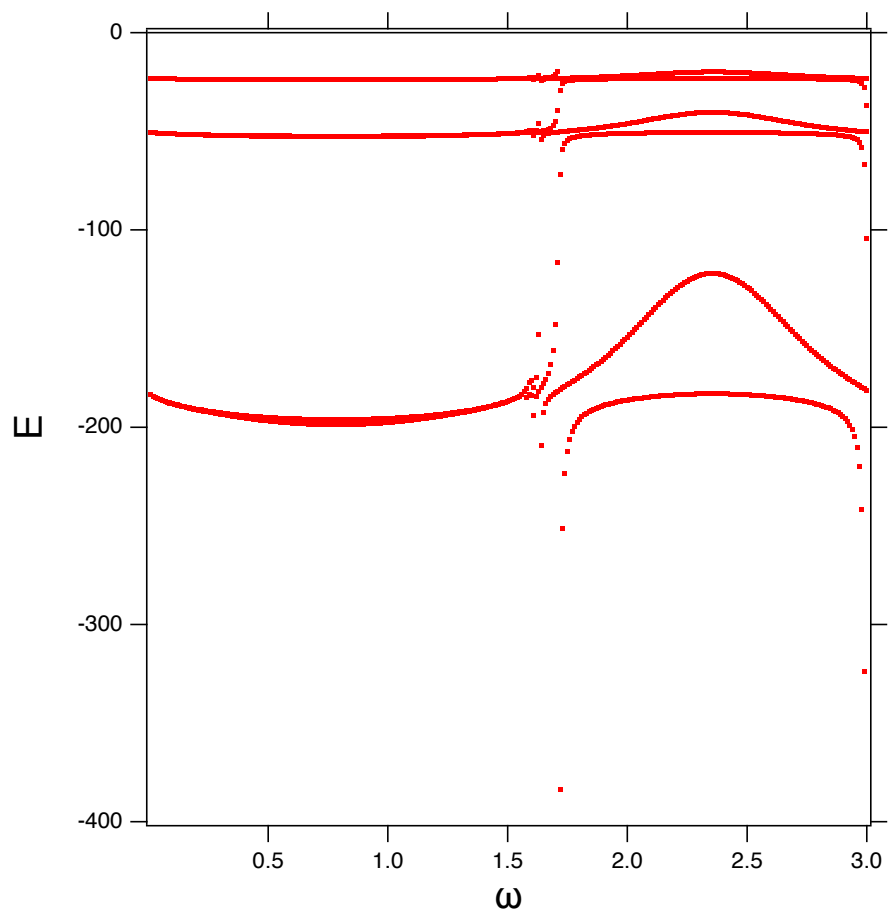


図 56: 3 山核ポテンシャルのパラメータ 変動

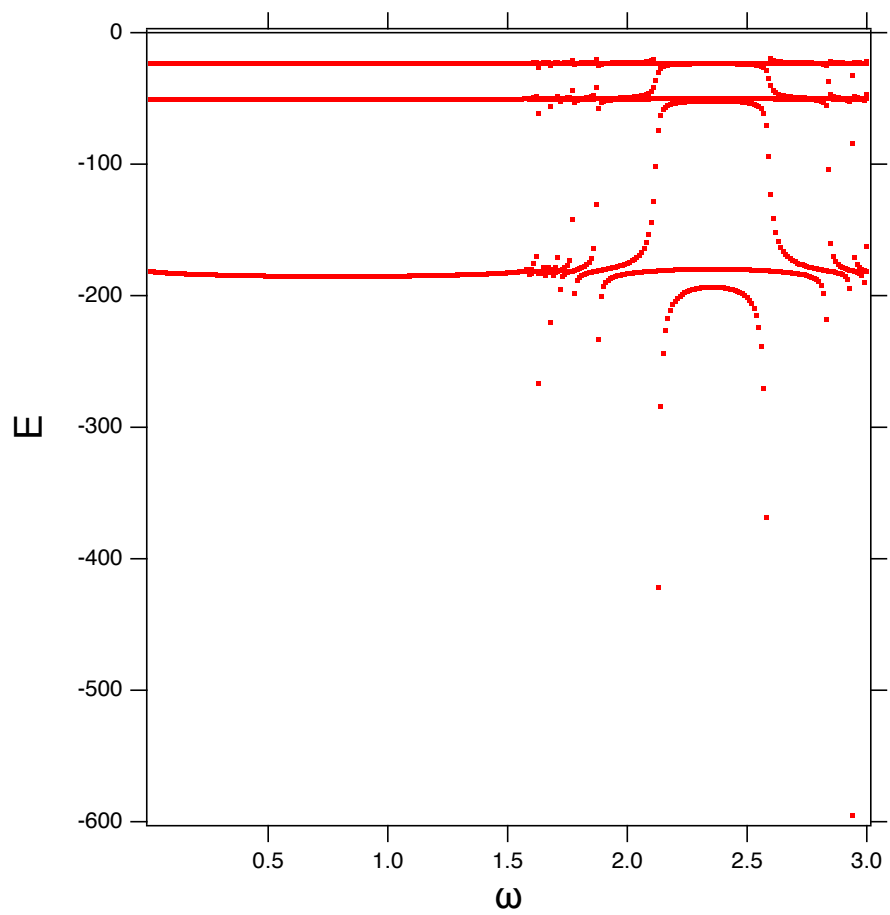


図 57: 3 山核ポテンシャルのパラメータ 変動動



#### 4.2.8 3山核ポテンシャル 変動の波動関数

3山核ポテンシャル 変動のスペクトル (図 55),(図 58) における波動関数を考察していく。用いるエネルギーポテンシャルは (48) である。これはタイプ A' の場合である。

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{1}{|x|} (-L < x < -\frac{d}{2}) \\ u1 (-\frac{d}{2} < x < -\frac{3a}{2}) \\ v (-\frac{3a}{2} < x < \frac{3a}{2}) \\ u2 (\frac{3a}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ -\frac{1}{|x|} (\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (48)$$

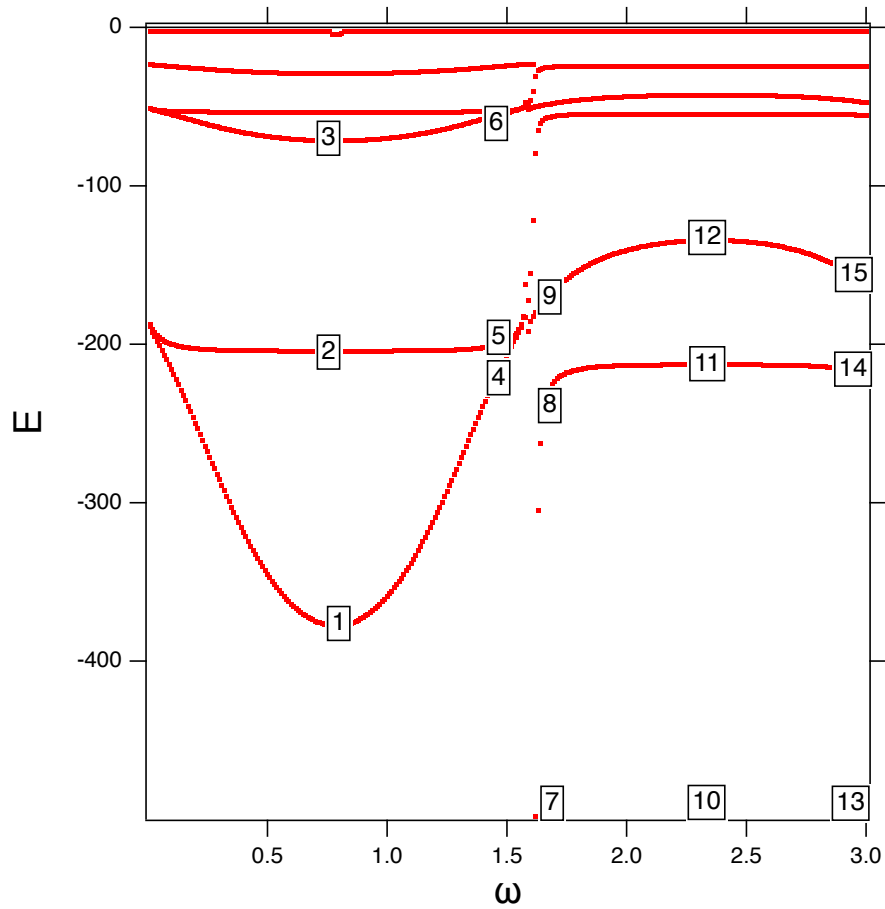


図 58: 3山核ポテンシャルのパラメータ 変動スペクトル

(図 58) の準位に記されている番号には、等しい番号が記されている波動関数が対応している。 が 0.785 における波動関数を低準位から順に表したものを (図 59),(図 60),(図 61) と示す。

が 1.495 における波動関数を低準位から順に表したものを (図 62),(図 63),(図 64) と示す。

が 1.652 における波動関数を低準位から順に表したものを (図 65),(図 66),(図 67) と示す。

が 2.355 における波動関数を低準位から順に表したものを (図 68),(図 69),(図 70) と示す。

が 2.855 における波動関数を低準位から順に表したものを (図 71),(図 72),(図 73) と示す。

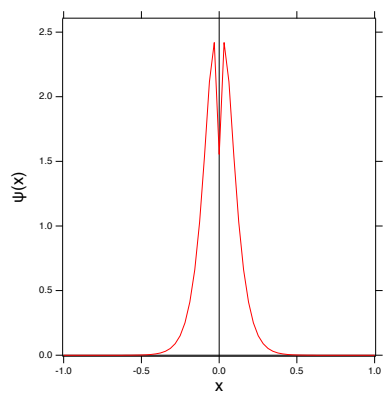


图 59: 1

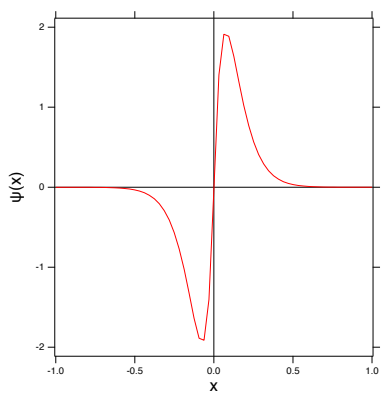


图 60: 2

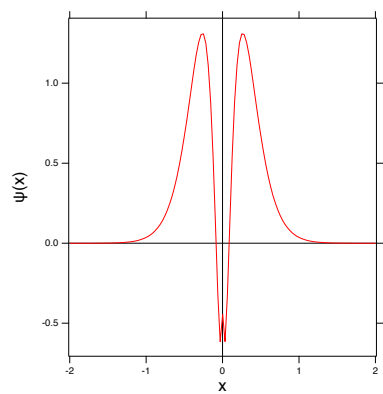


图 61: 3

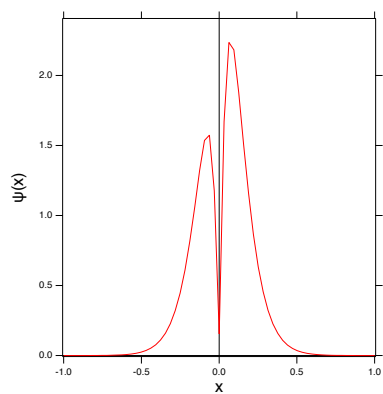


图 62: 4

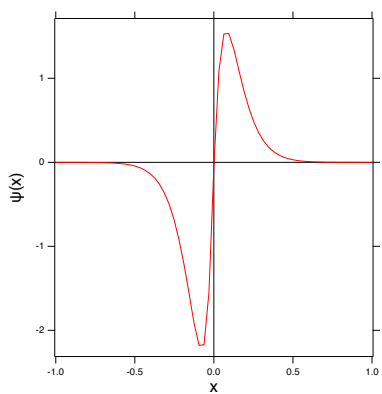


图 63: 5

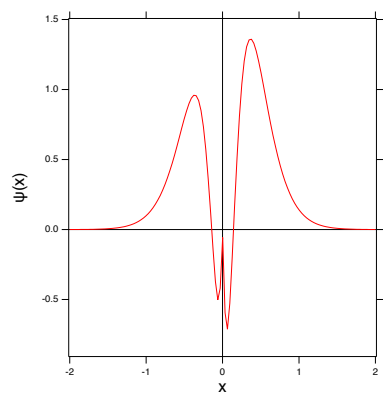


图 64: 6

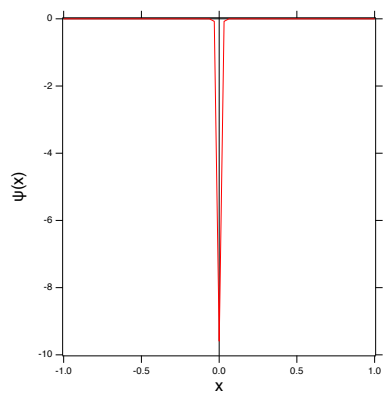


图 65: 7

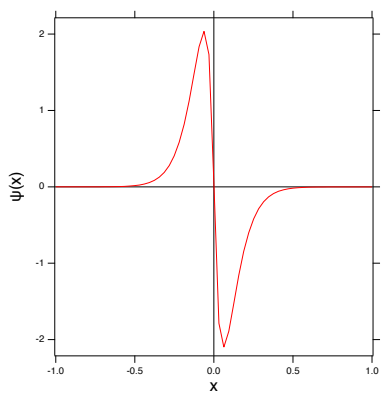


图 66: 8

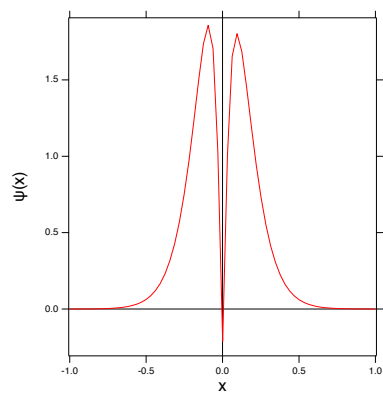


图 67: 9

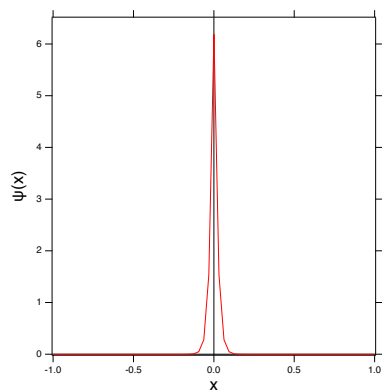


図 68: 7

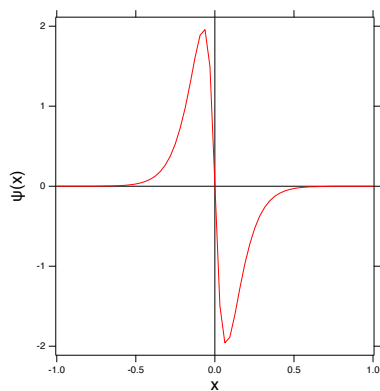


図 69: 8

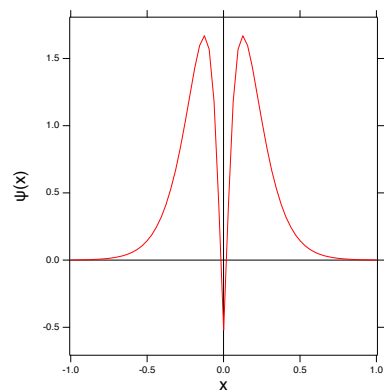


図 70: 9

$1/2$  付近では波動関数の原点を中心とした左右に偏りがあることを確認することができる。また、波

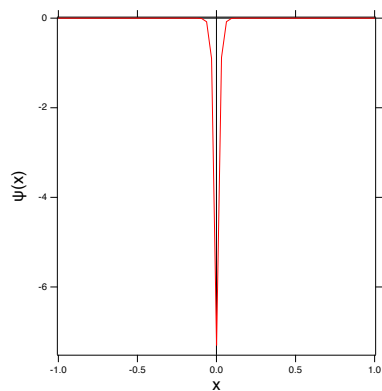


図 71: 7

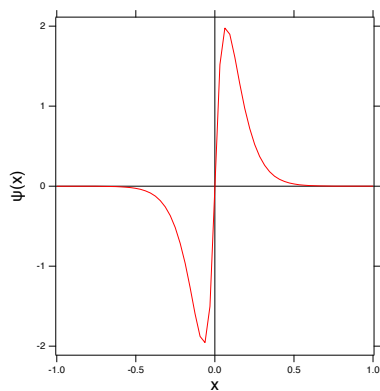


図 72: 8

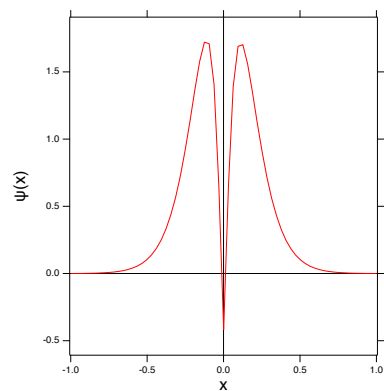


図 73: 9

動関数が核ポテンシャルに束縛されている様子を確認することができる。低準位ほど核ポテンシャルの影響を受けていることが確認できる。

#### 4.2.9 1 山 Cos 型核ポテンシャル $\gamma$ 変動

1 山 Cos 型核ポテンシャルが存在する系での Cos 型核ポテンシャルのパラメータである  $\gamma$  変動の場合を考察していく。1 山 Cos 型核ポテンシャルが存在する場合のエネルギーポテンシャルを (49) とする。これはタイプ B''' の場合である。

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{1}{|x|}(-L < x < -\frac{d}{2}) \\ \gamma f_a(x)(-\frac{d}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ -\frac{1}{|x|}(\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (49)$$

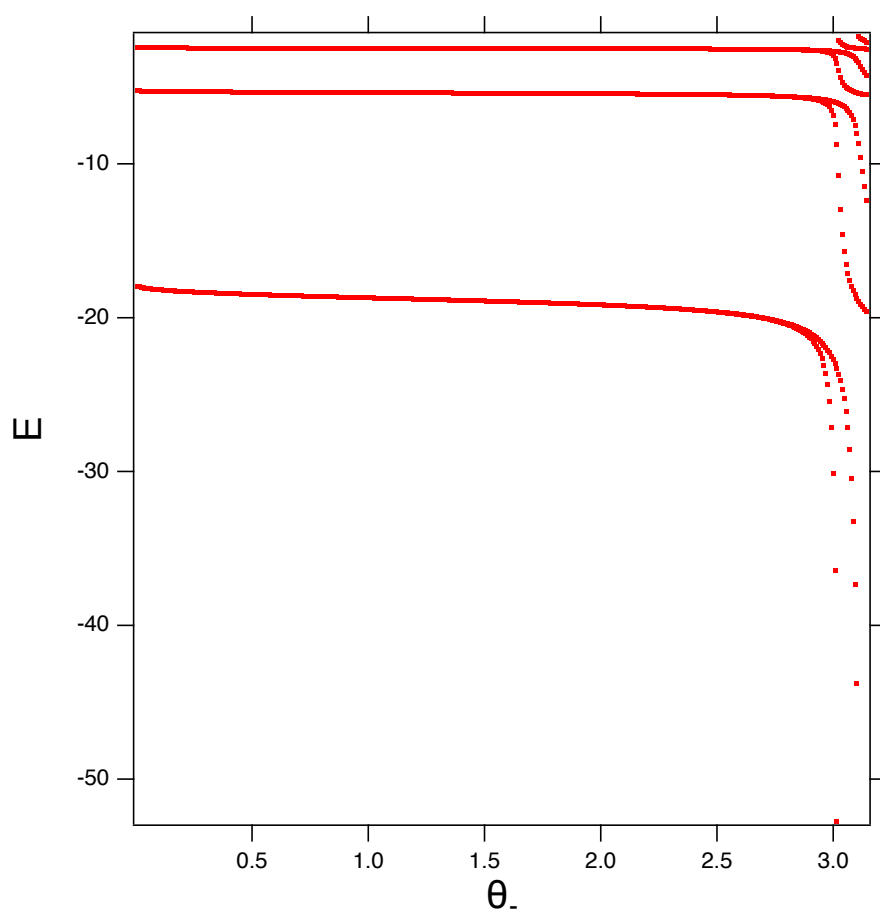


図 74: クーロンポテンシャルの強度が 10 で 1 山 Cos 型核ポテンシャル変動

得られたスペクトルは (図 74) となる。1 山核ポテンシャルの幅が 0.02 であり、カットオフの幅が 0.06 であり、クーロンポテンシャルが 10 の場合のカットオフ内部に Cos 関数型から作った 1 山ポテンシャルの強度パラメータである  $\gamma$  を変動した結果である。  $\gamma$  を増加させるに連れ準位が分裂し、分裂した低準位が  $\gamma$  に依存し落ちていく様子が確認できた。

#### 4.2.10 3山 Cos 型核ポテンシャル 変動

3山 Cos 型核ポテンシャルが存在する系での核ポテンシャルのパラメータである  $\alpha$  変動の場合を考察していく。3山 Cos 型核ポテンシャルが存在する場合のエネルギーポテンシャルを (50) とする。これはタイプ B'' の場合である。

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{1}{|x|}(-L < x < -\frac{d}{2}) \\ u1 f_a(x+a)(-\frac{d}{2} < x < -\frac{3a}{2}) \\ v f_a(x)(-\frac{3a}{2} < x < \frac{3a}{2}) \\ u2 f_a(x-a)(\frac{3a}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ -\frac{1}{|x|}(\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (50)$$

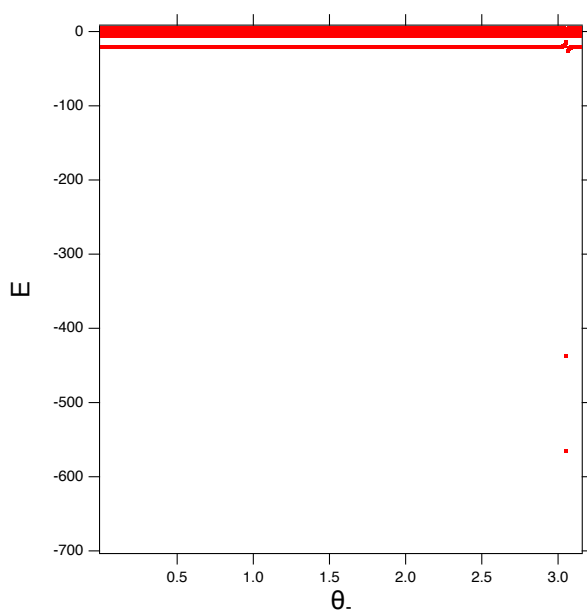


図 75: クーロンポテンシャルの強度が 10  
3 山 Cos 型核ポテンシャル変動全体図

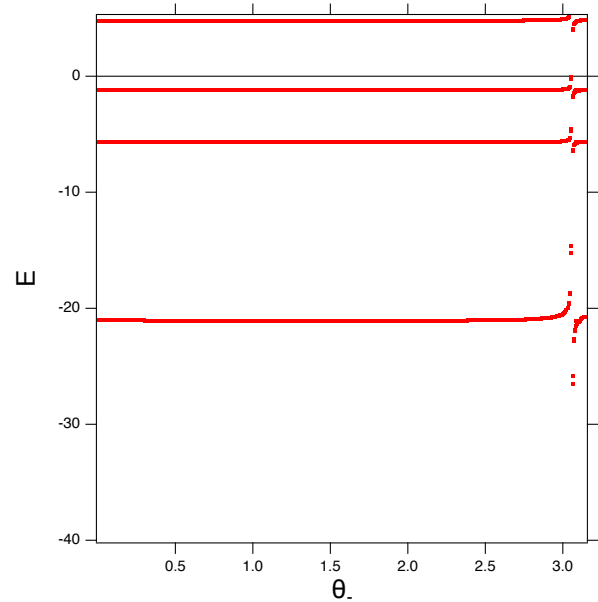


図 76: クーロンポテンシャルの強度が 10  
3 山 Cos 型核ポテンシャル変動

得られたスペクトルは (図 75),(図 77),(図 79) となる。また、得られたスペクトルの拡大図は (図 76),(図 78),(図 80) となる。1 山核ポテンシャルの幅が 0.02 であり、カットオフの幅が 0.06 であり、クーロンポテンシャルが 10,20,30 の場合のカットオフ内部に Cos 関数型から作った 1 山ポテンシャルの強度パラメータである  $\alpha$  を変動した結果である。 $\alpha$  が 3 付近で準位が急激に解ける様子が確認できる。また、低準位が核ポテンシャルの影響を受け  $\alpha$  が小さい場合非常に低いエネルギーを取ってしまうことが確認できた。

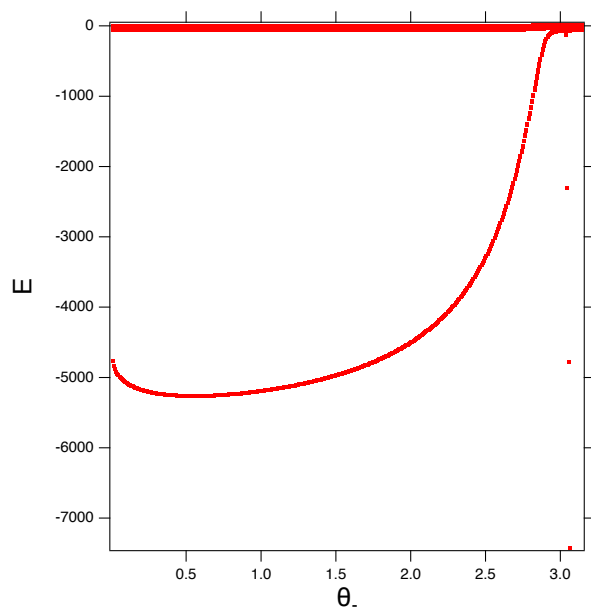


図 77: クーロンポテンシャルの強度が 20  
3 山 Cos 型核ポテンシャル変動全体図

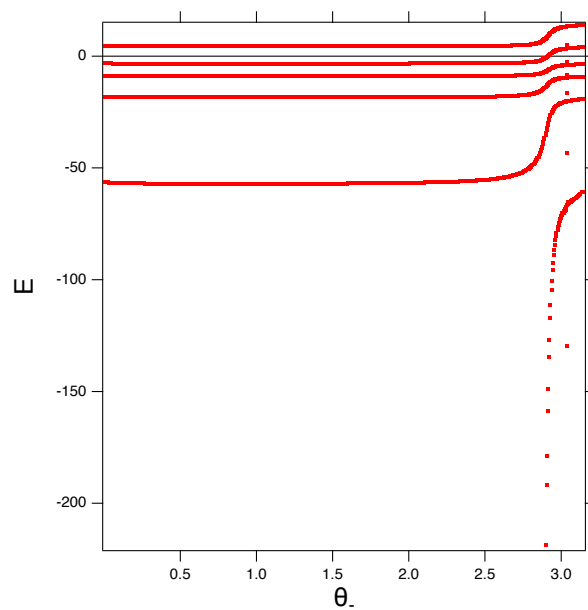


図 78: クーロンポテンシャルの強度が 20  
3 山 Cos 型核ポテンシャル変動

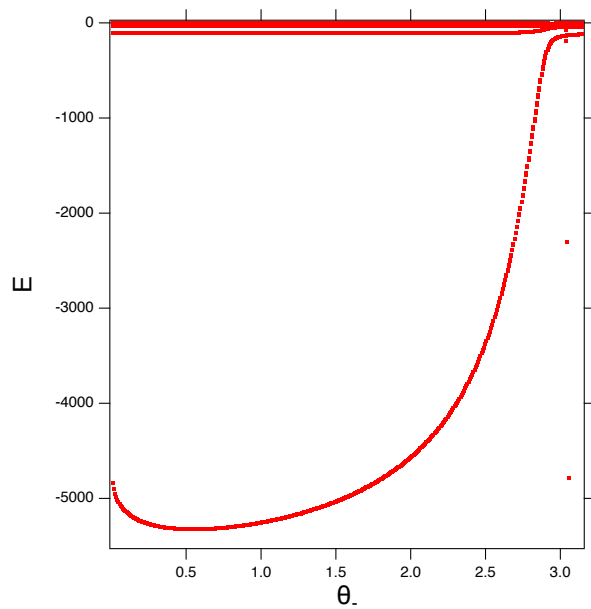


図 79: クーロンポテンシャルの強度が 30  
3 山 Cos 型核ポテンシャル変動全体図

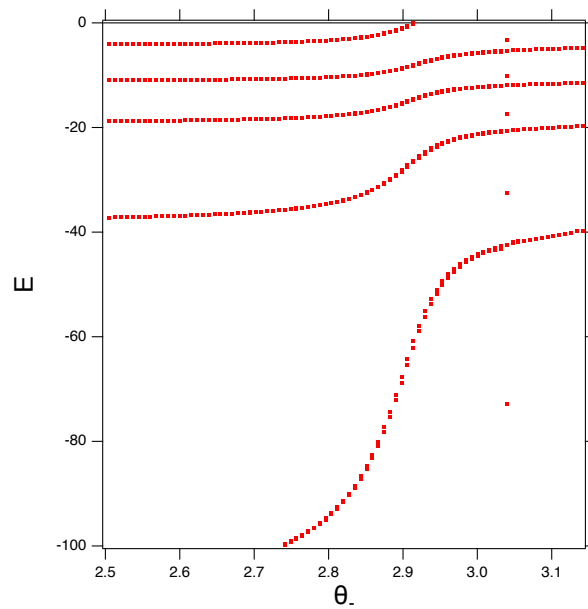


図 80: クーロンポテンシャルの強度が 30  
3 山 Cos 型核ポテンシャル変動

#### 4.2.11 3 山 Cos 型核ポテンシャル – 変動の波動関数

3 山核ポテンシャル – 変動のスペクトル (図 76),(図 81) における波動関数を考察していく。用いるエネルギーポテンシャルは (51) である。これはタイプ B” の場合である。

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{1}{|x|}(-L < x < -\frac{d}{2}) \\ u1f_a(x+a)(-\frac{d}{2} < x < -\frac{3a}{2}) \\ v f_a(x)(-\frac{3a}{2} < x < \frac{3a}{2}) \\ u2f_a(x-a)(\frac{3a}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ -\frac{1}{|x|}(\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (51)$$

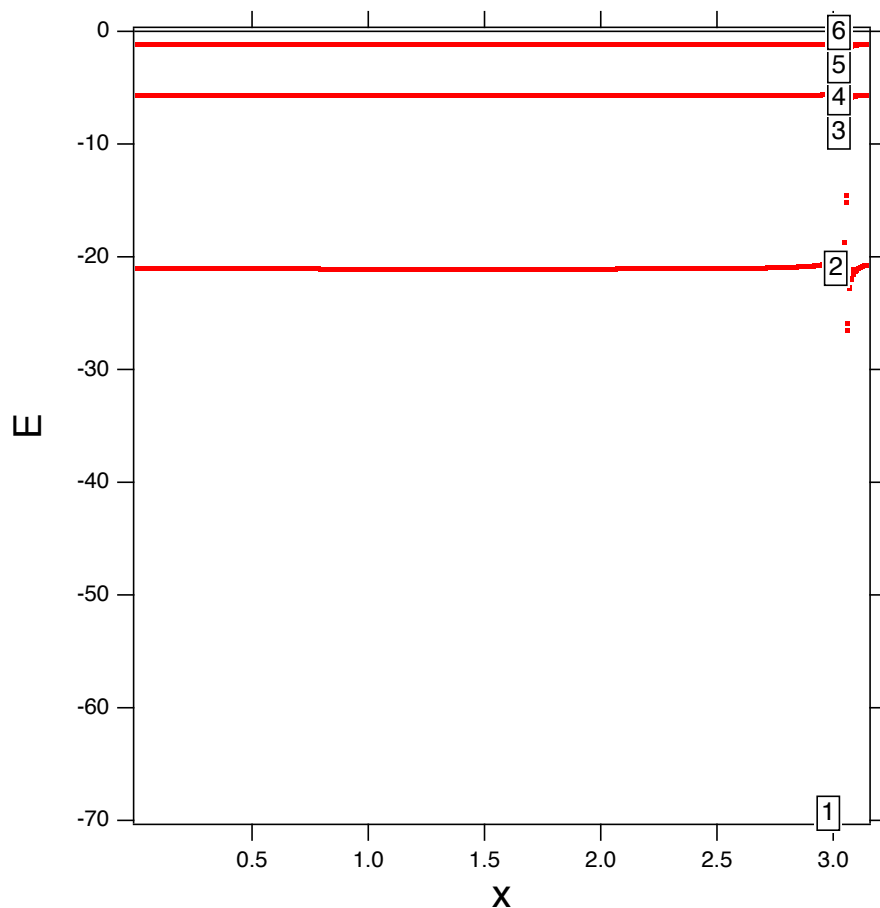


図 81: クーロンポテンシャルの強度が 10 で 3 山 Cos 型核ポテンシャル変動

– が 2.983 における波動関数を低準位から順に表したものを (図 82),(図 83),(図 84),(図 85),(図 86),(図 87) と示す。(図 81) の準位に記されている番号には、等しい番号が記されている波動関数が対応している。

全ての準位において核ポテンシャルの影響が見られた。

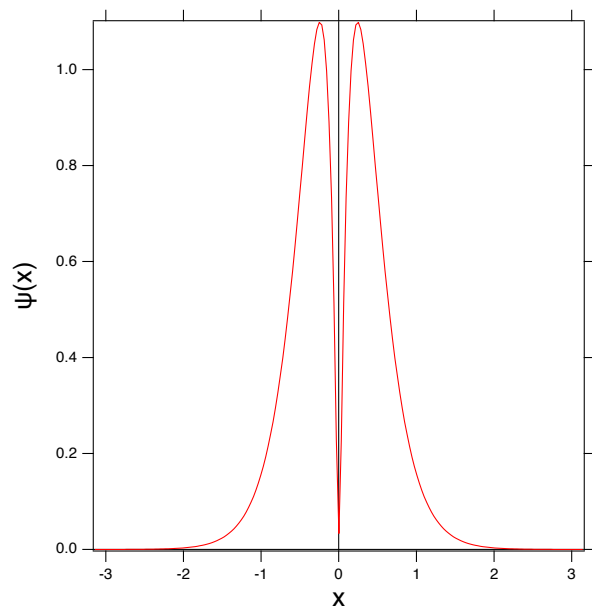


図 82: 1 の波動関数

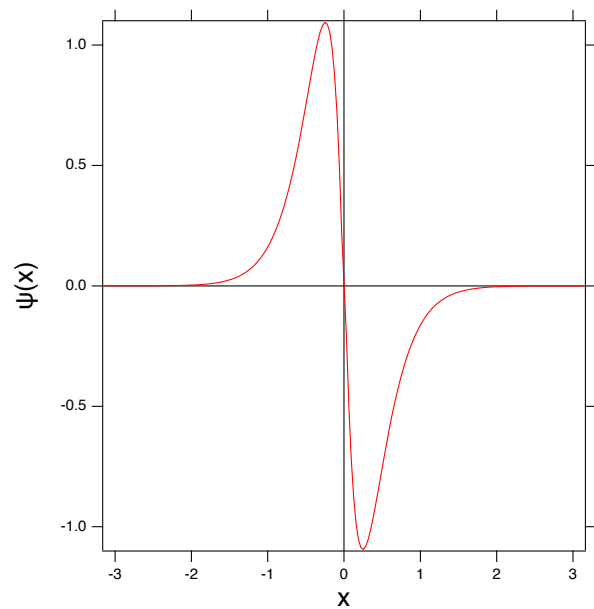


図 83: 2 の波動関数

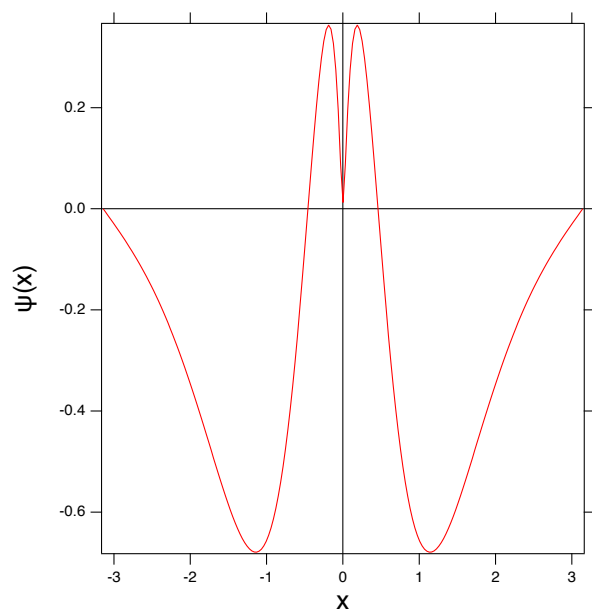


図 84: 3 の波動関数

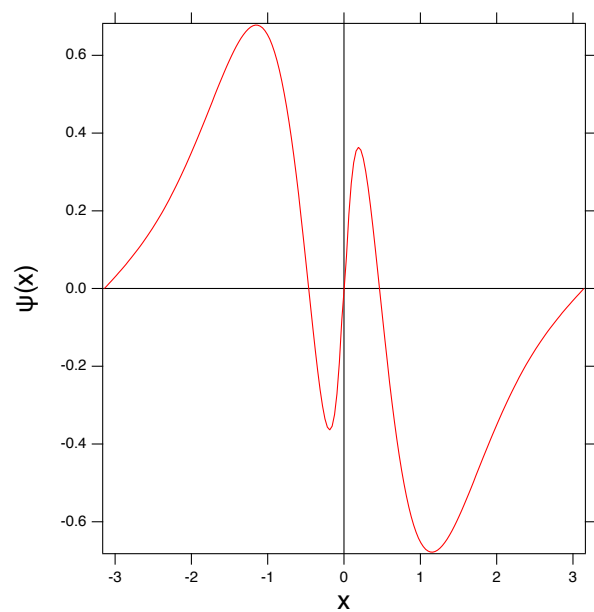


図 85: 4 の波動関数



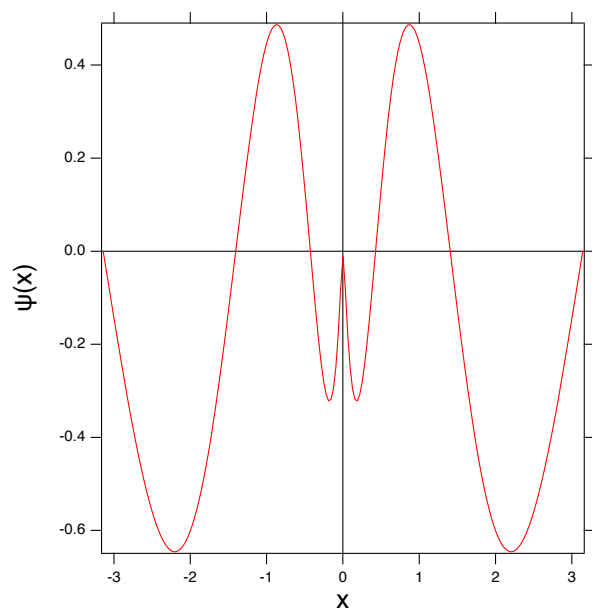


図 86: 5 の波動関数

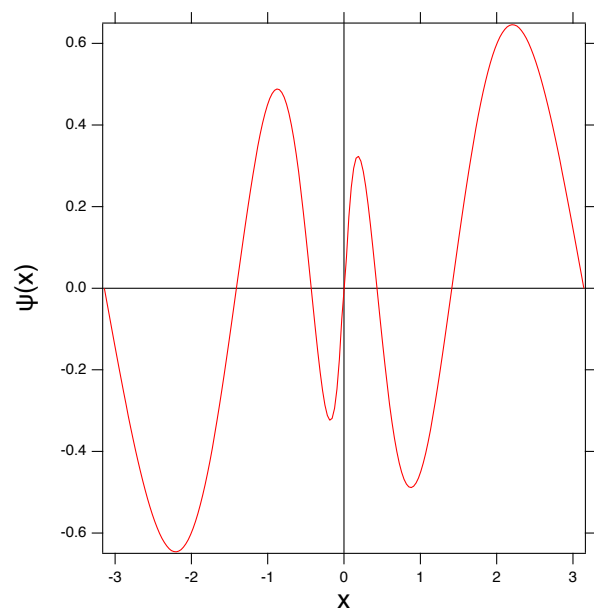


図 87: 6 の波動関数

#### 4.2.12 3山 Cos 型核ポテンシャルカットオフ変動

3山 Cos 型核ポテンシャルが存在する系でのカットオフ幅である  $d$  変動の場合を考察していく。3山 Cos 型核ポテンシャルが存在する場合のエネルギーポテンシャルを (52) とする。これはタイプ B' の場合である。

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{1}{|x|} (-L < x < -\frac{d}{2}) \\ u1 f_a(x+a) (-\frac{d}{2} < x < -\frac{3a}{2}) \\ v f_a(x) (-\frac{3a}{2} < x < \frac{3a}{2}) \\ u2 f_a(x-a) (\frac{3a}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ -\frac{1}{|x|} (\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (52)$$

得られたスペクトルは (図 88) となる。  $\alpha$  が  $3/4$  であり、クーロンポテンシャルが 20 である。  $d$  を

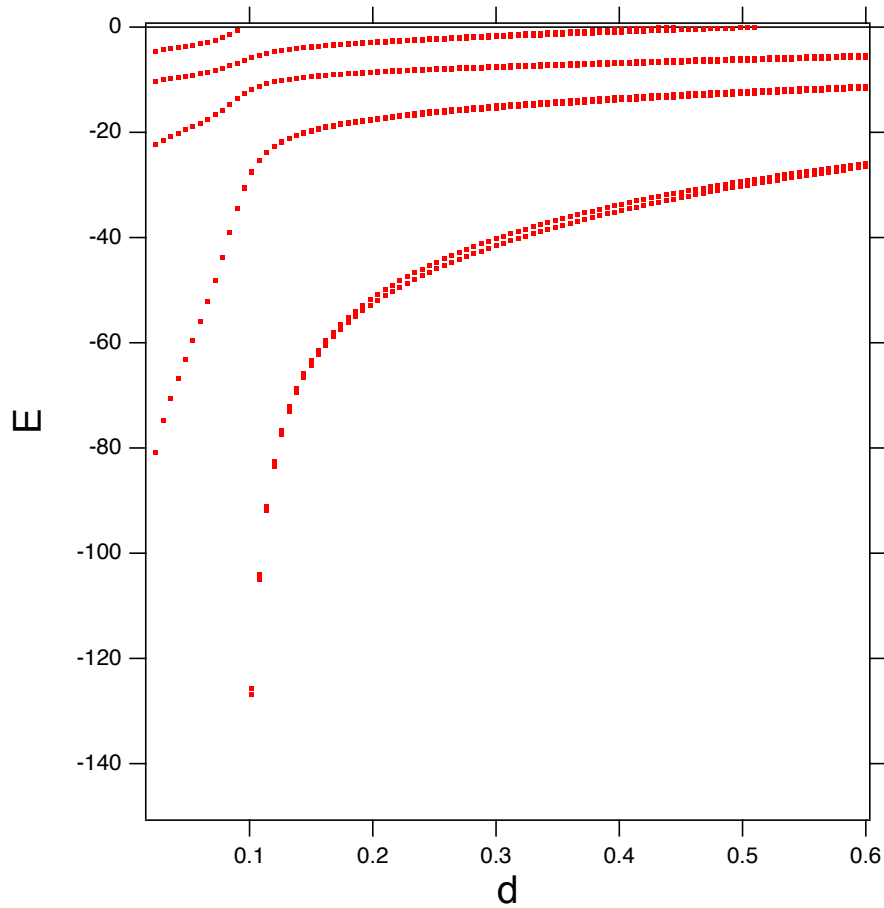


図 88: 3山 Cos 型核ポテンシャルカットオフ変動

増加させるに連れ準位が上がる様子が確認できた。基底準位が  $d=0.3$  付近で縮退が解ける様子が確認できた。また、0.1 付近で急激に変化する様子が確認できた。

#### 4.2.13 3山 Cos 型核ポテンシャルのパラメータ 変動

3山 Cos 型核ポテンシャルが存在する系での核ポテンシャルのパラメータである  $\omega$  の変動の場合を考察していく。3山 Cos 型核ポテンシャルが存在する場合のエネルギーポテンシャルを (53) とする。これはタイプ B'' の場合である。

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{1}{|x|} & (-L < x < -\frac{d}{2}) \\ u1 f_a(x+a) & (-\frac{d}{2} < x < -\frac{3a}{2}) \\ v f_a(x) & (-\frac{3a}{2} < x < \frac{3a}{2}) \\ u2 f_a(x-a) & (\frac{3a}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ -\frac{1}{|x|} & (\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (53)$$

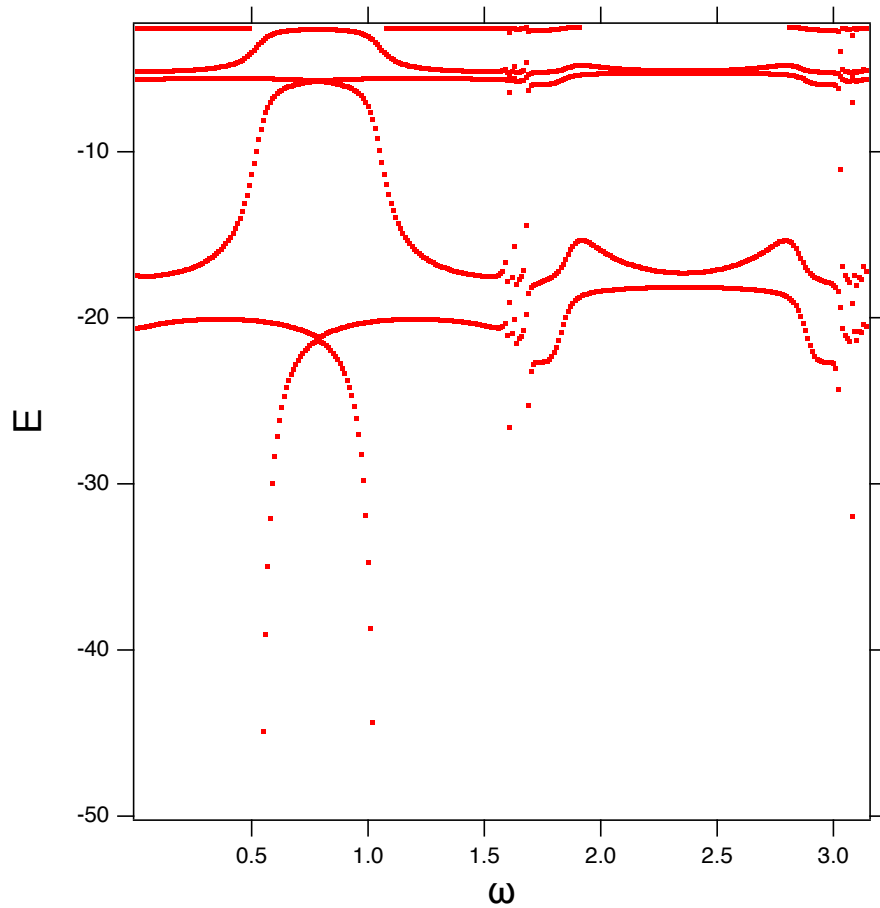


図 89: 3山 Cos 型核ポテンシャルの  $\omega$  変動

得られたスペクトルは (図 89) となる。1山 Cos 型核ポテンシャルの幅が 0.02 であり、カットオフの幅が 0.06 であり、核ポテンシャルのパラメータである  $\omega$  が 2.983 であり、クーロンポテンシャルが 10 の場合のカットオフ内部に 3山核ポテンシャルのパラメータである  $\omega$  を変動した結果である。 $\omega$  を変動させるに連れ準位が分裂、縮退する様子が確認できた。 $\omega$  が  $\pi/2$  周辺で発散をする様子を確認することができた。また、 $\pi/2$  の左右で準位の変動の仕方が異なることも確認することができた。

#### 4.2.14 3山 Cos 型核ポテンシャルのパラメータ 変動の波動関数

3山 Cos 型核ポテンシャル – 変動のスペクトル (図 89),(図 90) における波動関数を考察していく。用いるエネルギーポテンシャルは (54) である。これはタイプ B” の場合である。

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{1}{|x|}(-L < x < -\frac{d}{2}) \\ u1f_a(x+a)(-\frac{d}{2} < x < -\frac{3a}{2}) \\ v f_a(x)(-\frac{3a}{2} < x < \frac{3a}{2}) \\ u2f_a(x-a)(\frac{3a}{2} < x < \frac{d}{2}) \\ -\frac{1}{|x|}(\frac{d}{2} < x < L) \end{cases} \quad (54)$$

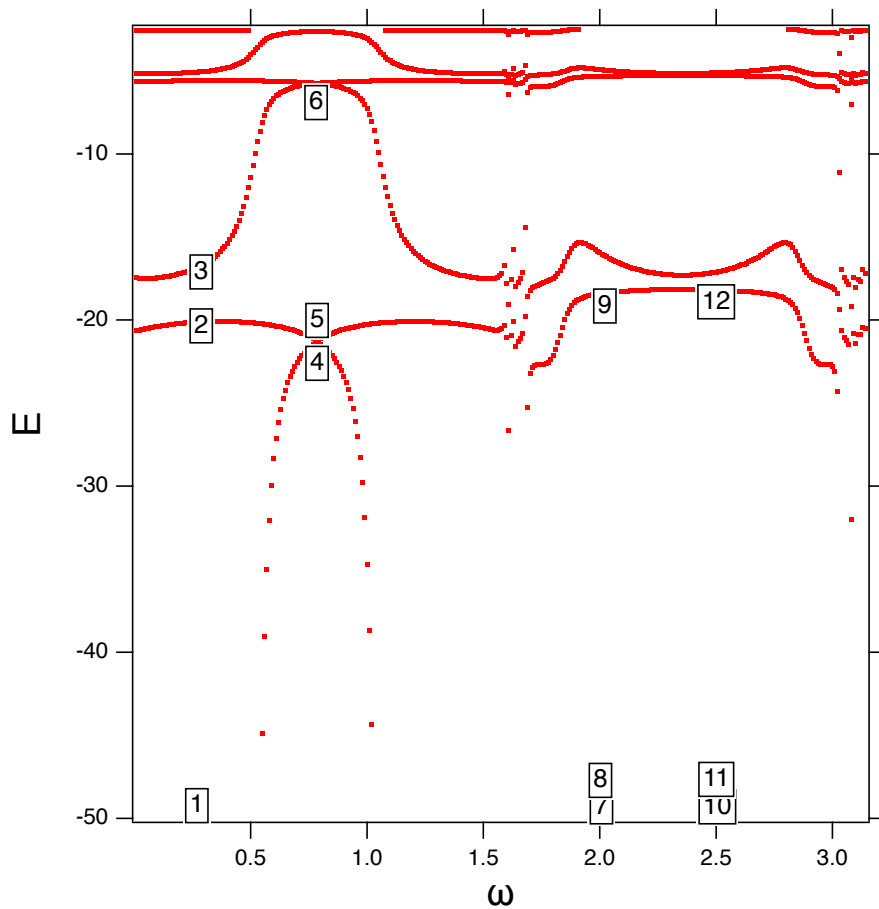


図 90: クーロンポテンシャルの強度が 10 で 3 山 Cos 型核ポテンシャル変動

(図 90) の準位に記されている番号には、等しい番号が記されている波動関数が対応している。  $\omega$  が 0.25 における波動関数を低準位から順に表したものを (図 91),(図 93),(図 95) と示す。また、各波動関数の拡大したものを (図 92),(図 94),(図 96) と示す。

$\omega$  が 0.785 における波動関数を低準位から順に表したものを (図 97),(図 99),(図 101) と示す。また、各波動関数の拡大したものを (図 98),(図 100),(図 102) と示す

$\omega$  が 2 における波動関数を低準位から順に表したものを (図 103),(図 105),(図 107) と示す。また、各

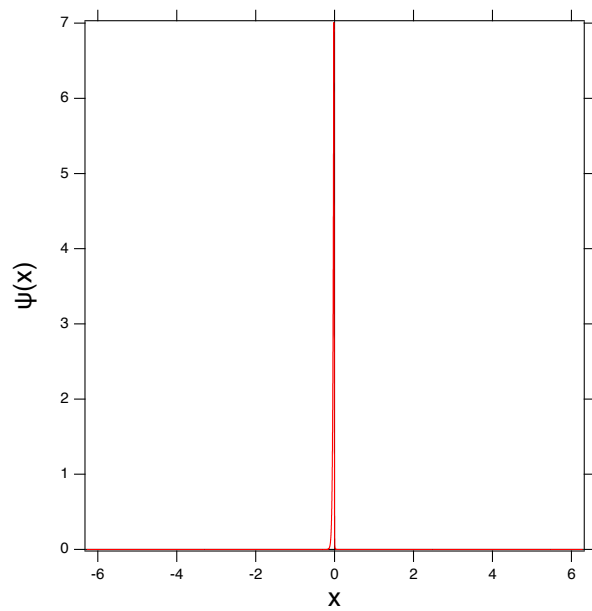


図 91: 1 の波動関数

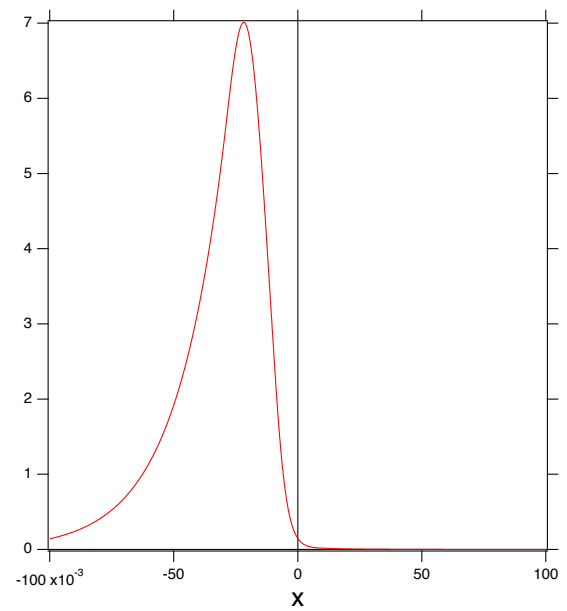


図 92: 1 の波動関数の拡大図

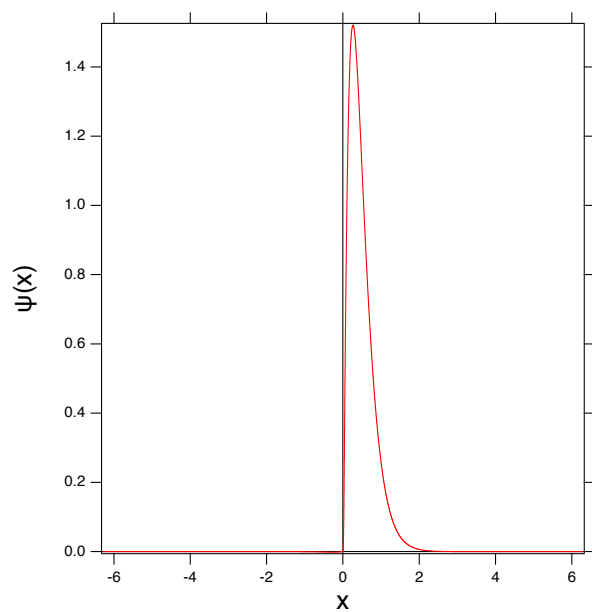


図 93: 2 の波動関数

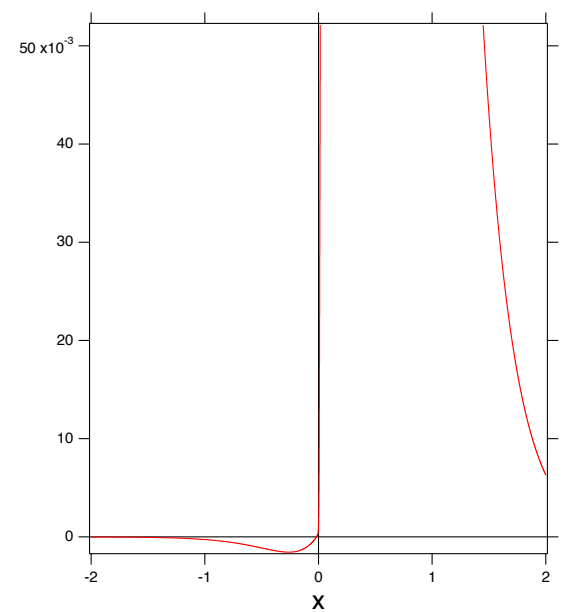


図 94: 2 の波動関数の拡大図

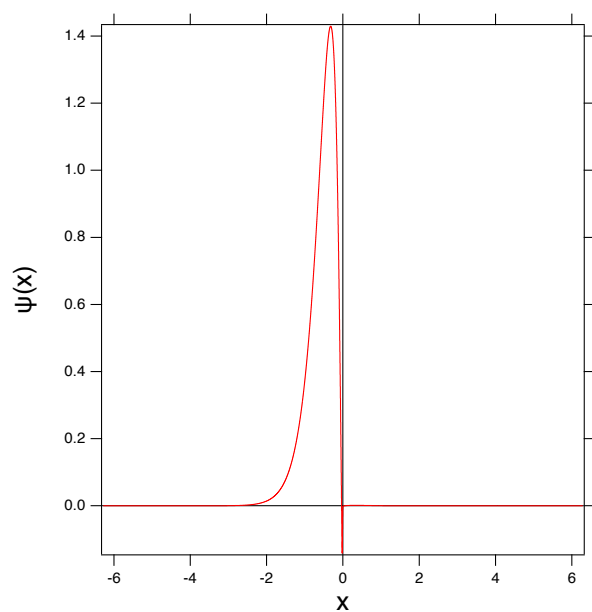


図 95: 3 の波動関数

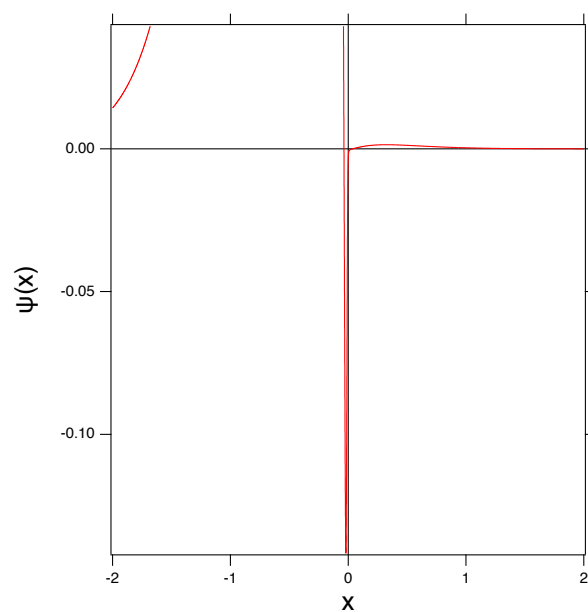


図 96: 3 の波動関数の拡大図

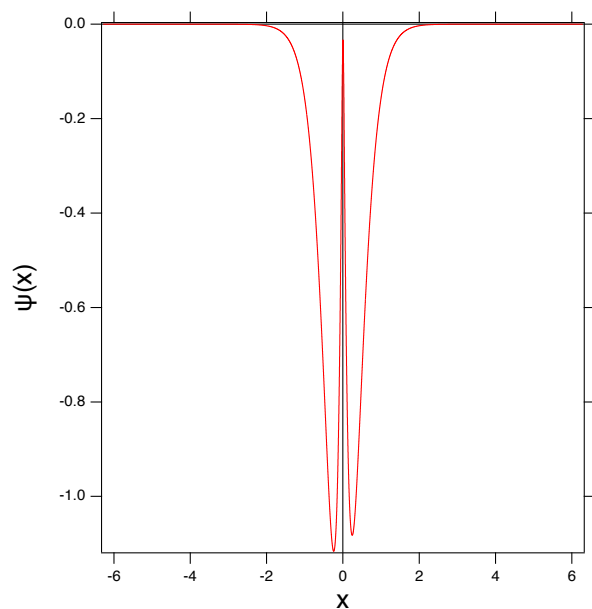


図 97: 4 の波動関数

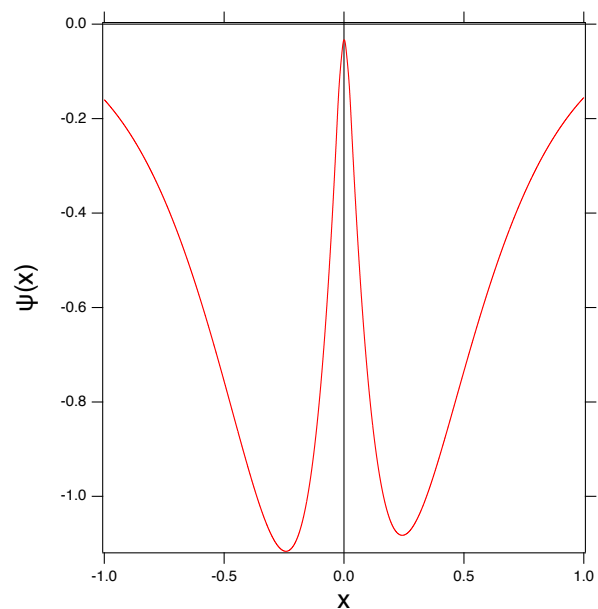


図 98: 4 の波動関数の拡大図

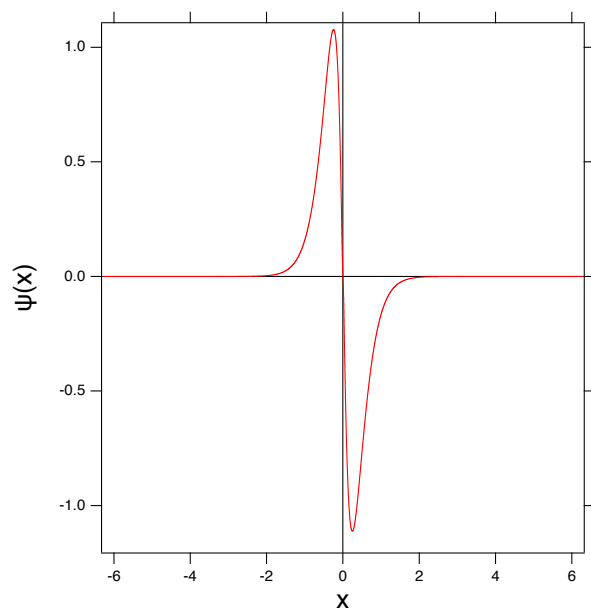


図 99: 5 の波動関数

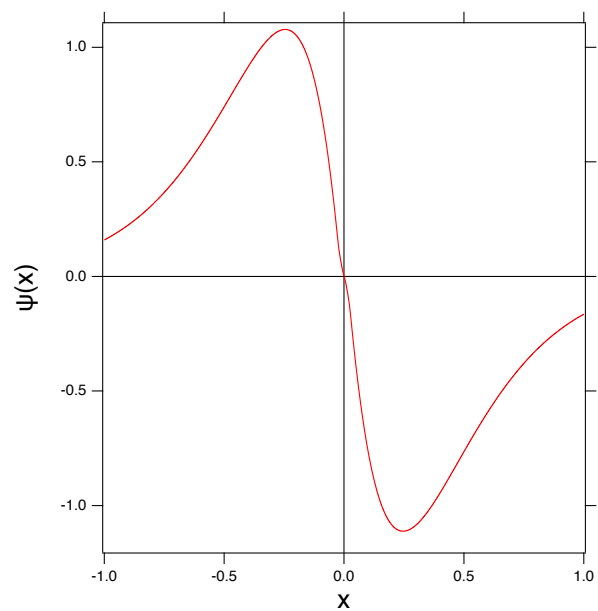


図 100: 5 の波動関数の拡大図

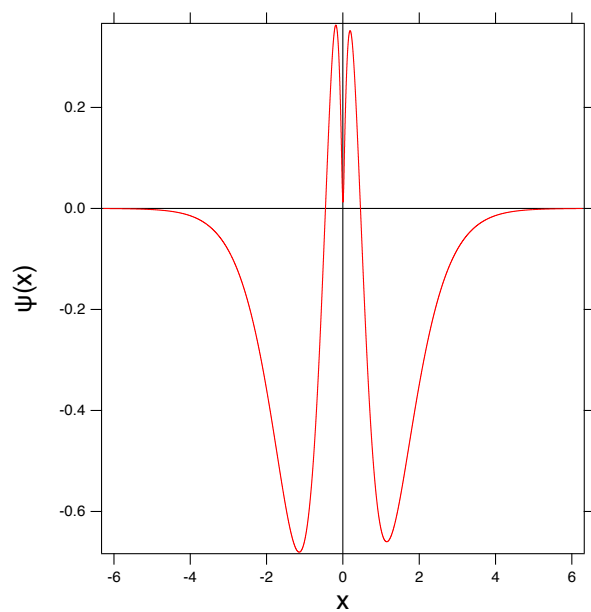


図 101: 6 の波動関数

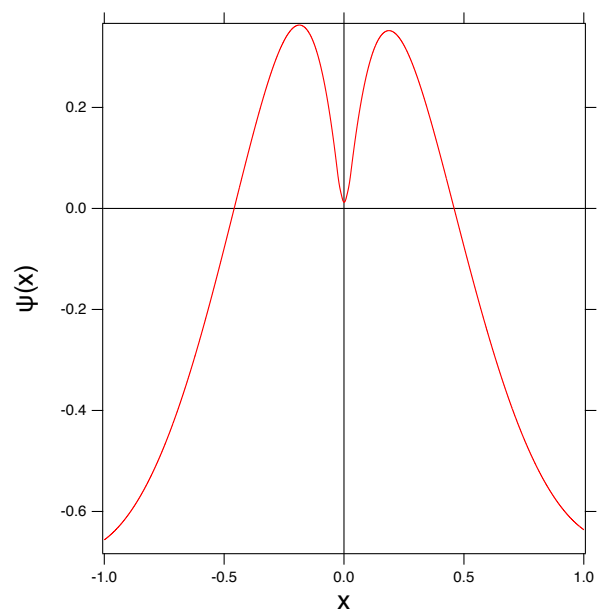


図 102: 6 の波動関数の拡大図

波動関数の拡大したものを (図 104),(図 106),(図 108) と示す

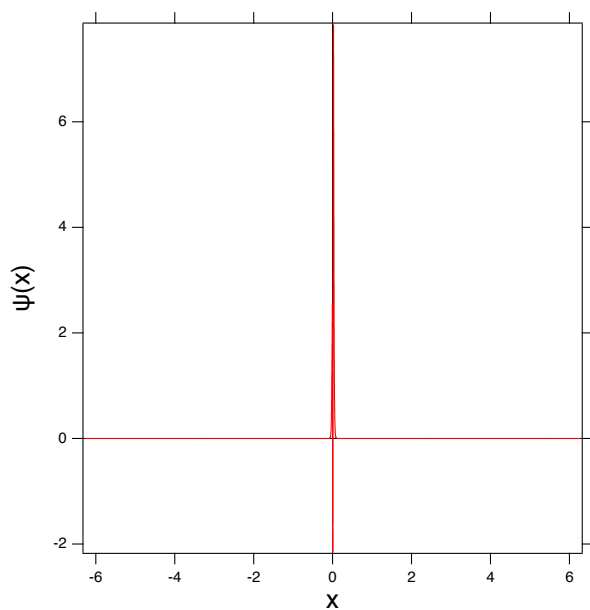


図 103: 7 の波動関数

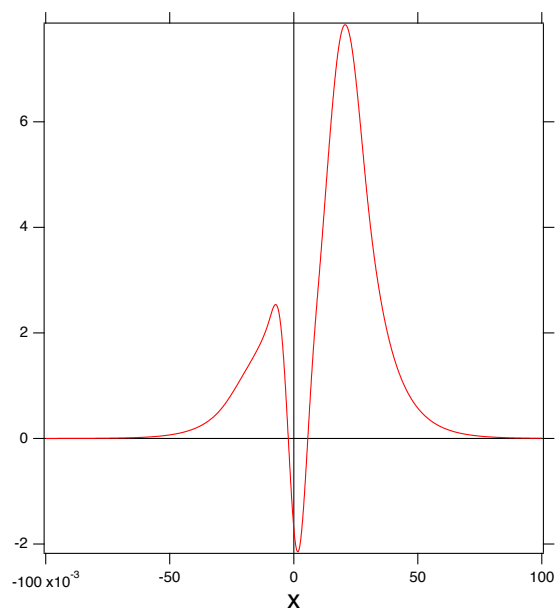


図 104: 7 の波動関数の拡大図

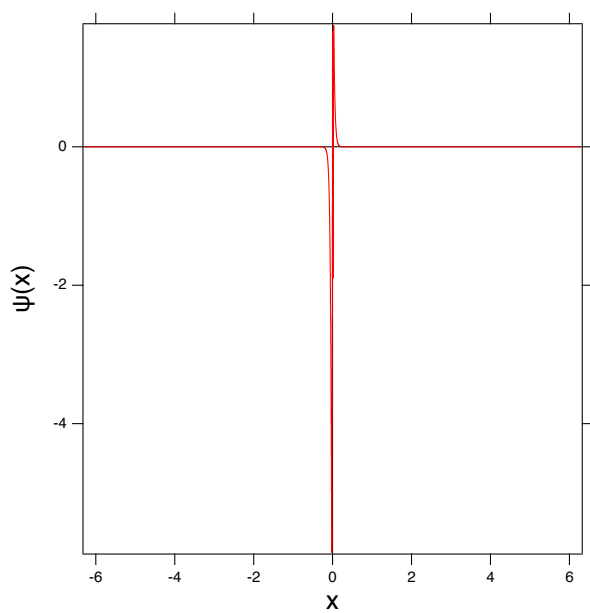


図 105: 8 の波動関数

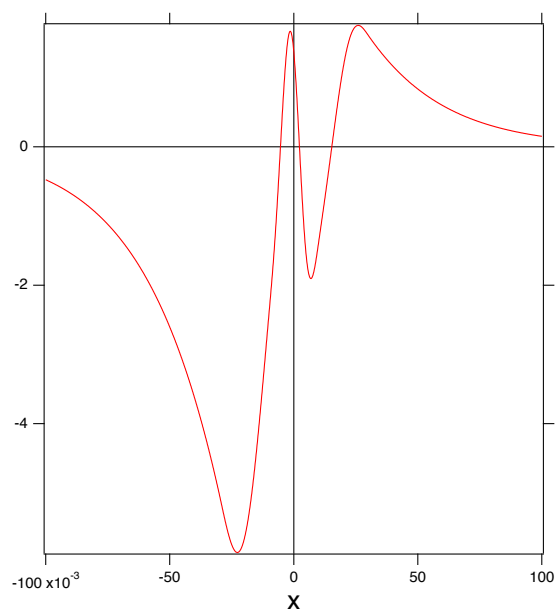


図 106: 8 の波動関数の拡大図

が 2.355 における波動関数を低準位から順に表したものを (図 109),(図 111),(図 113) と示す。また、各波動関数の拡大したものを (図 110),(図 112),(図 114) と示す



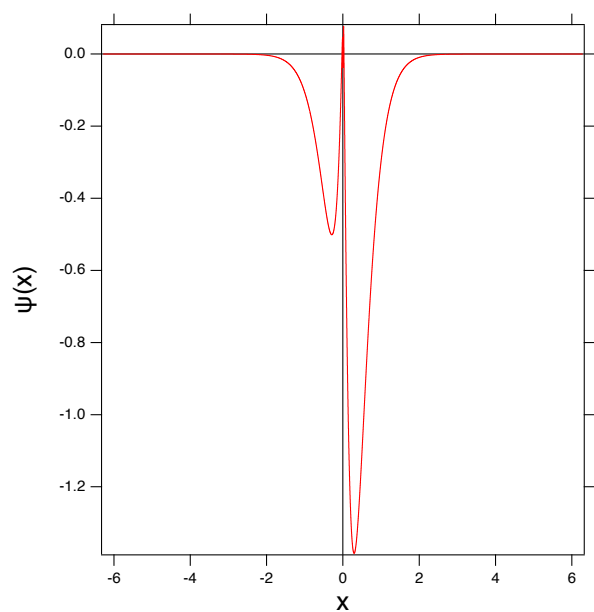


図 107: 9 の波動関数

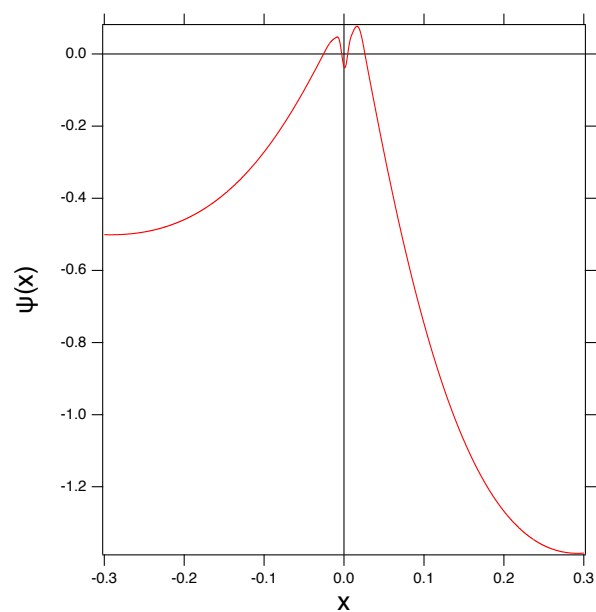


図 108: 9 の波動関数の拡大図

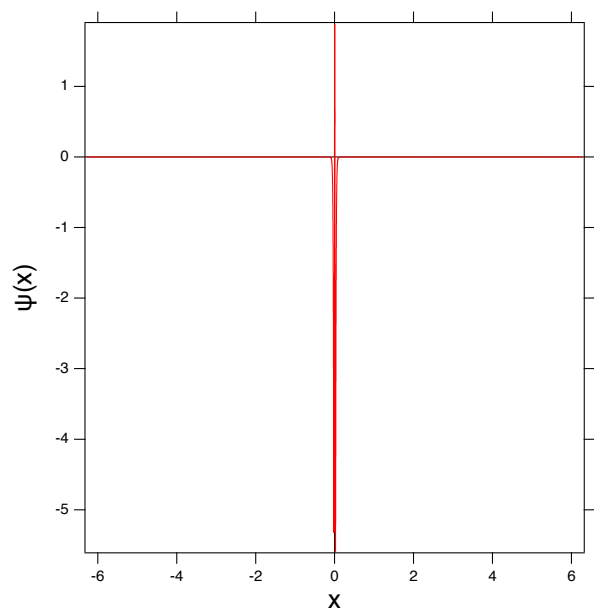


図 109: 10 の波動関数

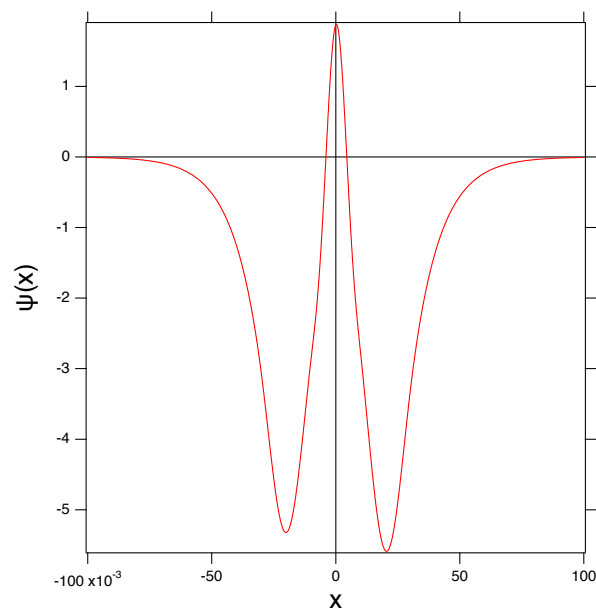


図 110: 10 の波動関数の拡大図

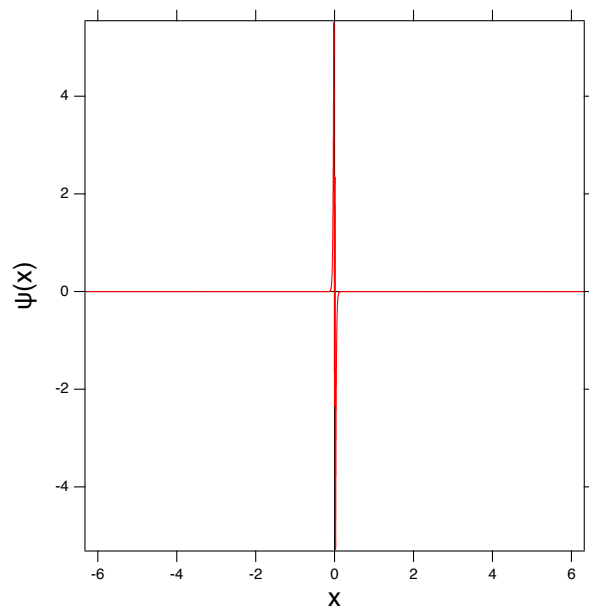


図 111: 11 の波動関数

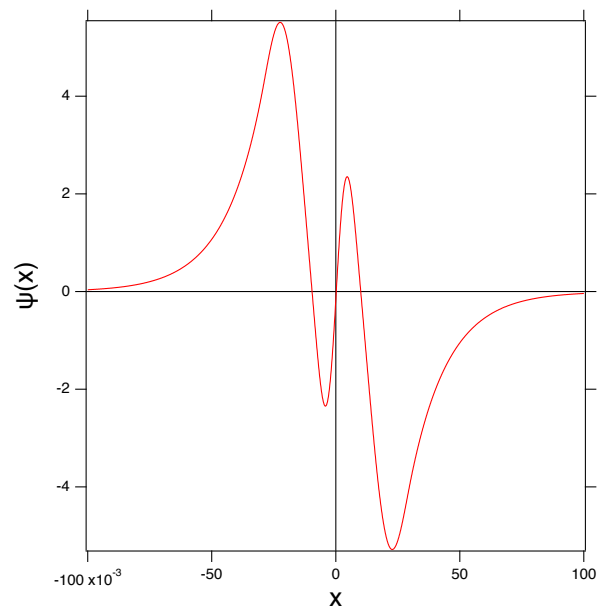


図 112: 11 の波動関数の拡大図

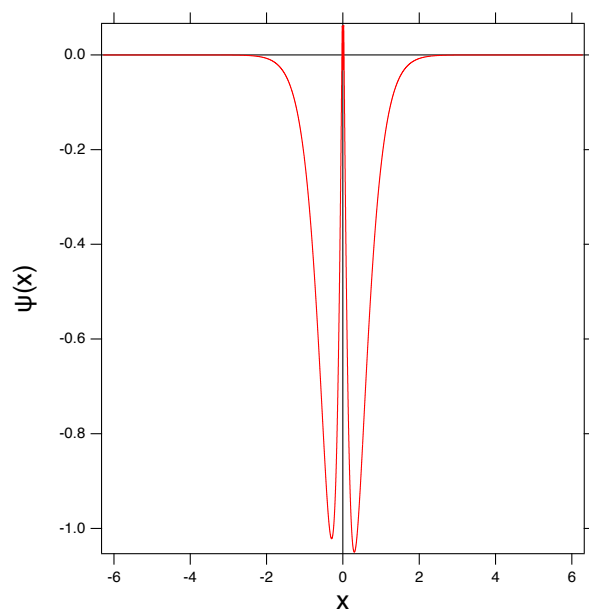


図 113: 12 の波動関数

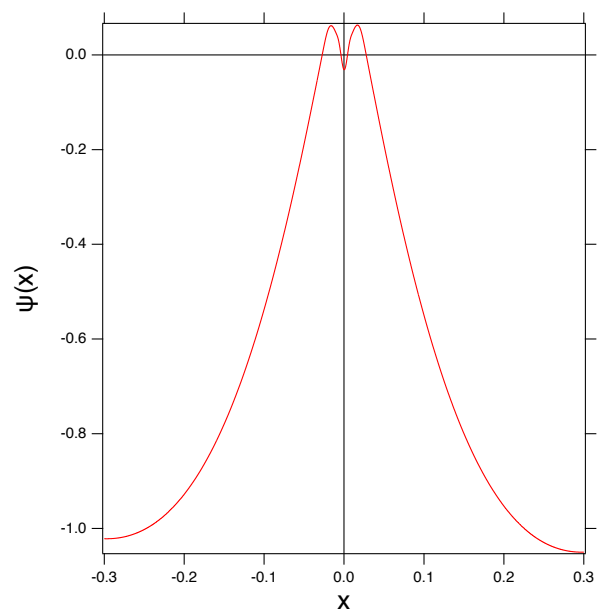


図 114: 12 の波動関数の拡大図

核ポテンシャルの左右非対称性により波動関数にも偏りがみられた。

### 4.3 クーロン系におけるエキゾチックな点状相互作用

クーロンを 0 にした非ラウンド型接続条件の波動関数とクーロン系のものを比較してみると の接続条件に相当するものを確認することができる。

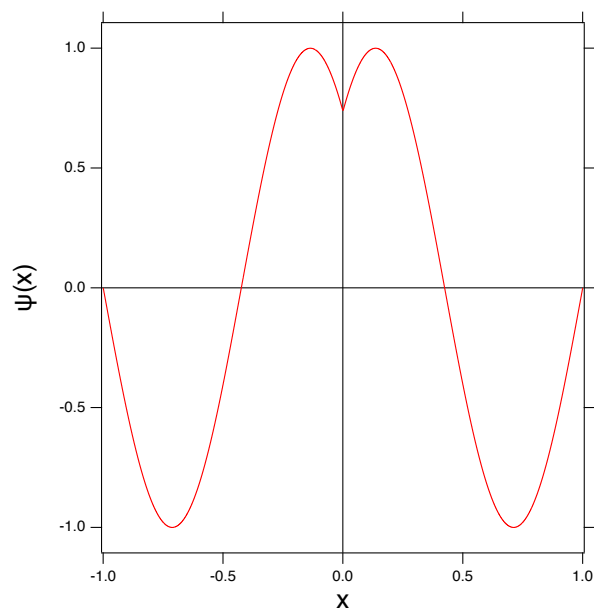


図 115: 型点状相互作用

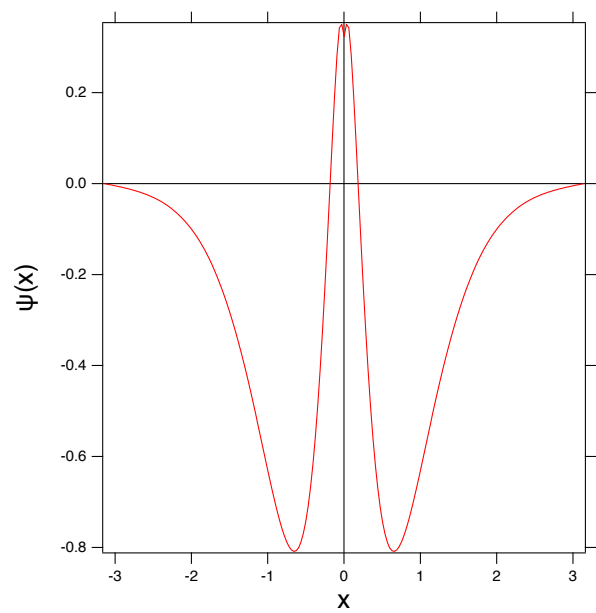


図 116: クーロン下における 3 山核ポテンシャル

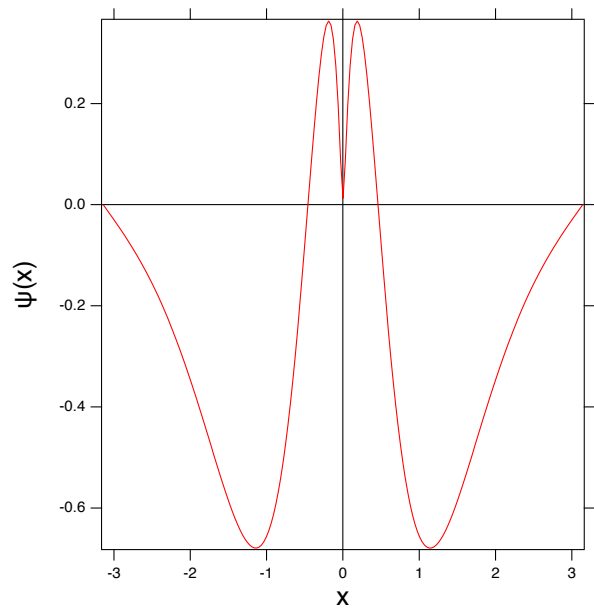


図 117: クーロン下における 3 山 Cos 型核ポテンシャル

#### 4.4 まとめと展望

まとめとして1次元水素において束縛状態として非リュドベリー型スペクトルが出現しうることを示した。3つのデルタ関数による一般的相互作用の構成を滑らかな関数で置き換える有用な手法になっていることを示した。これは従来の手法に比べ、実験的実現性という点で優れている。また、クーロン下で従来はないとされていたの点状作用の存在を示した。展望として本研究では低次元水素において中心部分に特異な核ポテンシャルを想定することで特異なスペクトルが発現しうることを数値解析的に示した。比較的連続的なスペクトルはレーザー等に応用をすることが可能であることから実際の実験を行うことに価値があると考えられる。また、ポテンシャルの中心部分が発散する他の系のスペクトルを数値解析的に求めることにも価値があると考えられる。

## 5 計算資源

計算に使用した機械は iMac(プロセッサ 4GHz Intel Core i7 メモリ 32GB 1867 MHz DDR3), iMac(プロセッサ 2.7GHz 12-Core Intel Xeon E5 メモリ 64GB 1866 MHz DDR3), iMac(プロセッサ 3.2GHz 8-Core Intel Xeon W メモリ 256GB 2666 MHz DDR4) である。また計算は数値解析プログラムである mathematica を用いた。今回の数値解析を行うにあたって 0.001 から 0.00001 の精度で行なった。大変微小な範囲での解析であることから精度に関してはいくつか問題がある。できるだけ精度が良い方が良いが現実的ではない。精度と時間のトレードオフにより 3 時間以内で収まるようにした。また、微小な精度の差により計算結果が大幅に変わるところも見られた。このことから将来より良い計算機を用いてより精度よく計算をし直すことには大変価値があると考えられる。

## 6 謝辞

本論文は筆者が高知工科大学環境理工学群に在籍中に行なった研究を纏めたものである。本研究の指導をしてくださった同学群教授の全卓樹先生には深謝の意を申し上げます。並びに本研究に助言を下された同学群助教の Axel Pérez-Obiol 先生には感謝の意を申し上げます。また、心の支えとなって下さった同研究室院生の Babajanova Gulmira 氏、同研究室 4 年の大庭秀斗氏、澤木花乃子氏、藤井明日香氏、藤方恒氏、山下雄貴氏、同研究室 3 年橋本礼司氏に謝意を申し上げます。

## 参考文献

- [1] I. Tsutsui, T. Fülöp and T. Cheon. 2002, J. Phys. A: Math. Gen. 36 275-287.
- [2] A. Pérez-Obiol, T. Cheon 2020, J. Phys. E: 119 114013.
- [3] 量子力学 I 朝永振一郎 2015 年 4 月 30 日 第 2 版第 44 刷発行 ISBN4-622-02551-5.
- [4] 量子力学 II 朝永振一郎 2014 年 4 月 10 日 第 2 版第 12 刷発行 ISBN4-622-04105-7.