

一次元束縛状態の性質

大上由人

2024 年 4 月 1 日

1 一次元束縛状態には縮退が存在しない

一次元束縛状態には縮退が存在しないことを示す。

同じ固有値に属する、線形独立な二つの固有関数 $\psi_1(x)$ と $\psi_2(x)$ が存在するとする。

このとき、ロンスキー行列式は

$$W(x) = \begin{vmatrix} \psi_1(x) & \psi_2(x) \\ \psi_1'(x) & \psi_2'(x) \end{vmatrix} \quad (1)$$

である。

このとき、この一回微分を計算すると、

$$W'(x) = \psi_1(x)\psi_2''(x) - \psi_1''(x)\psi_2(x) \quad (2)$$

$$= \psi_1(x)\frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)\psi_2(x) - \frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)\psi_1(x)\psi_2(x) \quad (3)$$

$$= 0 \quad (4)$$

となる。ただし、ここで固有関数が縮退していることを用いていることに注意せよ。

したがって、 $W(x)$ は一定である。

また、 $W(x)$ は束縛条件を満たすため、 $W(x) = 0$ である。

ゆえに、

$$\psi_1(x)\psi_2'(x) = \psi_1'(x)\psi_2(x) \quad (5)$$

となる。

この両辺を積分すると、

$$\int \frac{\psi_1'(x)}{\psi_1(x)} dx = \int \frac{\psi_2'(x)}{\psi_2(x)} dx \quad (6)$$

となる。

したがって、

$$\log |\psi_1(x)| = \log |\psi_2(x)| + C \quad (7)$$

となる。

したがって、

$$\psi_1(x) = \pm e^C \psi_2(x) \tag{8}$$

となり、 $\psi_1(x)$ と $\psi_2(x)$ は比例関係にあることがわかる。

したがって、 $\psi_1(x)$ と $\psi_2(x)$ は線形独立であることに矛盾する。

したがって、一次元束縛状態には縮退が存在しないことが示された。

3 章

共有結合結晶や、その sp^3 混成軌道、また、強束縛近似によるハミルトニアンの特角化、バンド図が主な話題となる。

sp^3 混成軌道

sp^3 混成軌道について話せそうなこと挙げると、まず結晶の配置から p 軌道の向きを考え、波動関数の重ね合わせを考える。

波動関数の重ね合わせから sp^3 のエネルギーの概略を説明することになる。

強束縛近似

強束縛近似の概要をまず述べる (一次元鎖について考えればよさそう)。すなわち、ハミルトニアンのうち、どの項を捨て、どの項を用いるかを説明する。

その後、特角化によりバンドが得られることを確認する。

ダイヤモンドのほうを特角化するのはダイジェストでいいと思う。

4 章

自由電子近似による金属結合の仕組みや、パウリ排除律の効き方について話す。

自由電子近似

自由電子近似の妥当性をまず話してから、近似の概要を喋る。

相関係数周りの話

話せたら話したいなあ