量子物理学特論

第7回

１次元の量子系（復習）

シュレディンガー方程式

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

変数分離して，固有値方程式に注目 $\psi(x,t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}\phi(x)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + V(x)\phi(x) = E\phi(x)$$

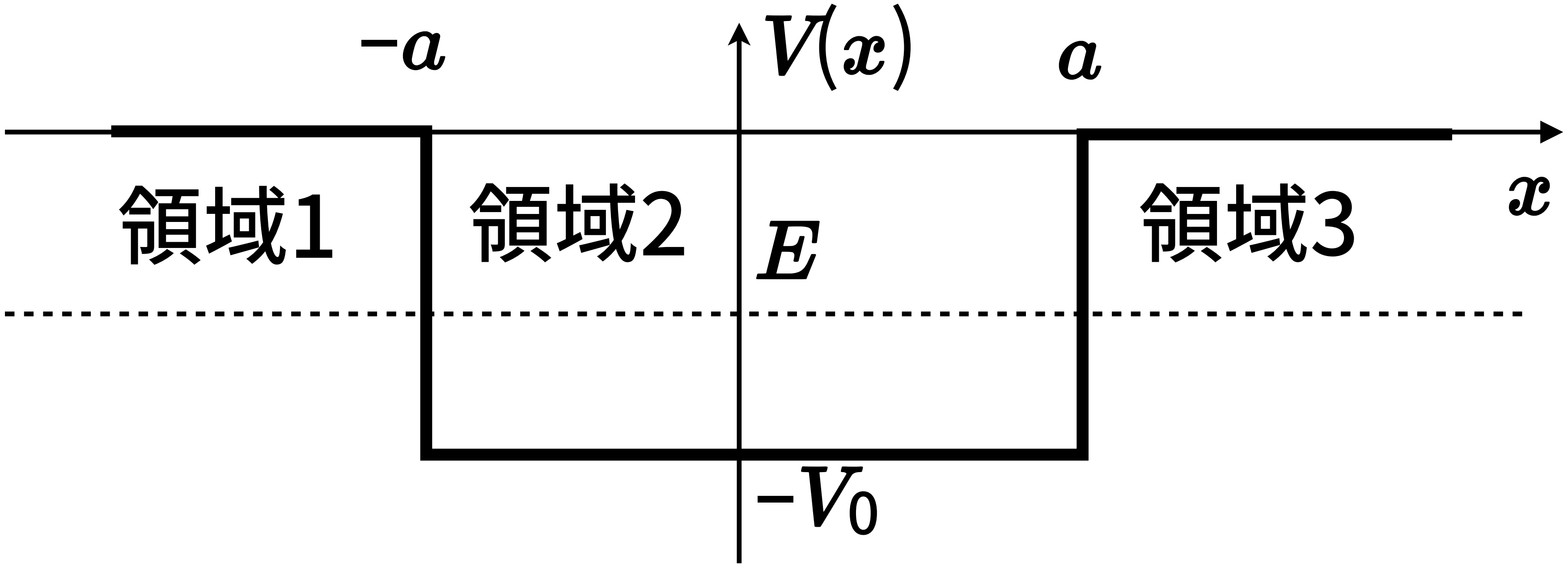
定数ポテンシャルの場合

$E > V_0$ の場合 $E - V_0 = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$ として $\phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

$E < V_0$ の場合 $V_0 - E = \dfrac{\hbar^2 \rho^2}{2m}$ として $\phi(x) = Ce^{\rho x} + De^{-\rho x}$

束縛状態

井戸型ポテンシャルによる束縛を考える。 $0 > E > -V_0$



$x \to \pm\infty$ で波動関数が0に収束することから，

領域1： $\phi_1 = Ae^{\rho x}$

領域2： $\phi_2 = B'e^{ikx} + C'e^{-ikx} = B\sin kx + C\cos kx$

領域3： $\phi_3 = De^{-\rho x}$ $\rho = \sqrt{\dfrac{-2mE}{\hbar^2}}$ $k = \sqrt{\dfrac{2m(V_0 + E)}{\hbar^2}}$

境界でなめらかにつなぐ

$x = -a$ $$Ae^{-\rho a} = -B\sin ka + C\cos ka$$

$$A\rho e^{-\rho a} = Bk\cos ka + Ck\sin ka$$

$x = a$ $$De^{-\rho a} = B\sin ka + C\cos ka$$

$$-\rho De^{-\rho a} = Bk\cos ka - Ck\sin ka$$

これらより，

$$\rho = k\frac{B\cos ka + C\sin ka}{-B\sin ka + C\cos ka} = k\frac{-B\cos ka + C\sin ka}{B\sin ka + C\cos ka}$$

ゆえに $BC = 0$

$\phi_2 = B\sin kx$ または $\phi_2 = C\cos kx$

のどちらかである。

エネルギー固有値

(i) $\phi_2 = C\cos kx$ のとき　$\rho = k\tan ka$

(ii) $\phi_2 = B\sin kx$ のとき　$\rho = -k\cot ka$

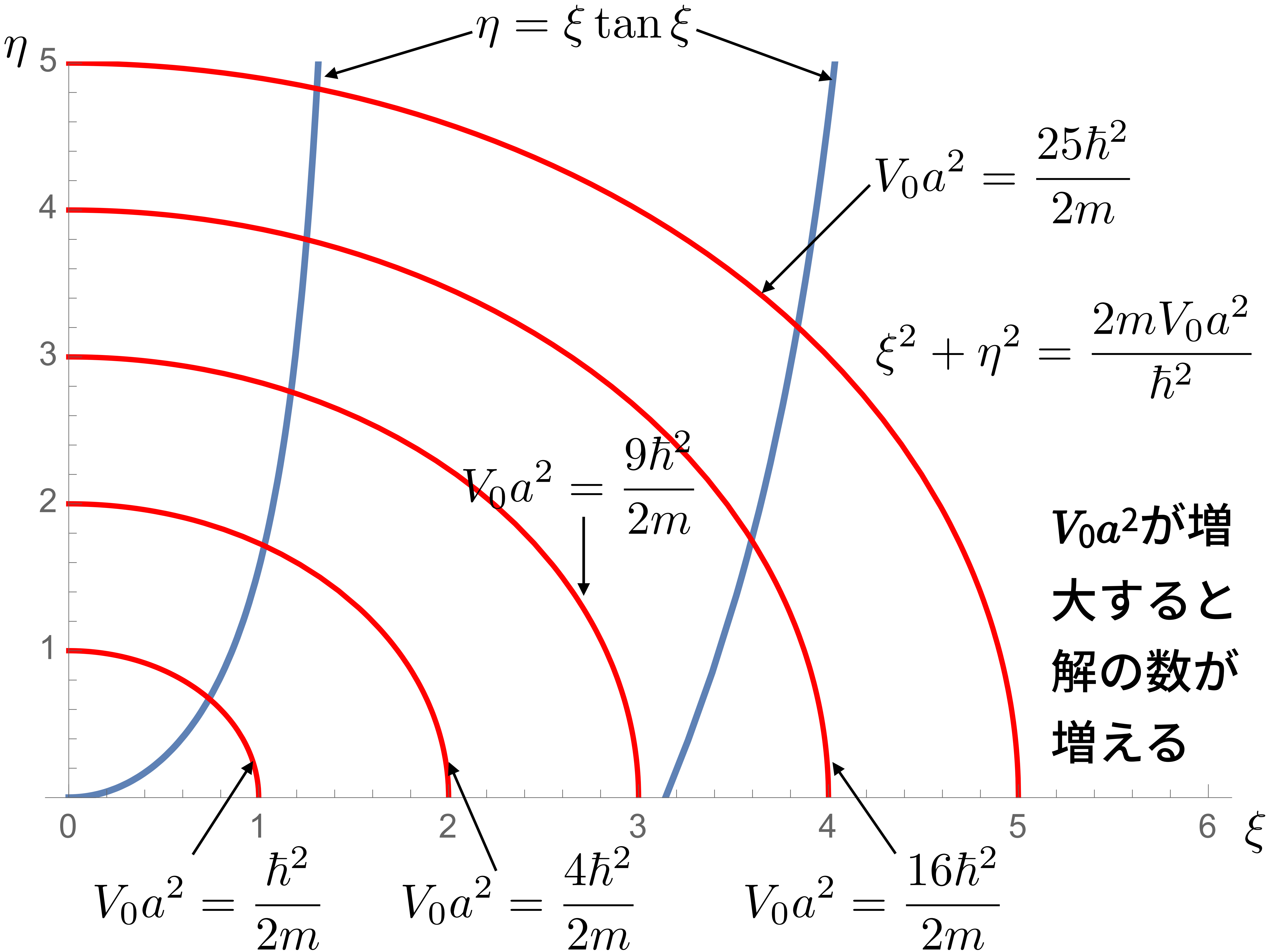
(i)の場合 $ka = \xi$　$\rho a = \eta$ とすると，$\eta = \xi\tan\xi$

$$\rho = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}} \quad k = \sqrt{\frac{2m(V_0+E)}{\hbar^2}} \longrightarrow \xi^2 + \eta^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}$$

$$\eta = \xi\tan\xi$$

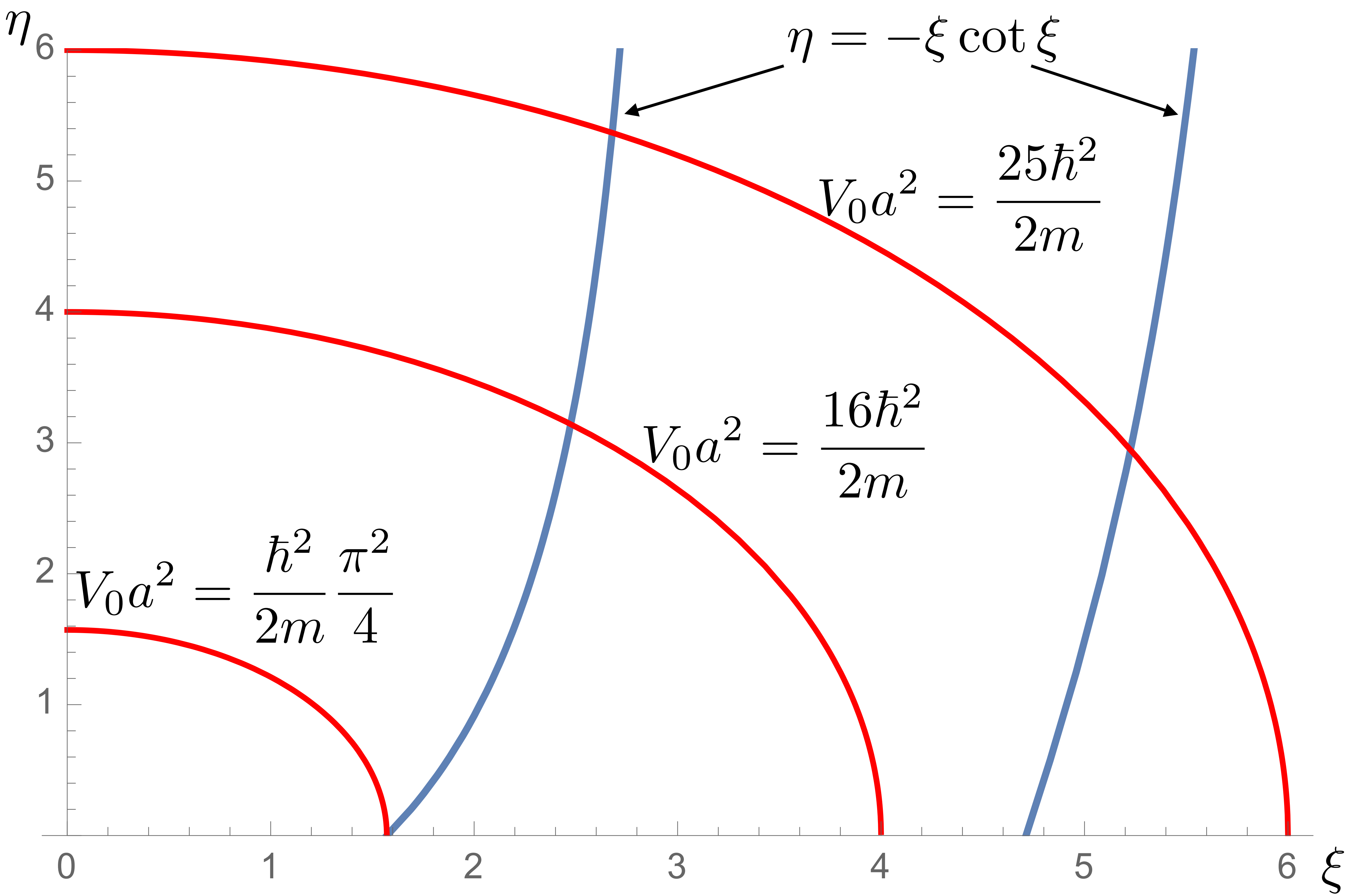
$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}$$

の両方を満たす必要がある！



$\eta = \xi \tan \xi$
$V_0 a^2 = \frac{25\hbar^2}{2m}$
$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}$
$V_0 a^2 = \frac{9\hbar^2}{2m}$
$V_0 a^2$が増大すると解の数が増える
$V_0 a^2 = \frac{\hbar^2}{2m}$
$V_0 a^2 = \frac{4\hbar^2}{2m}$
$V_0 a^2 = \frac{16\hbar^2}{2m}$
η
ξ
0
1
2
3
4
5
6

(ii)の場合 $\eta = -\xi \cot \xi$



パリティ

先ほど見たように，V(x)=V(-x)の場合には，束縛状態の波動関数はxをx→−xとしたときに

- xの偶関数　$\phi(-x) = \phi(x)$　パリティが偶
- xの奇関数　$\phi(-x) = -\phi(x)$　パリティが奇

のどちらかになる。

解が決まったパリティを持つときは，エネルギー準位の決定が簡単になる。
解が奇関数ならば，$\phi(0)=0$，偶関数であれば，$\phi'(0)=0$ として解を求めれば良い。

井戸型ポテンシャルの例

偶関数の解を求める。

$$0 < x < a \qquad \phi_2(x) = C\cos kx \longleftarrow \frac{d\phi_2(0)}{dx} = 0$$

$$x \geq a \qquad \phi_3(x) = De^{-\rho x}$$

$x = a$ における連続性から，

$$De^{-\rho a} = C\cos ka$$
$$-D\rho e^{-\rho a} = -Ck\sin ka$$

よって， $\rho = k\tan ka$

同様に，奇関数の場合には $\rho = -k\cot ka$

が簡単にもとまる。

例題

幅2a，深さが$-V_0$の井戸型ポテンシャルを考える。

2aV_0=αを一定に保ちながら，a→0，V_0→∞の極限を考える。

$2aV_0 = \alpha$ とすると，$\xi^2 + \eta^2 = \dfrac{2mV_0a^2}{\hbar^2} = \dfrac{m\alpha a}{\hbar^2} \to 0$

$\xi = ka \to 0$ であるから，$\eta = \xi \tan \xi \simeq \xi^2$

$\eta + \eta^2 = \dfrac{m\alpha a}{\hbar^2}$ ηも小さいので二次の項を無視すると，

$\rho a = \eta = \dfrac{m\alpha a}{\hbar^2}$ $\sqrt{-\dfrac{2mE}{\hbar^2}} = \dfrac{m\alpha}{\hbar^2}$

よって，$E = -\dfrac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$

例題

$V(x) = -2aV_0\delta(x) = -\alpha\delta(x)$を考える。

デルタ関数ポテンシャルの場合は，波動関数の微分は不連続であり，

$$\left(\frac{d\phi(x)}{dx}\right)_{x=\epsilon} - \left(\frac{d\phi(x)}{dx}\right)_{x=-\epsilon} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\phi(0)$$

$$x < 0 \qquad \phi(x) = Ae^{\rho x}$$

$$x > 0 \qquad \phi(x) = Ae^{-\rho x}$$

より $-2\rho = -\dfrac{2m\alpha}{\hbar^2}$

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$$

先ほどの結果と一致！

[復習]デルタ関数ポテンシャルの場合

$V(x) = V_0\delta(x - x_1)$ の場合

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0\delta(x - x_1))\phi(x) = 0$$

$x_1 - \delta < x < x_1 + \delta$ で積分して，

$$\frac{d\phi(x_1 + \delta)}{dx} - \frac{d\phi(x_1 - \delta)}{dx} = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{x_1-\delta}^{x_1+\delta}(V_0\delta(x - x_1) - E)\phi(x)dx$$

$\delta \to 0$ では，

$$\frac{d\phi(x_1+)}{dx} - \frac{d\phi(x_1-)}{dx} = \frac{2m}{\hbar^2}V_0\phi(x_1)$$

この場合，波動関数の１階微分は不連続だが，波動関数は連続

周期的ポテンシャル

- 金属のように，結晶構造を持つ物質中のイオンが作るポテンシャルを考える。
- 金属中の自由電子の運動をあつかう際に，このようなポテンシャルを考える必要がでてくる。
- V(x)=V(x+d)のような周期的ポテンシャルを考える

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) \qquad V(x) = V(x+d)$$

平行移動の演算子

周期的ポテンシャルによるハミルトニアンの固有関数を探す

このために，平行移動の演算子を考える。

$$\hat{U} = \exp\left(i\frac{\hat{p}}{\hbar}d\right)$$

$\hat{p} = \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial x}$　であるから，

$$\hat{U} = \exp\left(d\frac{\partial}{\partial x}\right) = 1 + d\frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2!}d^2\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \cdots$$

$$\hat{U}\phi(x) = \phi(x) + d\frac{\partial\phi(x)}{\partial x} + \frac{1}{2!}d^2\frac{\partial^2\phi(x)}{\partial x^2} + \cdots = \phi(x+d)$$

となり，この演算子を波動関数に作用させるとx→x+d

という平行移動に対応することがわかる。

ブロッホの定理

ここで，$\left[\hat{U}, \hat{H}\right] = 0$ であるので，

ハミルトニアンの固有関数は，同時に平行移動演算子の固有関数になっている。

また，$\hat{U}^\dagger \hat{U} = 1$ を満たしており，ユニタリーである。

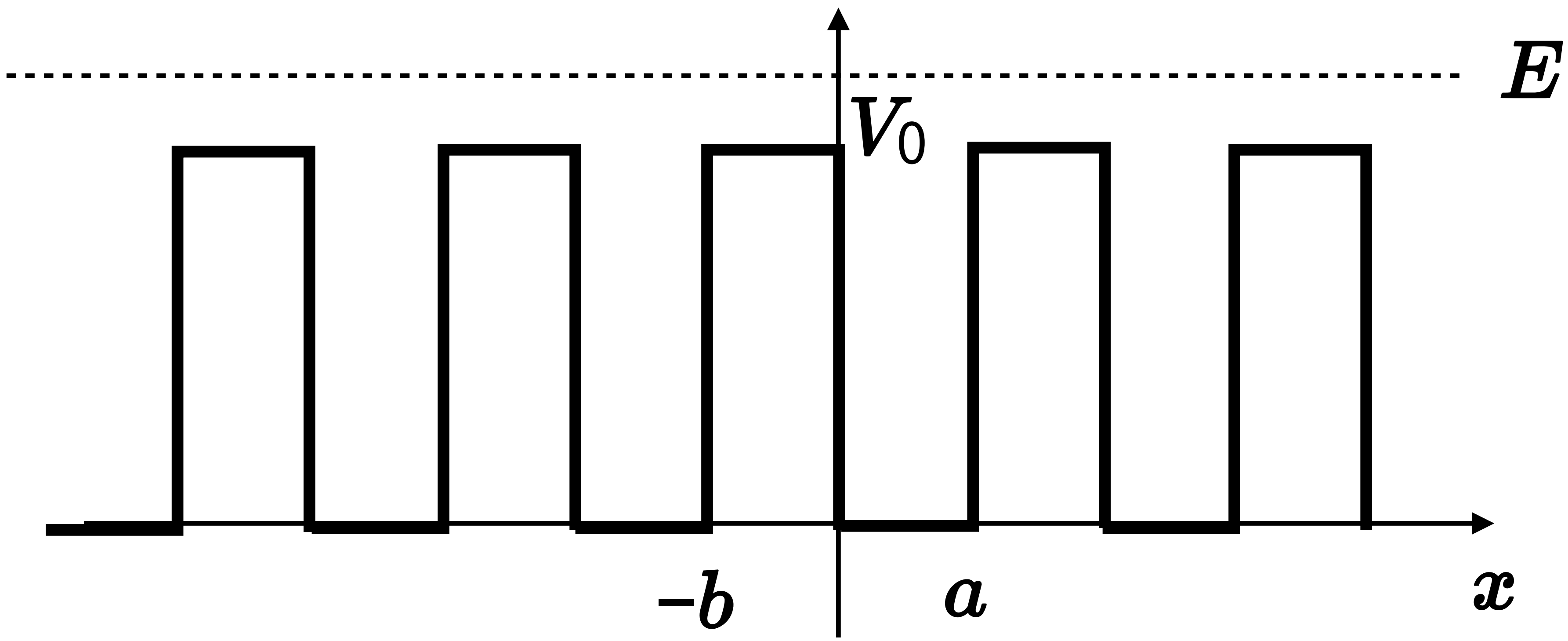
ユニタリー演算子の固有値の絶対値は1になることが知られているので，

$$\hat{U}\phi(x) = e^{i\theta}\phi(x)$$

と書け，したがって，$\phi(x+d) = e^{i\theta}\phi(x)$を得る。

ブロッホの定理

周期的ポテンシャル

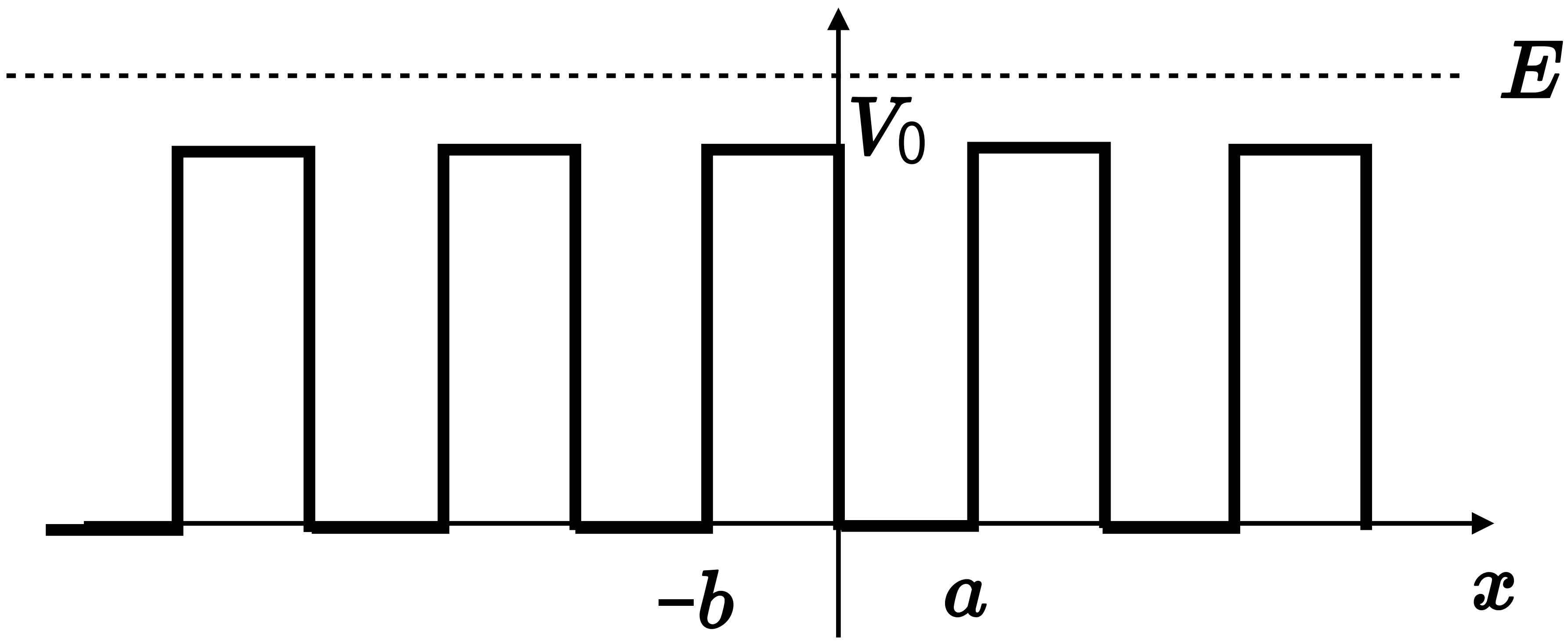


$0 > x > -b$ では　$\phi(x) = Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x}$

$a > x > 0$ では　$\phi(x) = Ce^{ik_2 x} + De^{-ik_2 x}$

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)} \qquad k_2 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

周期的ポテンシャル



$$d = a + b$$

$0 > x > -b$ では $\quad \phi(x) = Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x}$

$a > x > 0$ では $\quad \phi(x) = Ce^{ik_2 x} + De^{-ik_2 x}$

$d > x > a$ では $\quad \phi(x) = e^{i\theta}\left\{Ae^{ik_1(x-d)} + Be^{-ik_1(x-d)}\right\}$

$a + d > x > d$ では $\quad \phi(x) = e^{i\theta}\left\{Ce^{ik_2(x-d)} + De^{-ik_2(x-d)}\right\}$

周期的ポテンシャル

x=0およびx=aでの連続性から

$$A + B = C + D$$

$$k_1(A - B) = k_2(C - D)$$

$$e^{i\theta}\left(Ae^{-ik_1 b} + Be^{ik_1 b}\right) = Ce^{ik_2 a} + De^{-ik_2 a}$$

$$k_1 e^{i\theta}\left(Ae^{-ik_1 b} - Be^{ik_1 b}\right) = k_2\left(Ce^{ik_2 a} - De^{-ik_2 a}\right)$$

ここで，A,B,C,Dが自明な解以外の解をもつためには，

$$\det\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ k_1 & -k_1 & k_2 & -k_2 \\ e^{i\theta}e^{-ik_1 b} & e^{i\theta}e^{ik_1 b} & -e^{ik_2 a} & -e^{-ik_2 a} \\ e^{i\theta}k_1 e^{-ik_1 b} & -e^{i\theta}k_1 e^{ik_1 b} & -k_2 e^{ik_2 a} & k_2 e^{-ik_2 a} \end{pmatrix} = 0$$

周期的ポテンシャル

$$\det\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ k_1 & -k_1 & k_2 & -k_2 \\ e^{i\theta}e^{-ik_1b} & e^{i\theta}e^{ik_1b} & -e^{ik_2a} & -e^{-ik_2a} \\ e^{i\theta}k_1e^{-ik_1b} & -e^{i\theta}k_1e^{ik_1b} & -k_2e^{ik_2a} & k_2e^{-ik_2a} \end{pmatrix} = 0$$

$$-4e^{i\theta}\left(-2k_1k_2(\cos(bk_1)\cos(ak_2)+\cos\theta)+(k_1^2+k_2^2)\sin(bk_1)\sin(ak_2)\right)=0$$

よって

$$\cos\theta = \cos(ak_2)\cos(bk_1) - \frac{k_1^2+k_2^2}{2k_1k_2}\sin(ak_2)\sin(bk_1)$$

$V_0 > E > 0$ の場合も同様の議論により，

$$\cos\theta = \cos(ak_2)\cosh(b\rho) - \frac{k_2^2-\rho^2}{2k_2\rho}\sin(ak_2)\sinh(b\rho)$$

$$\rho = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)}$$

バンド構造

$V_0 > E > 0$ のとき

$$\cos\theta = \cos(ak_2)\cosh(b\rho) - \frac{k_2^2 - \rho^2}{2k_2\rho}\sin(ak_2)\sinh(b\rho)$$

より

$$-1 \le \cos(ak_2)\cosh(b\rho) - \frac{k_2^2 - \rho^2}{2k_2\rho}\sin(ak_2)\sinh(b\rho) \le 1$$

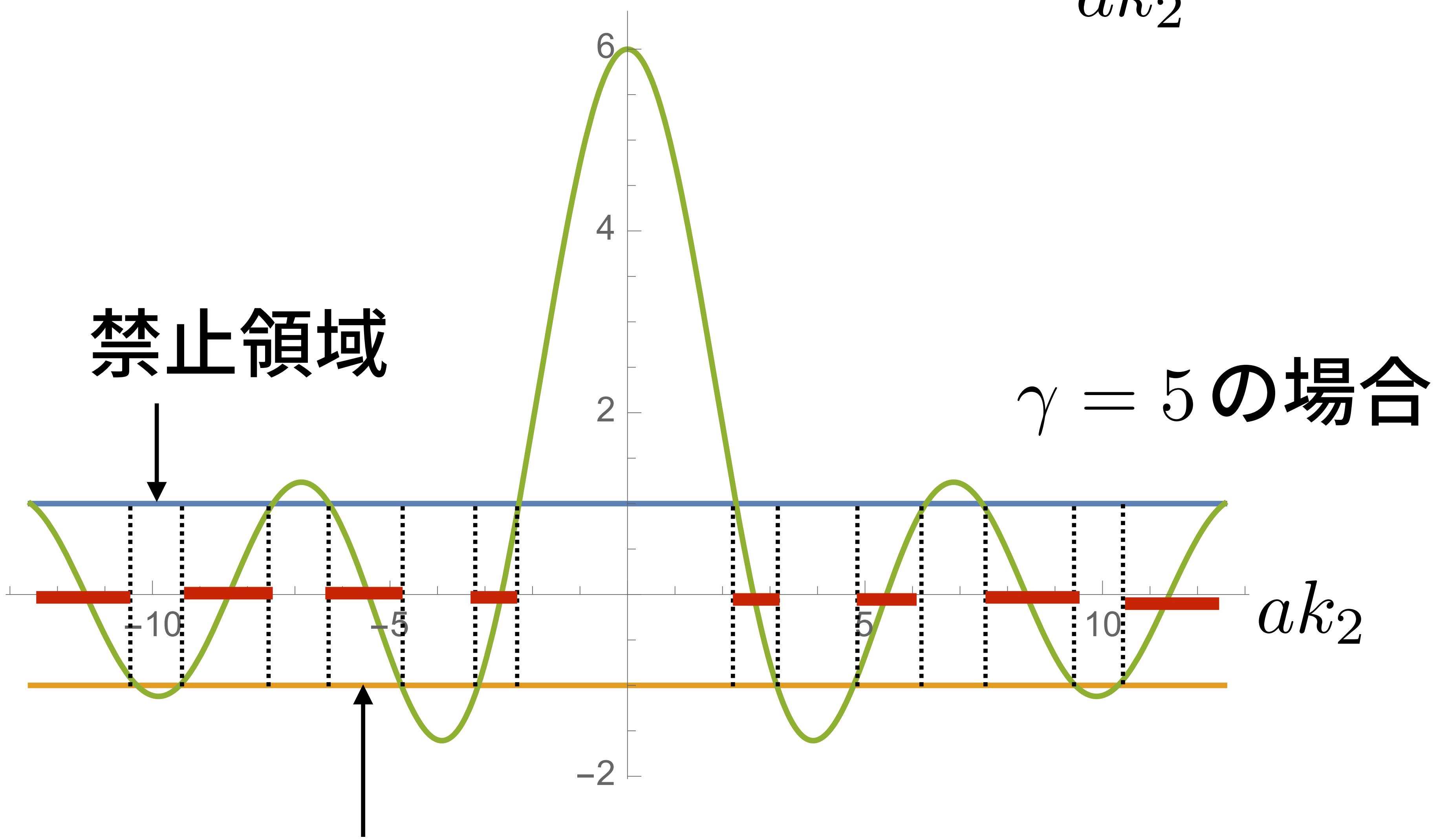
を満たすようなEの範囲だけが許される。
これは，固有エネルギースペクトルのバンド構造を与える。

バンド構造の一般的性質を調べるため，bρ^{2}を一定に保ちながらb→0，V_0→∞の極限をとる。

$\gamma = \lim_{b\to 0, \rho\to\infty} ab\rho^2/2$ とおくと，$-1 \le \cos ak_2 + \gamma\frac{\sin(ak_2)}{ak_2} \le 1$

バンド構造

$$-1 \leq \cos ak_2 + \gamma \frac{\sin(ak_2)}{ak_2} \leq 1$$



この領域ではエネルギーは連続的に変化し得る

$E > V_0$ の場合もバンド構造が得られる。