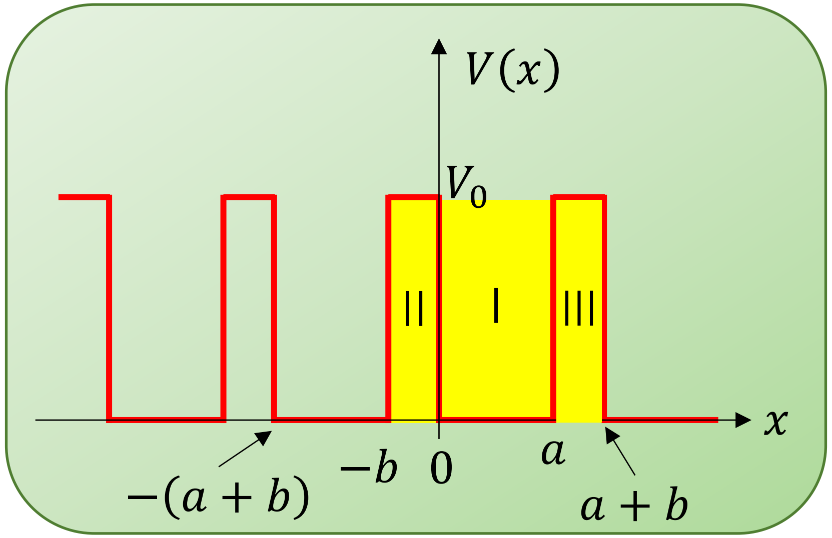
電子物性2　第6回目

3-2　クローニッヒ・ペニー模型



井戸型周期ポテンシャル

１次元のシュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = \mathrm{E}\psi(x) \qquad (3.16)$$

I.　$0 \le x < a \ (V = 0)$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{2m\mathrm{E}}{\hbar^2}\psi(x) = 0$$

$$\psi(x) = \mathrm{A}e^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x} \quad \hbar\alpha = \sqrt{2mE} \qquad (3.17)$$

II.　$-b \le x < 0 \ (V_0 > E$とする$)$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) - \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\psi(x) = 0$$

$$\psi(x) = \mathrm{C}e^{\beta x} + De^{-\beta x} \quad \hbar\beta = \sqrt{2m(V_0 - E)} \qquad (3.18)$$

III.　$a \le x < a + b \ (V_0 > E$とする$)$

$$\psi(x) = C'e^{\beta[x-(a+b)]} + D'e^{-\beta[x-(a+b)]} \qquad (3.19)$$

周期ポテンシャル　→　波動関数はブロッホ波で表される。

周期lの場合隣り合うポテンシャル場で $\psi(x+l)=\exp(ikl)\psi(x)$ を満たすので、

これを周期$a+b$に当てはめると、

$$\psi\{x+(a+b)\}=\exp\{ik(a+b)\}\psi(x)$$

より、(3.18)と(3.19)は位相$\exp\{ik(a+b)\}$だけ異なる。

II.　$-b\le x<0$ ($V_0>E$とする)

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)-\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}\psi(x)=0$$

(3.18)　$\psi(x)=Ce^{\beta x}+De^{-\beta x}$　$\hbar\beta=\sqrt{2m(V_0-E)}$

III.　$a\le x<a+b$ ($V_0>E$とする)

$\psi(x)=C'e^{\beta[x-(a+b)]}+D'e^{-\beta[x-(a+b)]}$　(3.19)

(3.19)のxに$x+(a+b)$を入れてみると、

$$\psi\{x+(a+b)\}=C'e^{\beta x}+D'e^{-\beta x}=\exp\{ik(a+b)\}\left(Ce^{\beta x}+De^{-\beta x}\right)$$

$$C'=C\exp\{ik(a+b)\},\ D'=D\exp\{ik(a+b)\}$$

また、$x=0$および$x=a$で(3.17)~(3.19)は滑らかに接続（関数とその1階微分が連続）
$x=0$で(3.17)と(3.18)より、

$$\mathrm{A}+\mathrm{B}=\mathrm{C}+\mathrm{D}$$

$$i\alpha(\mathrm{A}+B)=\beta(C-D)$$

$x=a$において、

$$\mathrm{A}e^{i\alpha a}+\mathrm{B}e^{-i\alpha a}=\left(Ce^{-\beta b}+De^{+\beta b}\right)e^{+ik(a+b)}$$

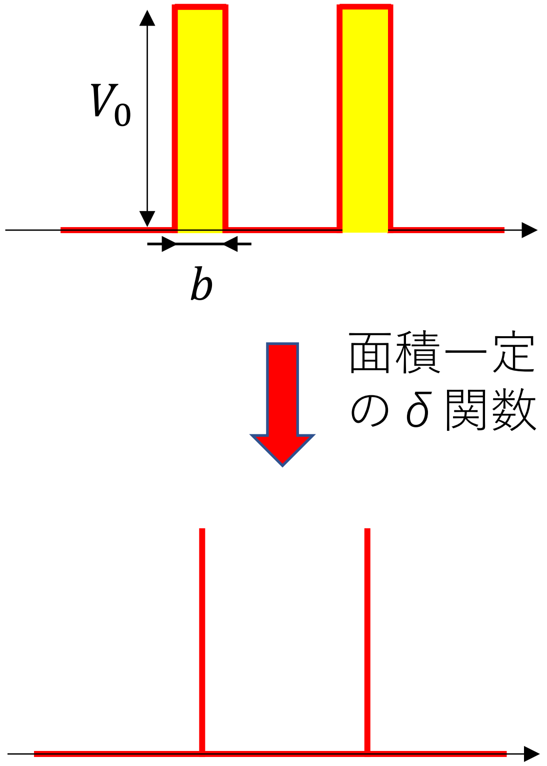
$$i\alpha\left(\mathrm{A}e^{i\alpha a}-Be^{-i\alpha a}\right)=\beta\left(Ce^{-\beta b}-De^{\beta b}\right)e^{+ik(a+b)}$$

これらの式が物理的に意味を持つには、係数の行列式=0でなければならない。

$$\frac{\beta^2-\alpha^2}{2\alpha\beta}\sinh\beta b\sin\alpha a+\cosh\beta b\cos\alpha a=\cos k(a+b) \qquad (3.20)$$

エネルギーEを決定する式

(3.20)式は取り扱いにくいので近似を行う。



$V_0 b$を有限に保ち$b \to 0$および$V_0 \to \infty$にする。
（ポテンシャルを周期的なδ関数）

$$\beta b = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} b \propto \sqrt{V_0} b \to 0$$

となるから、

$$\sinh\beta b = \frac{e^{\beta b} - e^{-\beta b}}{2} = \frac{1}{2}\left\{\left(1 + \frac{\beta b}{1!} + \frac{(\beta b)^2}{2!} + \cdots\right) - \left(1 - \frac{\beta b}{1!} + \frac{(\beta b)^2}{2!} - \cdots\right)\right\}$$

$$= \frac{\beta b}{1!} + \frac{(\beta b)^3}{3!} + \cdots \approx \beta b \ (b \to 0)$$

$$\cosh\beta b = \frac{e^{\beta b} + e^{-\beta b}}{2} = \frac{1}{2}\left\{\left(1 + \frac{\beta b}{1!} + \frac{(\beta b)^2}{2!} + \cdots\right) + \left(1 + \frac{\beta b}{1!} + \frac{(\beta b)^2}{2!} + \cdots\right)\right\}$$

$$= \frac{1}{2}\left(2 + 2\frac{(\beta b)^2}{2!} + 2\frac{(\beta b)^4}{4!} + \cdots\right) \approx 1(b \to 0)$$

今、$V_0 > E$かつ$V_0 \to \infty$を考えているので$\beta \gg \alpha$だから $\frac{\beta^2-\alpha^2}{2\alpha\beta}\sinh\beta b \sin\alpha a + \cosh\beta b \cos\alpha a = \cos k(a+b)$は

$\hbar\alpha = \sqrt{2mE}$　　$\hbar\beta = \sqrt{2m(V_0 - E)}$

$\frac{\beta^2-\alpha^2}{\beta}\sinh\beta b \cong \beta \times (\beta b) = \beta^2 b = \frac{2mV_0 b}{\hbar^2} =$一定　となるから

$b \to 0$かつ$\beta \to \infty$のもとで、

$$\frac{mV_0 ba}{\hbar^2} = P$$

とおくと、

$$P\frac{\sin\alpha a}{\alpha a} + \cos\alpha a = \cos ka \qquad (3.21)$$

となる。

$\alpha = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$なので、(3.21)は$E$と$k$の関係式。

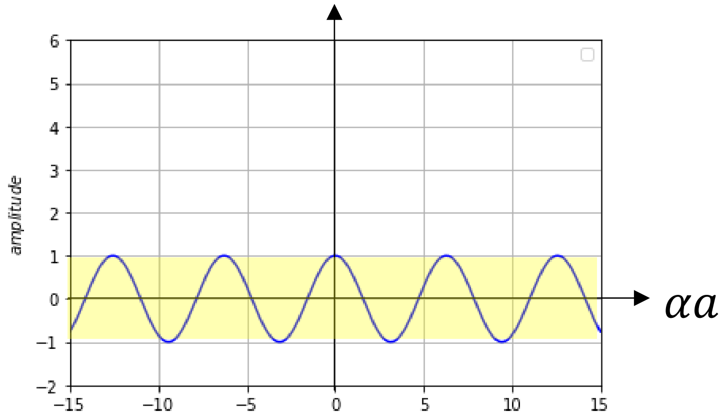
この式を満たすエネルギーEのみが許される。

(3.21)は解析的に解けないのでグラフを利用する。

$$P\frac{\sin\alpha a}{\alpha a}+\cos\alpha a=\cos ka \qquad P=\frac{mV_0 ba}{\hbar^2} \qquad (3.21)$$

不連続な$\alpha=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$の値しかとることができない

◎$P=0(\Leftrightarrow V_0=0)$の時

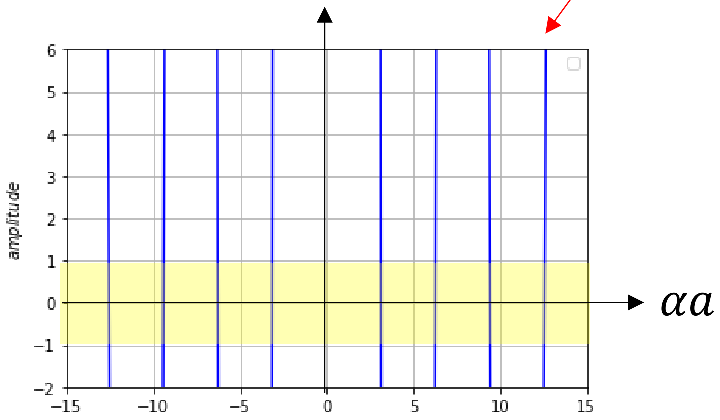


(3.21)は、$\cos\alpha a=\cos ka$

$$k=\alpha=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\Rightarrow E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$$

自由粒子の場合、kに制限なし
エネルギーEは正のすべての値をとる。

◎$P=\infty$の時



(3.21)は、$P\frac{\sin\alpha a}{\alpha a}$が有限の値をとるためには

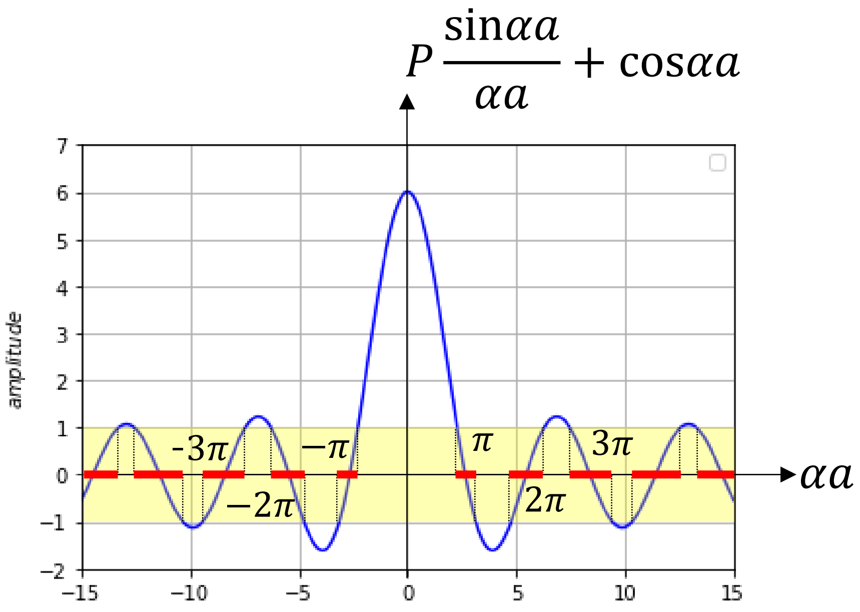
$$\sin\alpha a=0\Leftrightarrow\alpha a=n\pi\ (n=\pm1,\pm2,\cdots)$$

$$E=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2\ (n=\pm1,\pm2,\cdots)$$

幅がaで無限に深い井戸型ポテンシャルの解と同じ。
エネルギーEは離散的

$$P\frac{\sin\alpha a}{\alpha a}+\cos\alpha a=\cos ka \qquad (3.21)$$

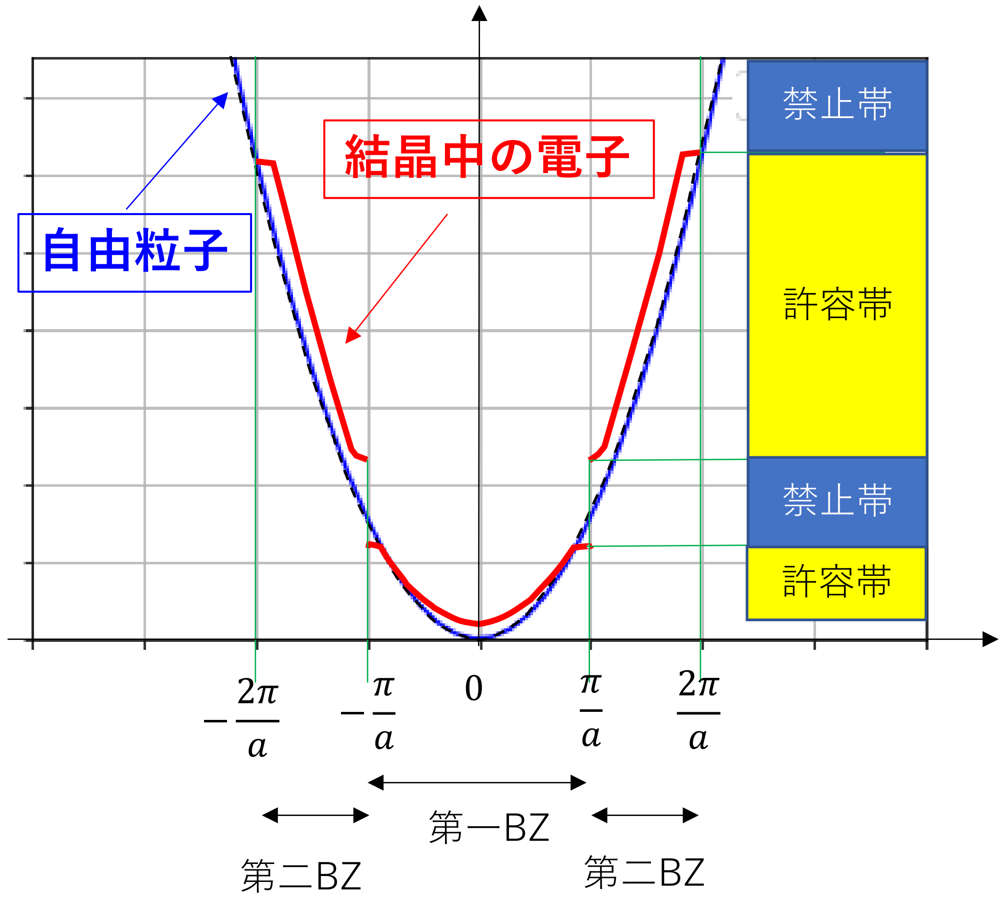
◎Pが中間の値をとる時



(3.21)の右辺は+1と −1の間の
値しか取れない。

$$\cos ka=\pm 1 \Leftrightarrow k=\frac{n\pi}{a}(n=\pm 1,\pm 2,\cdots)$$

で不連続



Pが大きくなるにつれて許容帯の幅は狭くなる。