Modified Pöschl-Teller type의 Potential hole을 이용한 波動 函數 및 에너지 固有値에 대한 研究

李 聖 瑞

Wave funections and eigenvalues for potential hole of a omodified Poschl-Teller type.

Sung-suh Rhee

Summary

The Schrödinger equation with potential of a modified Pöschl-Teller type is transformed into the form of hypergeometric equation.

Then two real standard solutions are obtained and general solution is composed by a linear combination of the two fundamental solutions.

For positive energies the intensity coefficients of transmission and reflection is obtained.

They are depend upon only the phase angles.

Eigenvalues exist for negative energies and also they are obtained.

緖 言

2原子 分子의 振動은 Morse Potential로 (Morse, 1929) 잘 설명되나, 振動 에너지보다 더 작은 回轉動運 에너지도 考慮하기 위하여 Morse 公式에 대한 回轉 修正이 된심 Potential을 근사적으로 대치해 이용하거나, 섭동법을 利用하여 研究되어 왔다(Flügge, 1974).

한편 더 나아가 Morse Potential의 一般化 및 2原子 分子의 振動에 대한 實際的 應用은 Walger(1967), Flügge(1967), Weiguny(1967) 등에 의하여 研究되어 왔다.

Morse Potential의 一般化라고 할 수 있는 Pöschl-Teller Potential은(Pöschl and Teller, 1933) 量子力學 및 分子 構造論에서 特히 有用하여 Flügge(1974) Rogen(1932), Morse(1932), Ratmor(1935)등이 여러가지로 연구한 바 있다.

이 Potential의 $\alpha x=\frac{\pi}{4}$에서 極小値를 갖는 $K=\lambda$인 경우에 대해 그 極小値 근방에서의 Potential 곡선은 근사적으로 Oscillator Potential로 고려하고 4승 Potential은 섭동으로 取扱하여 에너지 固有値를 2차 섭동까지 본인이 구한 바 있다.(李, 1978)

우리 일상 생활에 가장 밀접한 관계가 있는 분자들이 2原子 分子들이며 2原子 分子에 가장 잘 적용되는 Pöschl-Teller Potential을 더 組織的으로 깊이 研究할 必要가 있다.

Modified Pöschl-Teller type의 Potential hole의 식은 다음 (1)식으로 주어지며 여기 λ는 depth parameter이다.

$$V(x)=-\frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2\frac{\lambda(\lambda-1)}{\cosh^2\alpha x} \qquad (1)$$

위 (1)식의 graph의 槪形은 Fig. 1과 같다.

이 Potential에서의 波動 函數와 陽의 에너지에 대해서는 反射 係數 및 透過 係數를 구하고, 陰의 에너지에 대해서는 에너지 固有値를 구하려 한다.

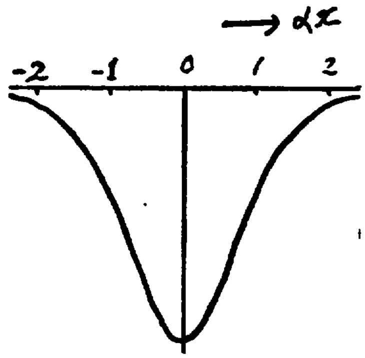

Fig 1. Modified Pöschl-Teller Potential hole.

本 硏究에 있어서 海外 硏究中이시면서도 資料를 보내 주신 建國大學校 朱暎欽 博士님과 많은 助言을 해주신 서울大學校 申熙明 博士님께 감사를 드린다.

本 論

1. Modified Pöschl-Teller type의 Potential hole에서의 波動 函數

이 Potential을 Schrödinger 방정식

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2}+V(x)U=Eu$$

에 대입하고 $\frac{2mE}{\hbar^2}=k^2$으로 놓아 정돈하면 다음식이 얻어진다.

$$\frac{d^2u}{dx^2}+\left(k^2+\frac{\alpha^2\lambda(\lambda-1)}{\cosh^2\alpha x}\right)u=0 \qquad (2)$$

지금 새로운 변수 $y=\cosh^2\alpha x$를 도입하면

$$y(1-y)u''+\left(\frac{1}{2}-y\right)u'.-\left(\frac{k^2}{4\alpha^2}+\frac{\lambda(\lambda-1)}{4y}\right)u=0$$

으로 된다. u를

$$U=y^{\frac{\lambda}{2}}\nu(y)=(\cosh^2\alpha x)^{\frac{\lambda}{2}}\nu(\cosh^2\alpha x) \qquad (3)$$

로 놓으면

$$y(1-y)\left\{\frac{\lambda}{2}\left(\frac{\lambda}{2}-1\right)y^{\frac{\lambda}{2}\,2}\nu(y)+\lambda y^{\frac{\lambda}{2}-1}\nu'(y)+y^{\frac{\lambda}{2}}\nu''(y)\right\}+\left(\frac{1}{2}-y\right)\left\{\frac{\lambda}{2}y^{\frac{\lambda}{2}-1}\nu(y)+y^{\frac{\lambda}{2}}\nu'(y)\right\}$$
$$-\left\{\frac{k^2}{4\alpha^2}+\frac{\lambda(\lambda-1)}{4y}\right\}y^{\frac{\lambda}{2}}\nu(y)=0$$

윗식을 정돈하면

$$y(1-y)\nu''+\left\{\left(\lambda+\frac{1}{2}\right)-(\lambda+1)y\right\}\nu'-\frac{1}{4}\left(\lambda^2+\frac{k^2}{\alpha^2}\right)\nu=0 \qquad (4)$$

다시 Z=1−y로 하면

$$z(1-z)\nu''+\left\{\frac{1}{2}-(\lambda+1)z\right\}\nu'-\frac{1}{4}\left(\lambda^2+\frac{k^2}{\alpha^2}\right)\nu=0 \qquad (5)$$

으로 되어 hypergeometric differential equation
$x(1-x)y''(x)+[C-(a+b+1)x]y'(x)-ab\,y(x)=0$
의 형으로 된다.(Arfken, 1973)

해는 영역 $0\leq|x|<\infty$에 대해서 구하게 되는바, 변수 y로는 그 영역이 $1\leq y<\infty$이고, 변수 z로는 그 영역이 $-\infty<z\leq 0$으로 된다. (5)식을 超幾何 微分 方程式에 맞추면

$$a=\frac{1}{2}\left(\lambda+\frac{ik}{\alpha}\right),\quad b=\frac{1}{2}\left(\lambda-\frac{ik}{\alpha}\right),\quad c=\frac{1}{2} \qquad (6)$$

로 놓을 수 있고, 다음과 같이 2개의 解가 얻어진다.

$$\nu(y)={}_2F_1\left(a,\ b,\ \frac{1}{2};1-y\right)$$
$$\nu(y)=(1-y)^{\frac{1}{2}}{}_2F_1\left(a+\frac{1}{2},\ b+\frac{1}{2},\ \frac{3}{2};1-y\right)$$

따라서 完全解는

$$\nu(y)=A{}_2F_1\left(a,\ b,\ \frac{1}{2};1-y\right)+B(1-y)^{\frac{1}{2}}{}_2F_1\left(a+\frac{1}{2},\ b+\frac{1}{2},\ \frac{3}{2};1-y\right) \qquad (7)$$

이다. 그런데 Fig. 1의 Potential hole의 最深部에서는 즉 $x=0$ 또는 $y=1$에서

$\lim_{\substack{x \to 0 \\ y \to 1}} U$의 근사치는

$$u(0) = A + B(1-y)^{\frac{1}{2}}$$

이다. 實數 標準解만이 物理的 意味가 있으므로 x가 偶數인 경우에 對應하는 實數 標準解 ue와 x가 奇數인 경우에 對應하는 實數 標準解 uo를 골라 내야 한다. 물론 ue와 uo는 다음 관계가 成立한다.

$$ue(-x) = ue(x), \quad uo(-x) = uo(x)$$

B=O 이고 A=1이면, 偶數 標準解가 구해진다.

$$U_e(x) = \cosh^{\lambda}\alpha x \ {}_2F_1(a,\ b,\ \frac{1}{2}\ ;\ -\sinh^2\alpha x) \quad (8)$$

또 A=O 이고 B=i 로 하면 奇數標準解를 구할 수 있다.

$$U_o(x) = \cosh^{\lambda}\alpha x \ \sinh\alpha x \ {}_2F_1(a+\frac{1}{2},\ b+\frac{1}{2},\ \frac{3}{2}\ ;\ -\sinh^2\alpha x) \quad (9)$$

이들 解를 상세히 論議하기 위하여 (8)식과 (9)식에서의 獨立變數의 - 무한대 값에 대한 漸近的 性質을 利用하기로 한다.

$$-\sinh^2\alpha x \to -2^{-2} e^{2\alpha|x|}, \quad \cosh\alpha x \to 2^{-1} e^{\alpha|x|} \quad (10)$$

${}_2F_1(a,\ b,\ c\ ;\ z)$의 $z\to\infty$에 대한 漸近式은 다음과 같다. (Abramowitz, 1964)

$${}_2F_1(a,\ b,\ c\ ;\ z) \to \frac{\Gamma(c)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)}(-z)^{-a} + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a-b)}{\Gamma(a)\Gamma(c-b)}(-z)^{-b} \quad (11)$$

(10)과 (11)을 利用하면 (8)식과 (9)식은 다음과 같이 表現된다.

$$U_e(x) \to 2^{-\lambda} e^{\alpha\lambda|x|}\Gamma(\frac{1}{2}) \left\{ \frac{\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(\frac{1}{2}-a)} 2^{2a} e^{-2a\alpha|x|} + \frac{\Gamma(a-b)}{\Gamma(a)\Gamma(\frac{1}{2}-b)} 2^{2b} e^{-2b\alpha|x|} \right. \quad (12)$$

$$U_o(x) \to \pm 2^{-(\lambda+1)} e^{(\lambda+1)\alpha|x|} \Gamma(\frac{3}{2}) \left\{ \frac{\Gamma(b-a)}{\Gamma(b+\frac{1}{2})+\Gamma(1-a)} 2^{2a+1} e^{-(2a+1)\alpha|x|} + \frac{\Gamma(a-b)}{\Gamma(a+\frac{1}{2})\Gamma(1-b)} 2^{2b+1)\alpha|x|} \right. \quad (13)$$

여기 ±의 부호는 x〉1 인가, x〈1 인가에 의해 정해진다. 만약 Energy가 +값이면, $a = \frac{1}{2}(\lambda + \frac{ik}{\alpha})$와 $b = \frac{1}{2}(\lambda - \frac{ik}{\alpha})$ 는 서로 복소 공액이다. (12)식과 (13)식에 + Energy 값에 대해 복소 공액인 a, b를 넣어 偶函數와 奇函數를 구하면 다음과 같다.

$$U_e(x) \to 2^{-\lambda} e^{\lambda\alpha|x|} \Gamma(\frac{1}{2}) \left\{ \frac{\Gamma(-\frac{ik}{\alpha})}{\Gamma(\frac{\lambda}{2}-\frac{ik}{2\alpha})\ \Gamma(\frac{1-\lambda}{2}-\frac{k}{2\alpha})} 2\lambda^{\frac{ik}{2\alpha}} e^{-\lambda\alpha|x|} e^{ik|x|} + \frac{\Gamma(\frac{ik}{\alpha})}{\Gamma(\frac{\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})\ \Gamma(\frac{1-\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})} 2^{\lambda} 2^{-\frac{ik}{\alpha}} e^{-\lambda\alpha|x|} e^{ik|x|} \right\}$$

정돈하여

$$U_e(x) \to \Gamma(\frac{1}{2}) \left\{ \frac{\Gamma(-\frac{ik}{\alpha}) e^{i\frac{k}{\alpha}\log 2}}{\Gamma(\frac{\lambda}{2}-\frac{ik}{2\alpha})\ \Gamma(\frac{1-\lambda}{2}-\frac{ik}{2\alpha})} e^{-ik|x|} + \frac{\Gamma(\frac{ik}{\alpha})\ e^{-i\frac{k}{\alpha}\log 2}}{\Gamma(\frac{\lambda}{2}+i\frac{k}{2\alpha})\ \Gamma(\frac{1-\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})} e^{ik|x|} \right\} \quad (14)$$

한편, 奇 函數는

$$U_o(x) \to \pm 2^{-(\lambda+1)} e^{(\lambda+1)\alpha|x|} \Gamma(\frac{3}{2}) \left\{ \frac{\Gamma(-\frac{ik}{\alpha})}{\Gamma(\frac{1+\lambda}{2}-\frac{ik}{2\alpha})\ \Gamma(1-\frac{\lambda}{2}-\frac{ik}{2\alpha})} 2^{\lambda+1} 2^{\frac{ik}{\alpha}} e^{-(\lambda+1)|x|} e^{-ik|x|} + \frac{\Gamma(\frac{ik}{\alpha})}{\Gamma(\frac{1+\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})\Gamma(1-\frac{\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})} 2^{\lambda+1} 2^{-\frac{ik}{\alpha}} e^{-(\lambda+1)\alpha|x|} e^{ik|x|} \right\}$$

정돈하여

$$U_o(x) \to \pm\Gamma(\tfrac{3}{2})\Big\{\frac{\Gamma(-\frac{ik}{\alpha})\, e^{i\frac{k}{\alpha}\log 2}}{\Gamma(\frac{1+\lambda}{2}-\frac{ik}{2\alpha})\,\Gamma(1-\frac{\lambda}{2}-\frac{ik}{2\alpha})}$$

$$e^{-ik|x|}+\frac{\Gamma(\frac{ik}{\alpha})\, e^{-i\frac{k}{\alpha}\log 2}}{\Gamma(\frac{1+\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})\,\Gamma(1-\frac{\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})} e^{ik|x|} \quad (15)$$

(14) 식을 三角函數로 바꾸어 表現하면

$$U_e(x) \to \Gamma(\tfrac{1}{2})\Big\{\frac{\Gamma(-\frac{ik}{\alpha})\, e^{i\frac{k}{\alpha}\log 2}}{\Gamma(\frac{\lambda}{2}-\frac{ik}{2\alpha})\,\Gamma(\frac{1-\lambda}{2}-\frac{ik}{2\alpha})}$$

$$+\frac{\Gamma(\frac{ik}{\alpha})\, e^{-i\frac{k}{\alpha}\log 2}}{\Gamma(\frac{\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})\,\Gamma(\frac{1-\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})}\Big\}\cos k|x|$$

$$+\Gamma(\tfrac{1}{2})i\Big\{\frac{\Gamma(\frac{ik}{\alpha})\, e^{-i\frac{k}{\alpha}\log 2}}{\Gamma(\frac{\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})\,\Gamma(\frac{1-\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})}$$

$$-\frac{\Gamma(-\frac{ik}{2})e^{i\frac{k}{\alpha}\log 2}}{\Gamma(\frac{\lambda}{2}-\frac{ik}{2\alpha})\,\Gamma(\frac{1-\lambda}{2}-\frac{ik}{2\alpha})}\Big\}\sin k|x|$$

그런데

$$-C_e\sin\varphi_e = \Gamma(\tfrac{1}{2})i\Big\{\frac{\Gamma(\frac{ik}{\alpha})\, e^{-i\frac{k}{\alpha}\log 2}}{\Gamma(\frac{\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})\,\Gamma(\frac{1-\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})}$$

$$-\frac{\Gamma(-\frac{ik}{\alpha})e^{i\frac{k}{\alpha}\log 2}}{\Gamma(\frac{\lambda}{2}-\frac{ik}{2\alpha})\,\Gamma(\frac{1-\lambda}{2}-\frac{ik}{2\alpha})}\Big\}C_e\cos\varphi_e$$

$$=\Gamma(\tfrac{1}{2})\Big\{\frac{\Gamma(-\frac{ik}{\alpha})\, e^{i\frac{k}{\alpha}\log 2}}{\Gamma(\frac{\lambda}{2}-\frac{ik}{2\alpha})\,\Gamma(\frac{1-\lambda}{2}-\frac{ik}{2\alpha})}$$

$$+\frac{\Gamma(\frac{ik}{\alpha})\, e^{-i\frac{k}{\alpha}\log 2}}{\Gamma(\frac{\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})\,\Gamma(\frac{1-\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})}\Big\}$$

로 놓아 정돈하면

$$U_e \to C_e(\cos\varphi_e\ \cos k|x| - \sin\varphi_e\ \sin k|x|) \to C_e\cos(k|x|+\varphi_e)$$

로 된다. $C_e^2=C_e^2\cos^2\varphi_e+C_e^2\sin\varphi_e^2$ 을 이용하여

$$C_e^2=\Gamma^2(\tfrac{1}{2})\frac{4\Gamma(\frac{ik}{\alpha})\,\Gamma(-\frac{ik}{\alpha})\cdots\cdots}{\Gamma(\frac{\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})\,\Gamma(\frac{1-\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})}$$

$$\frac{\cdots\cdots}{\Gamma(\frac{\lambda}{2}-\frac{ik}{2\alpha})\,\Gamma(\frac{1-\lambda}{2}-\frac{ik}{2\alpha})}$$

이며 여기에 복소 평면에서 Gamma Function의 관계식 (Abramowitz 1964)

$$\Gamma(iy)\Gamma(-iy)=|\Gamma(iy)|^2=\frac{\pi}{y\sin\pi y}$$

$$\Gamma(x+iy)\Gamma(x-iy)=|\Gamma(x+iy)|^2$$

임을 감안 하면

$$C_e=\frac{2\pi\sqrt{\alpha}}{\sqrt{k}\sqrt{\sinh\frac{\pi k}{\alpha}}}\cdot\frac{1}{|\Gamma(\frac{\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})|\,|\Gamma(\frac{1-\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})|}$$

로 구해진다. 결국

$$U_e \to \frac{2\pi\sqrt{\alpha}}{\sqrt{k}\sqrt{\sinh\frac{\pi k}{\alpha}}\,|\Gamma(\frac{\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})|\,|\Gamma(\frac{1-\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})|}\cos(k|x|+\varphi_e) \quad (16)$$

로 偶의 固有函數가 구해진다. 또 한편으로 여기

$$\varphi_e=\arg\Big\{\frac{\Gamma(\frac{ik}{\alpha})\, e^{-i\frac{k}{\alpha}\log 2}}{\Gamma(\frac{\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})\,\Gamma(\frac{1-\lambda}{2}+i\frac{k}{2\alpha})}\Big\}$$

로 놓아도 결과는 같다.

같은 방법으로 U_o에 대해서도 삼각함수로 바꾸고

$$C_o\cos\phi_o = \Gamma(\tfrac{3}{2})\Big\{\frac{\Gamma(-\frac{ik}{\alpha})e^{i\frac{k}{\alpha}\log 2}}{\Gamma(\frac{\lambda+1}{2}-\frac{ik}{2\alpha})\Gamma(1-\frac{\lambda}{2}-\frac{ik}{2\alpha})}$$

$$+\frac{\Gamma(\frac{ik}{\alpha})\, e^{-i\frac{k}{\alpha}\log 2}}{\Gamma(\frac{\lambda+1}{2}+\frac{ik}{2\alpha})\Gamma(1-\frac{\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})}\Big\}$$

$$-C_o\sin\varphi_o=\Gamma(\frac{3}{2})i\left\{\frac{\Gamma(\frac{ik}{\alpha})\,e^{-i\frac{k}{\alpha}\log 2}}{\Gamma(\frac{\lambda+1}{2}+\frac{ik}{2\alpha})\Gamma(1-\frac{\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})}-\frac{\Gamma(-\frac{ik}{\alpha})e^{i\frac{k}{\alpha}\log 2}}{\Gamma(\frac{\lambda+1}{2}-\frac{ik}{2\alpha})\Gamma(1-\frac{\lambda}{2}-\frac{ik}{2\alpha})}\right\}$$

로 놓고 Co를 구하면

$$C_o=\frac{\pi\sqrt{\alpha}}{\sqrt{k}\sqrt{\sinh\frac{\pi k}{\alpha}}\left|\Gamma(\frac{\lambda+1}{2}+\frac{ik}{2\alpha})\right|\left|\Gamma(1-\frac{\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})\right|}$$

이다. 따라서 奇의 固有函數는 다음과 같다.

$$U_o\to\pm\frac{\pi\sqrt{\alpha}}{\sqrt{k}\sqrt{\sinh\frac{\pi k}{\alpha}}\left|\Gamma(\frac{\lambda+1}{2}+\frac{ik}{2\alpha})\right|\left|\Gamma(1-\frac{\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})\right|}\,|\cos(k|x|+\varphi_o) \qquad (17)$$

여기 φ_o는

$$\varphi_o=\arg\frac{\Gamma(\frac{ik}{\alpha})\,e^{-i\frac{k}{\alpha}\log 2}}{\Gamma(\frac{\lambda+1}{2}+\frac{ik}{2\alpha})\Gamma(1-\frac{\lambda}{2}+\frac{ik}{2\alpha})}$$

로 놓고 계산해도 결과는 같다. 지금 구한 Ce와 Co는 振幅 因子이다.

(16), (17)의 두 基本解를 線形 結合 하면 波動 函數는

$$U=AUe+BUo$$

이고 A, B는 임의 상수이다.

$x>0$인 경우

$$U=\frac{A}{2}C_e(e^{i\varphi_e}\,e^{ikx}+e^{-i\varphi_e}\,e^{-ikx})+\frac{B}{2}C_o(e^{i\varphi_o}e^{ikx}+e^{-i\varphi_o}\,e^{-ikx})$$

$x<0$ 인 경우

$$U=\frac{A}{2}C_e(e^{i\varphi_e}\,e^{-ikx}+e^{-i\varphi_o}\,e^{ikx})-\frac{B}{2}C_o(e^{i\varphi_o}\,e^{-ikx}+e^{-i\varphi_o}\,e^{ikx})$$

로 쓸수 있다.

2. 투과 계수와 반사 계수.

漸近形의 解를 얻기 위하여 두 基本解를 선형 結合하여 만든 식들과 다음 식을 비교하기로 한다.

$$U=\begin{cases}e^{ikx}+Re^{-ikx} & (x<0\text{ 인 }x\text{에 대해})\\ Te^{ikx} & (x>0\text{ 인 }x\text{에 대해})\end{cases}$$

여기 e^{ikx}는 입사파 e^{-ikx}는 반사파를 나타낸다. 그러면 다음 식이 얻어진다.

$$\frac{A}{2}C_e e^{i\varphi_e}+\frac{B}{2}C_o e^{i\varphi_o}=T$$

$$\frac{A}{2}C_e e^{-i\varphi_e}+\frac{B}{2}C_o e^{-i\varphi_o}=0$$

$$\frac{A}{2}C_e e^{i\varphi_e}-\frac{B}{2}C_o e^{i\varphi_o}=R$$

$$\frac{A}{2}C_e e^{-i\varphi_e}-\frac{B}{2}C_o e^{-i\varphi_o}=I$$

두번째 식과 네번째 식을 더하면 $AC_e=e^{i\varphi_e}$, 두번째 식에서 네번째 식을 빼면 $BC_o=-e^{i\varphi_o}$가 얻어 지므로

$$\left.\begin{aligned}T&=\frac{1}{2}(e^{2i\varphi_e}-e^{2i\varphi_o})\\ R&=\frac{1}{2}(e^{2i\varphi_e}+e^{2i\varphi_o})\end{aligned}\right\}\qquad(18)$$

가 구해진다. 먼저 투과 진폭의 식에서 투과의 세기 계수를 구한다.

$e^{i\varphi_e}$와 $e^{i\varphi_o}$를 삼각 함수로 바꾸고

$$\cos^2 z_1-\cos^2 z_2=-\sin(z_1+z_2)\sin(z_1-z_2)$$

$$\sin^2 z^1-\sin^2 z_2=\sin(z_1+z_2)\cdot\sin(z_1-z_2)$$

임을 쓰면

$$T=-\sin(\varphi_e+\varphi_o)\sin(\varphi_e-\varphi_o)+\frac{\lambda}{2}(\sin 2\varphi_e-\sin 2\varphi_o)$$

또 $\sin z_1-\sin z_2=2\cos\frac{z_1-z_2}{2}\sin\frac{z_1-z_2}{2}$ 임을 써서 계산하고 정돈하여

$$T=\sin(\varphi_e-\varphi_o)\, e^{i(\frac{\pi}{2}+\varphi_e+\varphi_o)}$$

이다. 따라서 투과의 세기 계수 $|T|^2$은

$$|T|^2=TT^*=\sin^2(\varphi_e-\varphi_o) \qquad (19)$$

이다.

또 반사 진폭의 식으로 부터

$$\cos^2 z_1-\sin^2 z_2=\cos(z_1+z_2)\cos(z_1-z_2)$$

$$\sin z_1+\sin z_2 = 2\sin\left(\frac{z_1+z_2}{2}\right)\cos\left(\frac{z_1-z_2}{2}\right)$$

을 이용하여 계산하고 정돈하면

$$R=\cos(\varphi_e-\varphi_o)e^{i(\varphi_e+\varphi_o)}$$

이다. 따라서 반사의 세기 계수 $|R|^2$은

$$|R|^2 RR^*=\cos^2(\varphi_e-\varphi_o) \qquad (20)$$

이 얻어진다. (19)식과 (20)식은 보존 법칙 $|T|^2+|R|^2=1$ 을 만족시키고 이들은 단지 위상각에만 의존하고 고유함수의 규격화 인자에만 무관함 을 알수 있다. 세기 계수를 계산하기 위해 φ_e와 φ_o의 관한 식에서 $\frac{k}{2\lambda}=g$로 놓고 $\varphi_e-\varphi_o$를 구하면

$$\varphi_e-\varphi_o=\arg\Gamma\left(ig+\frac{\lambda}{2}+\frac{1}{2}\right)+\arg\Gamma\left(ig+1-\frac{\lambda}{2}\right)$$
$$-\arg\Gamma\left(ig+\frac{\lambda}{2}\right)-\arg\Gamma\left(ig+\frac{1}{2}-\frac{\lambda}{2}\right) \qquad (21)$$

이다. 일반으로 $\Gamma(z)\Gamma(1-z)=\frac{\pi}{\sin\pi z}$ 인 관계에서 $\arg\Gamma(z)-\arg\Gamma(1-z^*)=-\arg\sin\pi z$ 이므로

$ig+\frac{\lambda}{2}+\frac{1}{2}=z_1$ 과 $ig+\frac{\lambda}{2}=z_2$ 로 놓으면

$ig+\frac{\lambda}{2}-\frac{\lambda}{2}=1-z_1^*$, $ig+1-\frac{\lambda}{2}=1-z_2^*$ 로 되어 (21)식은 다음과 같이 표시된다.

$$\varphi_e-\varphi_o=-\arg\sin\pi\left(\frac{\lambda+1}{2}+ig\right)+\arg\sin\pi\left(\frac{\lambda}{2}+ig\right)$$

그런데 $\arg\sin z=\operatorname{arc}\tan(\cot x\tanh y)$

$\arg\cos z=-\operatorname{arc}\tan(\tan x\tanh y)$

$$\operatorname{arc}\tan z_1+\operatorname{arc}\tan z_2=\operatorname{arc}\tan\left(\frac{z_1+z_2}{1-z_1z_2}\right)$$

인 관계를 써서

$$\varphi_e-\varphi_o=\operatorname{arc}\tan\left\{\sinh\pi g\ \cosh\pi g\left(\tan\frac{\pi\lambda}{2}+\cot\frac{\pi\lambda}{2}\right)\right\}$$

로 되며, 여기에 또

$$\tan\frac{\pi\lambda}{2}+\cot\frac{\pi\lambda}{2}=\frac{2}{\sin\pi\lambda}$$

$$\sinh 2z=2\sinh z\cosh z$$

인 관계를 이용하여 한번더 계산하고 정돈 하면

$$\varphi_e-\varphi_o=\operatorname{arc}\tan\left\{\frac{\sinh\frac{k}{\alpha}}{\sin\pi\lambda}\right. \qquad (22)$$

로 된다.

만약 depth parameter λ가 整數이면 (22)식의 분모는 0이 되고, 즉

$\varphi_e-\varphi^o=\frac{\pi}{2}$로 되어 $|T|^2=1$ $|R|^2=0$ 이다. 이들 경우에서는 전 入射 에너지는 粒子들의 모든 에너지에 대해서 투과하고 반사는 일어나지 않는다. 또 다른 한편 E=0인 즉 $\frac{\pi k}{\alpha}=0$ 인 極限의 경우에서는 (22)식의 분자가 0이되고 整數가 아닌 入의 값에 대해서 $\varphi_e-\varphi_o=0$이 되어 전반사가 일어나게 된다. 환언 하면 $|T|^2=0$ $|R|^2=1$이 된다는 뜻이다.

入의 모든 값에 대해 $P=\frac{\sinh\frac{\pi k}{\alpha}}{\sin\pi\lambda}$ 로 놓으면 $\tan(\varphi_e-\varphi_o)=P$ 로 되므로

$$|R|^2=\frac{1}{1+p^2},\quad |T|^2=\frac{p^2}{1+p^2} \qquad (23)$$

로 표시 된다.

3. Energy 固有値

에너지의 -값에 대해서는 固有値가 存在한다. 지

금 $k=ik$ 즉 $E=-\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$으로 놓으면 $a=\frac{1}{2}(\lambda-\frac{k}{\alpha})$, $b=\frac{1}{2}(\lambda+\frac{k}{2})$ 둘은 實數가 된다.

漸近式을 에너지의 －값에 대해서 고쳐쓰면 다음과 같다.

$$U_e(x) \rightarrow (\Gamma\frac{1}{2})\left\{\frac{\Gamma(\frac{k}{\alpha})}{\Gamma(\frac{\lambda}{2}+\frac{k}{2\alpha})\,\Gamma(\frac{1-\lambda}{2}+\frac{k}{2\alpha})}2^{-\frac{k}{\alpha}}\right.$$

$$\left.e^{k|x|}+\frac{\Gamma(-\frac{k}{\alpha})}{\Gamma(\frac{\lambda}{2}-\frac{k}{2\alpha})\Gamma(\frac{1}{2}-\frac{\lambda}{2}-\frac{k}{2\alpha})}2^{\frac{k}{\alpha}}e^{-k|x|}\right\}$$

$$U_o(x)\rightarrow \pm\ \Gamma(\frac{3}{2})\left\{\frac{\Gamma(\frac{k}{\alpha})}{\Gamma(\frac{1+\lambda}{2}+\frac{k}{2\alpha})\Gamma(1-\frac{\lambda}{2}+\frac{k}{2\alpha})}\right.$$

$$2^{-\frac{k}{\alpha}}e^{k|x|}+\frac{\Gamma(-\frac{k}{\alpha})}{\Gamma(\frac{1+\lambda}{2}-\frac{k}{2\alpha})\Gamma(1-\frac{\lambda}{2}-\frac{k}{2\alpha})}2^{\frac{k}{\alpha}}$$

$$\left.e^{-k|x|}\right\}$$

위 두식에서 첫번째 항은 $e^{k|x|}$ 과 같은 성질을 나타내고, 두번째 항은 $e^{-k|x|}$와 같은 성질을 나타낸다. 따라서 K＞0인 경우에 대해 첫번째항의 인자가 0이 된다면 規格化 可能한 解가 存在할수 있다. Γ函數가 極이 陰의 整數 －n에 存在하는 ·모든 實數의 獨立 變數에 대해 취해졌으므로 固有値는 다음과 같이 구해진다.

偶數의 固有 狀態에 대해서는

$$\frac{k}{\alpha}=\lambda-1-2n$$

奇數의 固有 狀態에 대해서는

$$\frac{k}{\alpha}\Rightarrow\lambda-2-2n$$

이므로 에너지 항은

$$E_n=-\frac{\hbar^2 k^2}{2m}(\lambda-1-n)^2 \quad n\leq\lambda-1 \qquad (24)$$

이다. 여기 n은 0, 1, 2, …의 값을 취하며 奇數분의 偶數에 대하여 奇數 固有 狀態분의 固有 狀態의 비값을 나타 낸다.

結 論

Modified Pöschl－Tellertype의 poteutial hole에서의 波動 函數를 구했으며, 陽의 에너지에 대해서는 반사 계수 및 투과 계수를 위상각에만 관계되는 函數의 형태로 구하였다.

또 陰의 에너지에 대해서는 그 固有値를 구하였다. 이 결과는 $\alpha\rightarrow0$, $\lambda\rightarrow\infty$인 極限의 경우도 포함하고 있는 일반적인 것으로 2原子 分子의 硏究에 있어서, 實驗値와 비교할 수 있는 좋은 理論的 根據로 이용될 수 있으며, 이러한 實驗 硏究 結果를 이용하여 理論的인 硏究의 修正과 改善도 아울러 기대할 수 있다.

引 用 文 獻

Abramowitz, M. and Stegen, A. (1964) ; Handbook of mathematical tabls. Dover Publishing INC. pp. 73～559.

Arfken, G. (1973) ; Mathematical Methods for Physicists. Academic Press. pp632～633.

Flugge, S. (1974) ; Practical Quantum Mechanics. Springer-Verlag. p. 89, p. 186.

Morse, P. (1929) ; Physics Rev. 34. p. 57.

Poschl, G. and Teller, E. (1933) ; Z. Physik. 83. p. 143.

Ratmor, W. (1935) ; Z. Physik. 93. p. 528.

李聖瑞(1978) ; 建國大學校 大學院 碩士學位論文, pp. 3～13.

Rogen, N. and Morse, P. M. (1932) ; Physics Rev 42. p. 120.

Walger, P., Weiguny, A. and Flugge, S. (1967) ; J. Molec. Spectrosc. 23 p. 243.