物性物理学 1 レポート No.1

61908697 佐々木良輔

問 1

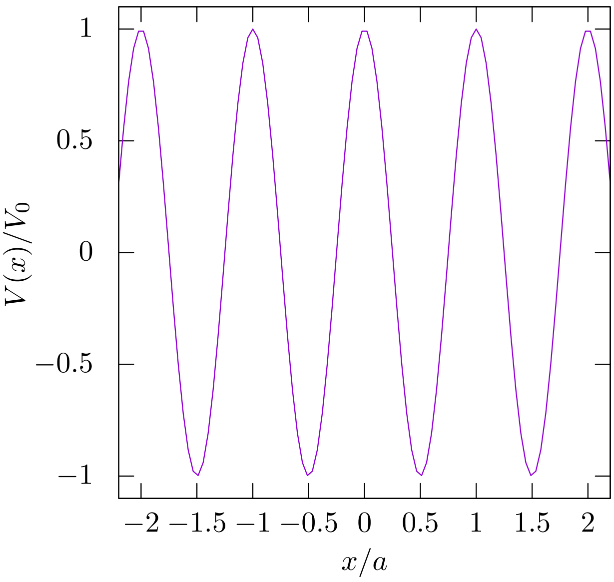

図 1　$V(x)$ のグラフ

問 2

$V_0 = 0$ のとき Schrödinger 方程式に $W_k(x)$ を代入すると

$$
\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}W_k(x) &= EW_k(x) \\
\frac{\hbar^2 k^2}{2m}W_k(x) &= EW_k(x) \\
\therefore\ E &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m}
\end{aligned}
$$

問 3

$V_0 > 0$ のとき $HW_k(x)$ は

$$
\begin{aligned}
&HW_k(x)\\
=&-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}W_k(x)+V_0(\mathrm{e}^{i2\pi x/a}+\mathrm{e}^{-i2\pi x/a})W_k(x)
\end{aligned}
$$

このとき第 1 項は

$$
(\text{第 1 項}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}W_k(x)
$$

また第 2 項は

$$
\begin{aligned}
(\text{第 2 項}) &= V_0(\mathrm{e}^{i2\pi x/a}+\mathrm{e}^{-i2\pi x/a})\frac{1}{\sqrt{L}}\mathrm{e}^{ikx}\\
&= V_0\frac{1}{\sqrt{L}}(\mathrm{e}^{i(k+2\pi/a)x}+\mathrm{e}^{i(k-2\pi/a)x})\\
&= V_0\left(W_{k+h_1}(x)+W_{k+h_{-1}}(x)\right)
\end{aligned}
$$

より $HW_k(x)$ は

$$
HW_k(x) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}W_k(x)+V_0\left(W_{k+h_1}(x)+W_{k+h_{-1}}(x)\right)
$$

となる. したがって Schrödinger 方程式は

$$
\frac{\hbar^2 k^2}{2m}W_k(x)+V_0\left(W_{k+h_1}(x)+W_{k+h_{-1}}(x)\right) = EW_k(x)
$$

となる. $W_k(x)$ と $W_{k+h_1}(x)$, $W_{k+h_{-1}}(x)$ は直行するため, $W_k(x)$ は上の Schrödinger 方程式の固有関数ではない.

問 4

前問と同様に

$$
\begin{aligned}
&HW_{k+h_n}(x)\\
=&-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}W_{k+h_n}(x)+V_0(\mathrm{e}^{i2\pi x/a}+\mathrm{e}^{-i2\pi x/a})W_{k+h_n}(x)\\
=&\frac{\hbar^2(k+h_n)^2}{2m}W_{k+h_n}(x)+V_0\left(W_{k+h_{n+1}}(x)+W_{k+h_{n-1}}(x)\right)
\end{aligned}
$$

問 5

$\psi_k(x)$ を Schrödinger 方程式に代入すると, その左辺は

$$H\psi_k(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_k(x) + V_0(\mathrm{e}^{i2\pi x/a} + \mathrm{e}^{-i2\pi x/a})\psi_k(x)$$

ここで右辺第 1 項は

$$\begin{aligned}(\text{第 1 項}) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\sum_n c_n(k)W_{k+h_n}(x) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\sum_n c_n(k)(k+h_n)^2 W_{k+h_n}(x)\end{aligned}$$

また第 2 項は

$$\begin{aligned}(\text{第 2 項}) &= V_0(\mathrm{e}^{i2\pi x/a} + \mathrm{e}^{-i2\pi x/a})\sum_n c_n(k)W_{k+h_n}(x) \\ &= V_0\sum_n c_n(k)\left(W_{k+h_{n+1}}(x) + W_{k+h_{n-1}}(x)\right)\end{aligned}$$

したがって Schrödinger 方程式は

$$\frac{\hbar^2}{2m}\sum_n c_n(k)(k+h_n)^2 W_{k+h_n}(x) + V_0\sum_n c_n(k)\left(W_{k+h_{n+1}}(x) + W_{k+h_{n-1}}(x)\right) = E\sum_n c_n(k)W_{k+h_n}(x)$$

であり $W_{k+h_n}(x)$ に関する項をまとめると

$$\frac{\hbar^2}{2m}c_n(k)(k+h_n)^2 + V_0\left(c_{n-1}(k) + c_{n+1}(k)\right) = Ec_n(k)$$

問 6

前問の結果を用いると

$$
\begin{pmatrix}
\ddots & & & & & \\
& \ddots & & & \text{\Large 0} & \\
& V_0 & \hbar^2(k+h_{n-1})^2/2m & V_0 & & \\
& & V_0 & \hbar^2(k+h_n)^2/2m & V_0 & \\
& & & V_0 & \hbar^2(k+h_{n+1})^2/2m & V_0 \\
& \text{\Large 0} & & & & \ddots \\
& & & & & & \ddots
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
\vdots \\ c_{n-2}(k) \\ c_{n-1}(k) \\ c_n(k) \\ c_{n+1}(k) \\ c_{n+2}(k) \\ \vdots
\end{pmatrix}
$$

$$
=E\begin{pmatrix}
\vdots \\ c_{n-2}(k) \\ c_{n-1}(k) \\ c_n(k) \\ c_{n+1}(k) \\ c_{n+2}(k) \\ \vdots
\end{pmatrix}
$$

問 7

$k=-\pi/a$ なので

$$\psi_k(x) = W_{-\pi/a}(x) + W_{\pi/a}(x)$$

したがって $H\psi_k(x)$ は

$$
\begin{aligned}
H\psi_k(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_k(x) + V(x)\psi_k(x) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2\psi_k(x) + \frac{V_0}{\sqrt{L}}\left(\mathrm{e}^{i\pi x/a} + \mathrm{e}^{-i\pi x/a} + \mathrm{e}^{i3\pi x/a} + \mathrm{e}^{-i3\pi x/a}\right) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2\psi_k(x) + \frac{2V_0}{\sqrt{L}}\left(\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \cos\left(\frac{3\pi x}{a}\right)\right)
\end{aligned}
$$

問 8

$$
\begin{aligned}
\psi_k(x) &= W_{-\pi/a}(x) + W_{\pi/a}(x) \\
&= \frac{2}{\sqrt{L}}\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)
\end{aligned}
$$

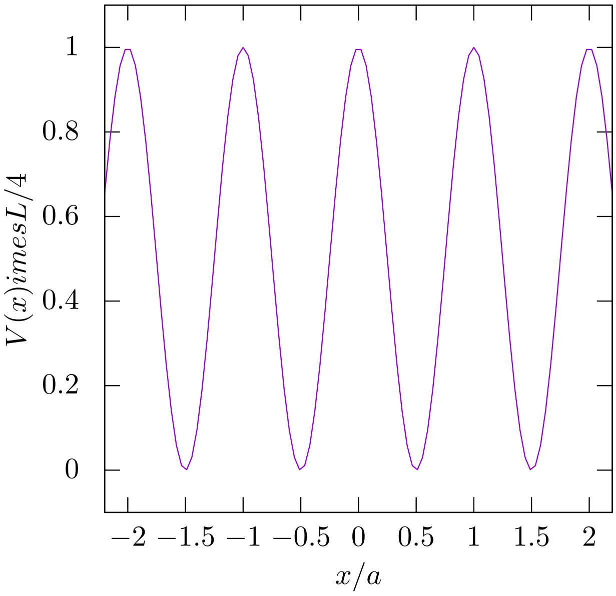

図 2　$|\psi_k(x)|^2$ のグラフ

問 9

前問で得た $H\psi_k(x)$ より $\cos(3\pi x/a)$ の成分が十分小さければ $\psi_k(x)$ は固有関数となりうる．そのためには V_0 が小さいか L が十分大きければ良いと考えられる．