周期ポテンシャルにおける波束の時間発展

前田大輝

August 19, 2017

概要

研究目的

波束

Kronig-Penny モデル

数值計算

Euler 法

数値計算法決定における指標

Fourie 変換法 有限要素法

Runge-Kutta 法

線形多段法

2つの方法の比較

先行研究

Bloch の定理

Kronig-Penny モデルの定常解 Hunagel と Zhang の Heyperdiffusion

概要

- ▶ 周期ポテンシャル:周期構造をモデル化
- ▶ Kronig-Penny モデル:エネルギーバンド構造
- ▶ 波東:局在化した波
- ▶ 本研究:(半)周期ポテンシャルにおける波束がどのように緩和していくのか
- ▶ 方法:コンピュータで数値計算

物質中の電子:エネルギーバンド構造 定常状態での解析はなされている but 時間依存の詳細についてはまだ未解明 バンドができる時間を知りたい

波束

波束の時間発展

波束とは

- ▶ 局在化した波動
- ▶ 古典的な質点に対応
- ▶ ex) 電子パルス

古典近似成立条件

$$\frac{\delta x}{d} \ll 1$$
 (2.1)

古典近似は時間とともに成立しなくなる

古典近似

自由量子波束

→ 時間依存した現象

Schrödinger 方程式における静止自由波束は時間とともに緩和

→ Eq. (2.1) が成立しなくなる

目安

$$\sigma(t) = \sigma_0 + \alpha t \tag{2.2}$$

古典近似

Eq. (2.1)の陽に時間依存した形

$$\frac{\sigma_0 + \alpha t}{d} \ll 1 \tag{2.3}$$

成立時間

$$\delta t_{lim} \sim \frac{d}{\alpha}$$
 (2.4)

but

Eq. (2.4) は前提として力が加わっていない状態 物質中のポテンシャルについても目安を知りたい

波束についてのまとめ

- ▶ 波束は古典近似で質点に対応する
- ▶ 波束は時間発展とともに緩和する
- ▶ 物質中での緩和速度についてはよくわかっていない

Kronig-Penny モデル

Blochの定理

結晶

エネルギー固有状態に飛躍がある

- →エネルギーバンド構造
- →結晶の並進対称性

Blochの定理

結晶原子が周期的 → ポテンシャルが周期的

一般的な形式 Eq. (2.5)

$$\phi(x) = u(x)e^{-kx} \tag{2.5}$$

Kronig-Penny モデル

Kronig-Penny ポテンシャル

Eq. (2.6)のように表されるポテンシャルではエネルギーバンド構造が形成

$$V_{KP}(x) = \begin{cases} V_0 & (0 \le x \le a) \\ 0 & (a \le x \le d) \\ V_{KP}(x-d) & (otherwise) \end{cases} \tag{2.6}$$

箱型ポテンシャルが周期的に並んだ構造
→ 周期ポテンシャルの中でも最も単純

簡単な構造

but

エネルギーバンド構造を説明できる

非定常状態の Kronig-Penny モデル

Kronig-Penny モデルでは・・・・・

定常状態は古くから知られている but 非定常状態はよくわからない because 非定常状態では Bloch の定理が成立 しない

Hunagel、Zhang の量子拡散についての研究

波束が"強く"緩和

→ Heyperdiffusion

but

真空中から物質中に入射する波束については未知

課題

結晶に入ると瞬時にエネルギーバンド状態になる近似

but

波東:非定常

エネルギーバンド:定常

一瞬では移り変われない

morever

エネルギーバンドを作る過程が観測にかかる可能性

エネルギーバンド構造が作られる時間を知りたい

最も簡単な周期ポテンシャル→ Kronig-Penny モデルを使う

- ▶ 物質中の電子は定常状態でエネルギーバンド構造を作る
- ▶ Kronig-Penny モデルはエネルギーバンド構造を説明できる
- ▶ 真空から Kronig-Penny ポテンシャルに入射する波束の緩和についてはよくわかっていない

Euler 法

このセクションの目的

学部生に数値的に解くことの雰囲気を知ってもらうこと!! 数値計算の力強さの源 形式的な話 \rightarrow どんな方程式にも対応できる "どんな難しい方程式も解くことができる"大雑把に何をやっているのかを知ってほしい。

一階の常微分方程式の一般形

$$\frac{dy}{dt} = f(y,t) \tag{3.7}$$

$$y(t_0) = y_0 \tag{3.8}$$

ここで yo は初期条件として与えられる既知の値

何が大変?

Eq. (3.7) の右辺を積分 → 積分定数として Eq. (3.8)

→ 方程式の解が得られる but

計算機で数値的に解く際にこの方法は使うことができない

→ 計算機は有限回の加減乗除しかできない

解析的手段が使えない → 解析解を得る手段がない解析解を得ることは諦める任意の精度で真の値に近い値を得ることができれば OK無限回の計算を有限回で打ち切るつまり近似!!!

近似方法 \rightarrow たくさんある この節の目的達成に最も適した方法 \rightarrow Euler 法 あまり実用的ではない

but

数値計算の難しさや、力強さを掴んでもらうためには十分

理由

最も基礎的な計算方法だから Euler 法の発展 →Runge-Kutta 法 (最もメジャー) y(t) を $t = t_0$ の周りで Taylor 展開 (プリントは誤字)

$$y(t) = y(t_0) + \frac{dy}{dt} \Big|_{t=t_0} (t - t_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 y}{dt^2} \right|_{t=t_0} (t - t_0)^2 + \dots$$
 (3.9)

生き残る項

一次の項:Eq. (3.7)

ゼロ次の項:Eq. (3.8)

二次以降の項は $t=t_0$ の近傍で無視できる

結果

$$y(t_0 + h) \simeq y_0 + f(y_0, 0)h = y_1 \tag{3.10}$$

h はステップ幅 既知の値 y_0 から、未知の値 $y(t_0 + h) = y_1$ を得ることができた

同様に

 $t = t_0 + h = t_1$ の周りで Taylor 展開

一次の項:Eq. (3.7)

ゼロ次の項:Eq. (3.8)

二次以降の項は $t=t_0$ の近傍で無視できる

$$y(t_1 + h) \simeq y_1 + f(y_1, t_1)h = y_2 \tag{3.11}$$

これらの操作を次々に繰り返すことで、 $t=t_n$ における y(t) の値を求めることができる。



微分方程式 Eq. (3.7)、Eq. (3.8)の解

Euler 法

$$y_{n+1} = y_n + f(y_n, t_n)h (3.12)$$

 $f(y_n,t_n)$ の計算を除くと 1 回の掛け算と 1 回の足し算しか使っていない \rightarrow 計算機でも計算できる

問題点

Euler 法 → どんな方程式でも計算機で解ける but

Taylor 展開の高次の項を無視できない 計算誤差が発生する!

有効数字を1桁上げる

→10 倍のステップ数が必要

"理論上は"どんな方程式も任意の精度で解くことができるが それは自分が生きている間とは限らない

◆ロト ◆団 ト ◆ 豆 ト ◆ 豆 ・ 夕 ○ ○

Euler 法についてのまとめ

- ▶ 数値計算は近似的に解を求める
- ▶ どんな方程式も解くことができる
- ▶ 生きている間に計算が終わるとは限らない

数値計算法決定における指標

数値計算の方法 → バラエティ豊か

指標が必要 → 安定性・計算量

数値計算の困難を数値化

安定性:計算誤差

計算量:資源の消費量

コンピュータはミスしない?!

コンピュータは正確に計算するイメージ but 計算誤差

- ▶ 丸め誤差
- ▶ 打ち切り誤差
- ▶ 離散化誤差

丸め誤差

計算機:実数を直接扱えない

→一定の精度で近似

This is 丸め誤差

0.1 (on decimal) =
$$2^{-4} + 2^{-5} + 2^{-8} + 2^{-9} + 2^{-12} + \dots$$
 (on decimal)
= $0.0\ 0011\ 0011\ 0011\ \dots$ (on binary)
= $0.0\ \dot{0}\dot{0}\dot{1}\dot{1}$ (on binary) (3.13)

有限時間で計算を終える → 無限数列を有限の項で打ち切る 打ち切り誤差 例えば、

$$e = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \tag{3.14}$$

but 計算機ではn について無限足せない so 有限項 (例えば 1000 項) で打ち切る

$$e = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!}$$

$$\simeq \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!}$$
(3.15)

計算誤差 → 避けようがない

but

制御することはできる。

常微分方程式の数値解法

ステップ幅を小さくすれば精度は高くなる

but どこまで OK?

そこで・・・安定性

常微分方程式 Eq. (3.16) Eq. (3.17) を数値積分

ightarrow解が必ず真の値に収束する λh

⇔ 絶対安定領域

$$\frac{df}{dx} = \lambda f(x) \tag{3.16}$$

$$f(0) = y_0 (3.17)$$

絶対安定領域の広さ → 安定性

絶対安定領域の広さについて経験則

陰的公式 > 陽的公式

A 安定

どのような $\lambda h < 0$ をとっても解が真の値に収束する A 安定

but

実用的な時間でよい解が得られるとは限らない 収束性や計算の容易さ・・・別の概念で測る

計算量

- ▶ 空間的計算資源:メモリ
- ▶ 時間的計算資源:計算時間

今回は特に計算時間のことを指して「計算量」という言葉を用いる。

計算量は入力情報の量 n に依存

but

必ずしも入力情報量が二倍になると、計算量 $_{ au}$ も二倍になるとは限らない ex)

入力がすべて"1"だとわかっている場合、入力情報を愚直に input(1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1) と記憶するのではなく、

input(1).times(10)

と回数だけ記憶すれば、1000個の入力だろうが、10000個の入力だろうが、 定数のオーダーに圧縮することができる。

そこで、 τ の目安として Landau の記号 Eq. (3.18) を用いる Landau の記号

$$\tau(n) = O(f(n)) \tag{3.18}$$

ex)

$$\cos(x) = 1 + O(x^2) \tag{3.19}$$

具体的な関数はわからなくても、大まかな傾向を見取ることができる

数値計算の指標

- ▶ 絶対安定領域:計算が収束する誤差の範囲
- ▶ 計算量:計算にかかる時間
- ▶ 絶対安定領域と計算量はトレードオフ

Fourie 変換法

Schrődinger 方程式の数値的解法 →FFT 法 or 有限要素法

Fourie 変換法

エネルギー固有状態 $\phi_n(x)$ の重ね合わせ 初期状態 $\psi_0(x) = \psi(x,t)|_{t=0}$ を構成する $\phi_n(x)$ と $\psi_0(x)$ の内積から

$$\int \phi_n^*(x)\psi_0(x) \quad dx = A_n \tag{3.20}$$

Fourie 逆変換

$$\psi(x,t)\Big|_{t=0} = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \phi_n(x)$$
(3.21)

角振動数 $\omega = \varepsilon_n/\hbar$

Fourie 変換法

$$\psi(x,t) = \sum_{n=0}^{N} A_n \phi_n(x) e^{\frac{\varepsilon_n}{i\hbar}t}$$
 (3.22)

good

 ϕ_n がわかってしまえば、O(1) Eq. (3.22) の和を有限項で打ち切る ightarrow 誤差 t が小さい場合にはかなり効率がいい。

bad

Kronig-Penny ポテンシャルの定常状解が解かれば苦労しない 数値的に定常状態を得るだけにする

有限要素法

有限要素法

積分する範囲を有限の区間に分割 分割した区間内での解は適当な可積分関数で近似

- ▶ Runge-Kutta 法
- ▶ 線形多段法

Runge-Kutta 法

Runge-Kutta 法

積分したい点の近傍で線形近似を行い 補正を繰り返しながら何度も計算し直す Euler 法はこのクラス

線形近似

 $y(t)=lpha t^2+eta t+\gamma$ を t_a と t_b で正しくなるよう線形近似傾きを直接計算 Eq. (3.23)

→ 二点の中間点での傾き Eq. (3.24) に等しい。

$$\begin{split} \frac{y(t_b) - y(t_a)}{t_b - t_a} &= \frac{(\alpha t_b^2 + \beta t_b + \gamma) - (\alpha t_a^2 + \beta t_a + \gamma)}{t_b - t_a} \\ &= \alpha (t_b + t_a) + \beta \\ &= 2\alpha \left(\frac{t_a + t_b}{2}\right) + \beta \end{split} \tag{3.23}$$

これが2階2次の陽的 Runge-Kutta 法

2階2次のRunge-Kutta法

$$y_{n+1} = y_n + k_2 h$$
 (3.25)
 $k_2 = f(y_n + k_1 h/2, t_n + h/2)$ (3.26)

$$k_1 = f(y_n + h, t_n + h) (3.27)$$

Runge-Kutta の陰的方法

→ 任意の次数で A 安定の方法が存在する but 実用は難しい

why

陰的方法を解く → 非線形連立方程式を解く

Runge-Kutta の陽的方法

逐次代入によって解くことができる

- →非常に計算が容易
- 以前のステップの情報を使わない
- →ステップ幅を自由に変えられる but 階数をあげても次数はあまり上がらない 絶対安定領域が非常に狭い or 存在しない

線形多段法

線形多段法

補間してべき級数に近似

- ▶ 予測子修正子 Adams 法
- ▶ Adams-Bashforth 法

コンセプト

Euler 法 \to 過去の値 y_n 未来の値 y_{n+1} を予測 so 過去の値 y_n,y_{n-1} から未来の値 y_{n+1} を予測 \to もっとすごい

 y_n, y_{n-1} が既知とすると・・・

$$\begin{split} f(y,t) &\simeq \frac{t-t_{n-1}}{t_n-t_{n-1}} f(y_n,t_n) + \frac{t-t_n}{t_{n-1}-t_n} f(y_{n-1},t_{n-1}) \\ &= \frac{f(y_n,t_n)}{h} (t-t_{n-1}) - \frac{f(y_{n-1},t_{n-1})}{h} (t-t_n) \end{split} \tag{3.28}$$

 $t_n - t_{n-1}$ はステップ幅に等しいので h と置いた。

Eq. (3.28) のように多項式補間する方法 → Ragrange 補間

Ragrange 補間

任意の N点 $(y_0,t_0),(y_1,t_1),\dots,(y_i,t_i),\dots,(y_N,t_N)$ を通る N-1 次多項式は次のように表される。

$$P(t) = \sum_{i=1}^{N} \frac{(t-t_1)(t-t_2)\dots(t-t_{i-1})(t-t_{i+1})\dots(t-t_N)}{(t_i-t_1)(t_i-t_2)\dots(t_i-t_{i-1})(t_i-t_{i+1})\dots(t_i-t_N)} y_i \qquad (3.29)$$

Eq. (3.7)の f(y,t) は一般に可積分ではない

but

Eq. (3.28)は簡単に積分できる。

$$\begin{split} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{dy}{dt} \, dt &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(y,t) \, dt \\ \int_{y_n}^{y_{n+1}} dy &\simeq \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left(\frac{f(y_n,t_n)}{h} (t-t_{n-1}) - \frac{f(y_n,t_n)}{h} (t-t_{n_1}) \right) \, dt \end{split} \tag{3.30}$$

計算の続き

$$\begin{split} y_{n+1} - y_n &= \left[\frac{1}{2}\frac{f(y_n, t_n)}{h}(t - t_{n-1})^2 - \frac{1}{2}\frac{f(y_{n-1}, t_{n-1})}{h}(t - t_n)^2\right]_{t_n}^{t_{n+1}} \\ y_{n+1} - y_n &= \frac{1}{2}\frac{f(y_n, t_n)}{h}(3h^2) - \frac{1}{2}\frac{f(y_{n-1}, t_{n-1})}{h}(h^2) \\ y_{n+1} - y_n &= \frac{3}{2}f(y_n, t_n)h - \frac{1}{2}f(y_{n-1}, t_{n-1})h \\ y_{n+1} &= y_n + \left(\frac{3}{2}f(y_n, t_n) - \frac{1}{2}f(y_{n-1}, t_{n-1})\right)h \end{split} \tag{3.31}$$

→2 段 2 次の Adams-Bashforth 法

Adams-bashfourth 法

同様に補間公式を利用して多項式近似 $N ext{ ll } t_n$ から t_{n+1} の値を計算できる $\rightarrow \mathcal{C}$ れま Adams-bashfourth 法

Adams-Moulton 法

N個の t_n から t_n の値を求める

- \rightarrow Adams-Moulton 法
- →陰的方法

予測子修正子 Adams 法

多段法の場合は陰的公式も重要

why?

Adams-bashfourth 法 (計算が簡単) で仮の解を得る Adams-Moulton 法 (安定域が広い) で解を修正する This is 予測子修正子 Adams 法

2つの方法の比較

絶対安定領域

陽的 Runge-Kutta 法:絶対安定領域が非常に狭い or 存在しない

陰的 Runge-Kutta 法:絶対安定領域が広く、A 安定が多い

線形多段法:必ず絶対安定領域が存在する butA 安定は低次のみ

結論

陰的 Runge-Kutta 法<線形多段法<陽的 Runge-Kutta 法

計算量

陽的 Runge-Kutta 法:O(n)

陰的 Runge-Kutta 法: $O(n^3)$ 以上

線形多段法:O(n)

結論

陽的 Runge-Kutta 法=線形多段法>陰的 Runge-Kutta 法

有限要素法についてのまとめ

- ▶ Runge-Kutta 法:線形近似を何回もやる
- ▶ 線形多段法:多項式近似で陽公式と陰公式を組み合わせる
- ▶ 基本は線形多段法で計算してみる
- ▶ 線形多段法で安定しなかったら陰公式を使う

Bloch の定理

Kronig-Penny モデルの定常解

Kronig-Penny ポテンシャルのパラメータ

今回は Szmulowicz にならって、Eq. (4.32) のようにパラメータをし直す。

$$V_{KP}(x) = \begin{cases} V_{KP} & (-b < x < b) \\ 0 & (b < x < b + 2a) \\ V_{KP}(x - d) & (otherwise) \end{cases}$$
 (4.32)

このとき、ポテンシャルの周期 d は以下の Eq. (4.33) で表される。

$$d = 2a + 2b \tag{4.33}$$

定常解

定常状態の波動関数は平面波の形になるため、エネルギーを E とすると Eq. (4.34)、Eq. (4.35)、Eq. (4.36)、Eq. (4.37)が成立する。

$$\phi(x) = A' e^{ik_A x} + B' e^{-ik_A x} \quad (\sharp \vec{P})$$
 (4.34)

$$\phi(x) = C' e^{ik_B x} + D' e^{-ik_B x} \quad (\cancel{E})$$
(4.35)

$$k_{\rm A} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{4.36}$$

$$k_{\rm B} = \sqrt{\frac{2m(E - V_{KP})}{\hbar^2}}$$
 (4.37)

Eq. (4.37)の中身は実数の場合も虚数の場合もあるが、どちらの場合でも Eq. (4.35)は成立する。

境界条件

 $\phi(x)$ とその一回微分の連続性を考えると、

$$e^{ik_Ab}A' + e^{-ik_Ab}B' - e^{ik_Bb}C' - e^{-ik_Bb}D' = 0$$
 (4.38)

$$k_A e^{ik_A b} A' - k_A e^{-ik_A b} B' - k_B e^{ik_B b} C' + k_B e^{-ik_B b} D' = 0$$
 (4.39)

$$e^{-ik_Ab}A' + e^{ik_Ab}B' - e^{-ik_Bb}C' - e^{ik_Bb}D' = 0$$
(4.40)

$$k_A e^{-ik_A b} A' - k_A e^{ik_A b} B' - k_B e^{-ik_B b} C' + k_B e^{ik_B b} D' = 0$$
 (4.41)



Bloch の定理

Eq. (4.40) と Eq. (4.41) の第一項目と二項目に Bloch の定理

$$\begin{split} \mathrm{e}^{ik_A(d-b)-iKd}A' + \mathrm{e}^{-ik_A(d-b)-iKd}B' - \mathrm{e}^{-ik_Bb}C' - \mathrm{e}^{ik_Bb}D' &= 0 \\ (4.42) \\ k_A \mathrm{e}^{ik_A(d-b)-iKd}A' - k_A \mathrm{e}^{-ik_A(d-b)-iKd}B' - k_B \mathrm{e}^{-ik_Bb}C' + k_B \mathrm{e}^{ik_Bb}D' &= 0 \\ (4.43) \end{split}$$

行列方程式

$$\begin{pmatrix} e^{ik_{A}b} & e^{-ik_{A}b} & -e^{ik_{B}b} & -e^{-ik_{B}b} \\ k_{A}e^{ik_{A}b} & -k_{A}e^{-ik_{A}b} & -k_{B}e^{ik_{B}b} & k_{B}e^{-ik_{B}b} \\ e^{ik_{A}(d-b)-iKd} & e^{-ik_{A}(d-b)-iKd} & -e^{-ik_{B}b} & -e^{ik_{B}b} \\ k_{A}e^{ik_{A}(d-b)-iKd} & -k_{A}e^{-ik_{A}(d-b)-iKd} & -k_{B}e^{-ik_{B}b} & k_{B}e^{ik_{B}b} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A' \\ B' \\ C' \\ D' \end{pmatrix} = 0$$

$$(4.44)$$

行列式

2×2の行列式を展開

$$\begin{aligned} -4k_{A}k_{B} - k_{A}^{2}\mathrm{e}^{-iKd}(\mathrm{e}^{2ik_{A}a} - \mathrm{e}^{-2ik_{A}a})(\mathrm{e}^{2ik_{B}b} - \mathrm{e}^{-2ik_{B}b}) \\ + k_{A}k_{B}\mathrm{e}^{-iKd}(\mathrm{e}^{2ik_{A}a} + \mathrm{e}^{-2ik_{A}a})(\mathrm{e}^{2ik_{B}b} + \mathrm{e}^{-2ik_{B}b}) \\ + k_{A}k_{B}\mathrm{e}^{-iKd}(\mathrm{e}^{2ik_{A}a} + \mathrm{e}^{-2ik_{A}a})(\mathrm{e}^{2ik_{B}b} + \mathrm{e}^{-2ik_{B}b}) \\ - k_{B}^{2}\mathrm{e}^{-iKd}(\mathrm{e}^{2ik_{A}a} - \mathrm{e}^{-2ik_{A}a})(\mathrm{e}^{2ik_{B}b} - \mathrm{e}^{-2ik_{B}b}) \\ - 4k_{A}k_{B}\mathrm{e}^{-2iKd} = 0 \end{aligned} \tag{4.45}$$

整理

$$\begin{split} \frac{\mathrm{e}^{iKd} + \mathrm{e}^{-iKd}}{2} &= \\ &\frac{1}{2} \left(\frac{k_A}{k_B} + \frac{k_B}{k_A} \right) \frac{\mathrm{e}^{2ik_Aa} - \mathrm{e}^{-2ik_Aa}}{2i} \frac{\mathrm{e}^{2ik_Bb} - \mathrm{e}^{-2ik_Bb}}{2i} \\ &+ \frac{\mathrm{e}^{2ik_Aa} + \mathrm{e}^{-2ik_Aa}}{2} \frac{\mathrm{e}^{2ik_Bb} + \mathrm{e}^{-2ik_Bb}}{2} \\ &\cos Kd = &\frac{1}{2} \left(\frac{k_A}{k_B} + \frac{k_B}{k_A} \right) \sin 2k_A a \sin 2k_B b + \cos 2k_A a \cos 2k_B b \end{split} \tag{4.46}$$

Eq. (4.46)・・・ Kronig-Penny 問題の主要な成果

解釈

Eq. (4.46)の右辺 エネルギーエネルギーの関数 and

左辺の値域と一致

→ 系がとりうるエネルギーを判別する式

Brillouin ゾーン

エネルギーバンドをとる波数の領域 Brillouin ゾーン (Brillouin Zone;BZ)

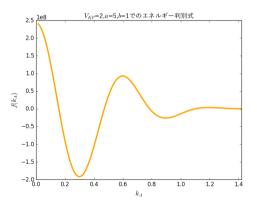
限界

Eq. (4.46)···計算することが難しい

Why?

解析的手段:使えない

数値的手段:非常に大きな値



◆□▶◆圖▶◆臺▶◆臺▶ 臺 めQ@

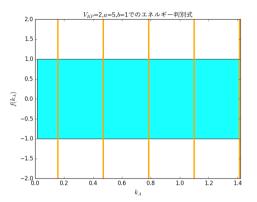


Figure: 拡大した判別式

Bloch の定理と Kronig-Penny モデルについてのまとめ

- ▶ ハミルトニアンに並進対称性を課すと Bloch の定理が成立する
- ▶ Kronig-Penny モデルの定常解はエネルギー状態に制限がある
- ▶ Kronig-Penny モデルの具体的なエネルギーバンド領域を求めることは難しい

Hunagel \succeq Zhang ϖ Heyperdiffusion

ポテンシャルと波束

通常の波束の緩和:Eq. (2.2)

but

周期ポテンシャルでは?

Hunagel

量子が一点から拡散する状況

 \rightarrow tight-binding モデルimespoint-source モデル

分散

 M_{PS} ກັ Eq. (4.49)

$$P(t) = e^{-\Gamma t} \tag{4.47}$$

$$M_{PS}(t) = \int_0^\infty dx \, x^2 \int_0^t dt' (-\dot{P}(t')) \delta(x - v(t - t')) \tag{4.48}$$

$$M_{PS}(t)=v^2\Gamma\int_0^t\,dt'\mathrm{e}^{-\Gamma t}(t-t')^2$$

$$M_{PS}(t)=v^2\left(t^2-\frac{2}{2}t+\frac{2}{2}-\frac{2}{2}\mathrm{e}^{-\Gamma t}\right)$$

$$M_{PS}(t) = v^2 \left(t^2 - \frac{2}{\Gamma} t + \frac{2}{\Gamma^2} - \frac{2}{\Gamma^2} e^{-\Gamma t} \right)$$
 (4.49)

 $t/\Gamma \ll 1$ の状況でかっこ内の第一項以外が消える 分散がt の 2 乗に比例して増加していくことを説明できる 2 乗に比例しない因子:Heyperballistic

Zhang

Kronig-Penny モデルで波束の緩和を計算 分散が時間の2乗に乗らない拡散 →Heyperdiffusion

