問題１　量子力学: 周期境界条件・デルタ関数ポテンシャル・摂動論

1-1

シュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) = E\psi(x) \tag{1-1.1}$$

$E<0$ のときの解は

$$\psi(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}, \qquad \kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \tag{1-1.2}$$

となる。周期的境界条件より

$$\begin{aligned} 0 &= \psi(x+2\pi L) - \psi(x) \\ &= Ae^{2\pi\kappa L}e^{\kappa x} + Be^{-2\pi\kappa L}e^{-\kappa x} - Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x} \\ &= A(e^{2\pi\kappa L}-1)e^{\kappa x} + B(e^{-2\pi\kappa L}-1)e^{-\kappa x} \end{aligned} \tag{1-1.3}$$

これを満たす κ は $\kappa=0$ のみであるので、$E<0$ としたのと反するのでこのような解はない。

$E>0$ のときの解は

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{1-1.4}$$

となる。周期的境界条件より

$$\begin{aligned} 0 &= \psi(x+2\pi L) - \psi(x) \\ &= Ae^{2\pi ikL}e^{ikx} + Be^{-2\pi ikL}e^{-ikx} - Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ &= A(e^{2\pi ikL}-1)e^{ikx} + B(e^{-2\pi ikL}-1)e^{-\kappa x} \end{aligned} \tag{1-1.5}$$

これより

$$\begin{aligned} e^{2\pi ikL} &= 1 \\ k &= \frac{n}{L}, \qquad (n \text{ は 0 以上の整数}) \\ \rightarrow \quad E &= \frac{\hbar^2k^2}{2m} = \frac{\hbar^2n^2}{2mL^2} \end{aligned} \tag{1-1.6}$$

波動関数の係数 A, B が決まらないのでこれは縮退している。

1-2

シュレーディンガー方程式の両辺を微小区間 $(-\epsilon,\epsilon)$ で積分して $\epsilon\to 0+$ とすると

$$\begin{aligned} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{\hbar^2 v}{2m}\delta(x)\right]\psi(x) &= \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx\, E\psi(x) \\ \frac{\hbar^2}{2m}\lim_{\epsilon\to 0+} -\left(\frac{\mathrm{d}\psi(\epsilon)}{\mathrm{d}x} - \frac{\mathrm{d}\psi(-\epsilon)}{\mathrm{d}x}\right) + \frac{\hbar^2 v}{2m}\psi(0) &= 0 \\ \lim_{\epsilon\to 0}\left(\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)\right) &= v\psi(0) \end{aligned} \tag{1-2.1}$$

1-3

$x\in(0,2\pi L)$ でのシュレディンガー方程式に与えらえた波動関数を入れると

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\left(e^{\kappa x} + Ae^{-\kappa x}\right) = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}\left(e^{\kappa x} + Ae^{-\kappa x}\right) \quad = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}\psi(x) \tag{1-3.1}$$

より確かに $E = -\hbar^2\kappa^2/2m$ の解になっているのがわかる。次に $x=0$ での境界条件を考える。周期的境界条件より $x=0$ と $x=2\pi L$ での波動関数の値は同じであるので

$$\begin{aligned} \psi(0) &= \psi(2\pi L) \\ 1 + A &= e^{2\pi\kappa L} + Ae^{-2\pi\kappa L} \\ \left(e^{2\pi\kappa L}-1\right)\left(e^{2\pi\kappa L}-A\right) &= 0 \end{aligned} \tag{1-3.2}$$

$e^{2\pi\kappa L}=1$ となるのは $\kappa=0$ であるので不適。よって $A=e^{2\pi\kappa L}$ また、設問 2 で求めた条件を周期的境界条件と合わせると

$$\begin{aligned}\psi'(0)-\psi'(2\pi L)&=v\psi(0)\\ \kappa(1-A)-\kappa(e^{2\pi\kappa L}-Ae^{-2\pi\kappa L})&=(1+A)v\\ v&=\frac{2(1-e^{2\pi\kappa L})}{1+e^{2\pi\kappa L}}\kappa\\ &=-2\kappa\tanh(\pi\kappa L)\end{aligned}\tag{1-3.3}$$

となる。$\kappa\tanh(\pi\kappa L)$ は単調減少で $\kappa=0$ のとき $v=0$ なので v と κ は 1 対 1 に対応する

1-4

波動関数は設問 1 で求めた形になるので、波動関数の規格化定数はおいておいて、

$$\psi(x)=e^{ikx}+Ae^{-ikx}\tag{1-4.1}$$

とする。$x=0$ と $x=2\pi L$ で波動関数の値が連続であるであることより

$$\begin{aligned}\psi(0)&=\psi(2\pi L)\\ 1+A&=e^{2\pi ikL}+Ae^{-2\pi ikL}\\ \left(e^{2\pi ikL}-1\right)\left(e^{2\pi ikL}-A\right)&=0\end{aligned}\tag{1-4.2}$$

まず $e^{2\pi ikL}=1$ つまり $\kappa=n/L$ のように設問 1 と同じ条件のとき、微分係数の条件から

$$\begin{aligned}\psi'(0)-\psi'(2\pi L)&=v\psi(0)\\ ik(1-A)-ik(e^{2\pi ikL}-Ae^{-2\pi ikL})&=v(1+A)A\quad=-1\end{aligned}\tag{1-4.3}$$

よってこのときのシュレーディンガー方程式の解は

$$\psi(x)\propto\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right),\quad E=\frac{\hbar^2n^2}{2mL^2}\tag{1-4.4}$$

となり、ポテンシャルの影響を受けない解となる。

次に $e^{2\pi ikL}=A$ のとき、微分係数に関する境界条件より

$$\begin{aligned}\psi'(0)-\psi'(2\pi L)&=v\psi(0)\\ ik(1-A)-ik(e^{2\pi ikL}-Ae^{-2\pi ikL})&=v(1+A)\\ v&=\frac{2ik\left(1-e^{2\pi ikL}\right)}{1+e^{2\pi ikL}}\\ &=2k\tan(\pi kL)\end{aligned}\tag{1-4.5}$$

これもグラフを書くことにより v をあたえると k が量子化しているのがわかる。k について解くことはできないので波動関数の形だけ示しておくと

$$\psi(x)\propto e^{ikx}+e^{2\pi ikL}e^{-ikx}\tag{1-4.6}$$

となる。

1-5

設問 4 で得られた解の内、ポテンシャルの影響がないものはエネルギー固有値の補正も受けない。影響を受けた方について、摂動論の一般論より、v の 1 次摂動の補正エネルギー ΔE は

$$\begin{aligned}\Delta E&=\frac{\int dx\psi^*(x)\frac{\hbar^2v}{2m}\delta(x)\psi(x)}{\int dx\psi^*(x)\psi(x)}\\ &=\frac{\hbar^2v}{2m}\frac{\int dx\,4\cos^2(kx-\pi kL)\delta(x)}{\int dx\,4\cos^2(kx-\pi kL)}\quad=\frac{\hbar^2\cos^2(\pi kL)}{\pi mL}v\end{aligned}\tag{1-5.1}$$

となる。

感想

　ただ単に周期境界条件・デルタ関数ポテンシャル・摂動論を組み合わせてみましたという感じ。時間に余裕はないが、バンドギャップの話につながりそう。