- 半導体
- 金属
- 絶縁体

結晶中の電子状態

その分布

統計力学

量子力学

電子 → 粒子・波動 二重性

ブラウン管　原子 結晶

テレビ　ミクロ

ある瞬間の　波の形

x, p　$\psi(x)$

位置　運動量　プサイ

波動関数

$|\Psi(x)|^2$ → 電子を見い出す確率

正の実数　　　　確率密度

古典論 → ニュートンの運動方程式　$V(x)$

量子論 → シュレーディンガーの波動方程式

1.5 Schrödingerの波動方程式

定常状態 → $\Psi(x,t) = \psi(x) \, \varphi(t)$

エネルギーが確定した状態

(1.47) $\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + (E - V)\psi = 0$

質量　　系のエネルギー　　ポテンシャルエネルギー

$$\Delta = \nabla^2 = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z)$$

$$V(x, y, z)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, y, z) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \psi(x, y, z) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(x, y, z) \right) +$$

$$\left[E - V(x, y, z) \right] \psi(x, y, z) = 0$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + (\underbrace{E}_{\text{未知}} - V(x))\,\underline{\psi(x)} = 0$$

微分方程式

可能なEを求めて、その時のψ(x)を求める

非定常状態 → $\Psi(x,t)$ が $\psi(x)\cdot\varphi(t)$ と書けない.

$$\Psi(x,t) = \psi_1(x)\,\underline{\varphi_1(t)} + \psi_2(x)\,\underline{\varphi_2(t)} + \cdots$$

$$\varphi_1(t) \neq \varphi_2(t).$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(x,t) - V(x)\cdot\Psi(x,t) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$$

エネルギーが不確定. (期待値はある)

不確定性原理 $\Delta E\cdot\Delta t \sim h$

対応関係

全エネルギー

$$H = T(p) + V(q)$$

運動エネ　ポテンシャル

$$= \frac{p^2}{2m} + V(q)$$

バネ $F = kx$ の復元力

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\cdot\psi(x) = E\,\psi(x)$$

$$\underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]}_{\text{ハミルトニアン } \mathbb{H}}\psi(x) = E\,\psi(x)$$

$$\mathbb{H}\,\psi(x) = \underbrace{E}_{\text{定数}}\,\psi(x)$$

$$P = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$ 運動量演算子

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x) = E \cdot f(x)$$

$$f(x) = A \sin x$$

$$E = -1$$

バネ $F = kx$ の復元力

$$V(x) = \frac{1}{2} k x^2$$

波動関数の規格化

$$|\Psi(x)|^2 = \Psi(x) \cdot \Psi^*(x)$$ 見い出す確率

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \cdot \Psi(x)\, dx = 1$$ となるように比例係数

規格化条件.

$V(x) = \text{const.}$ を考える.

(i) $E > V$ $\qquad E - V > 0$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \underbrace{(E - V)}_{\text{定数}}\psi = 0 \rightarrow \sin\ \cos\ e^{i\theta}$$

$$\psi(x) = A\exp(ikx) + B\exp(-ikx)$$

$$k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E-V)}$$

伝搬する波

(ii) $E < V$

$$\psi(x) = A \cdot \exp(kx) + B \exp(-kx)$$

$$k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V-E)}$$

指数関数的に
減衰
発散
(波ではない)

(iii) $E = V$

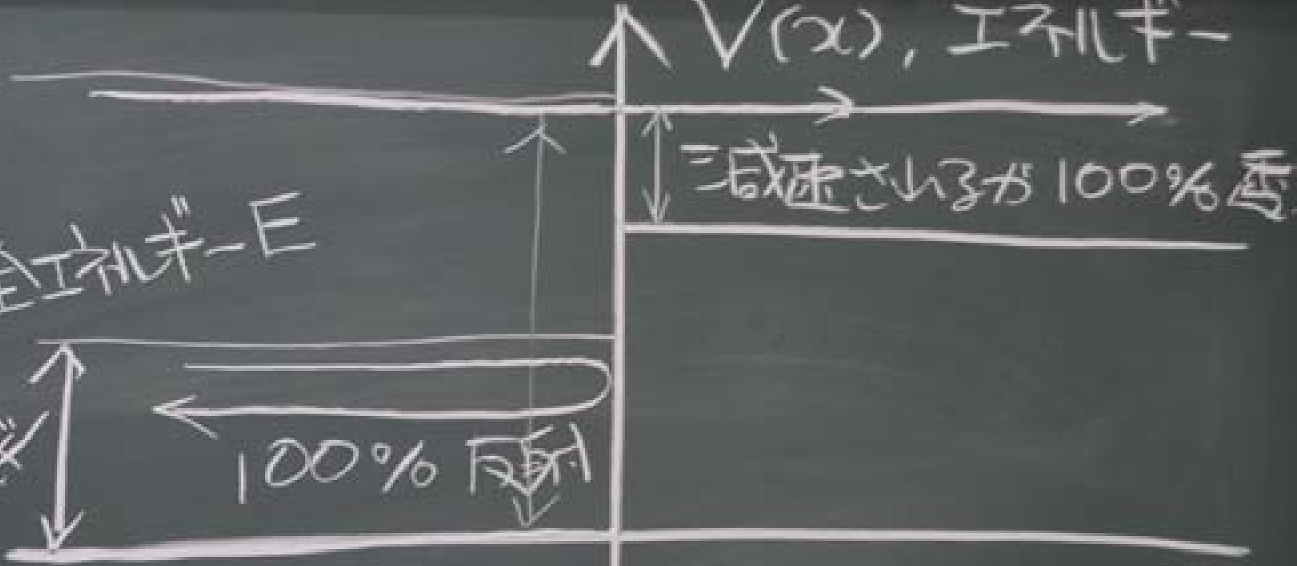
$$\psi(x) = Ax + B$$

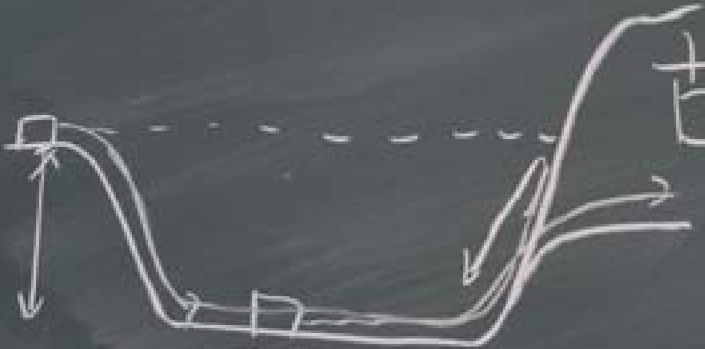
電子 → 粒子

ある瞬間の

x, P

位置　運動量





古典論

階段ポテンシャルへの入射 → 電子

(i) $E > V$

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = A_1 \exp(ik_1x) + B_1 \exp(-ik_1x)$$

左から右 → 入射波

← 反射波

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x<0) \\ V & (x>0) \end{cases}$$

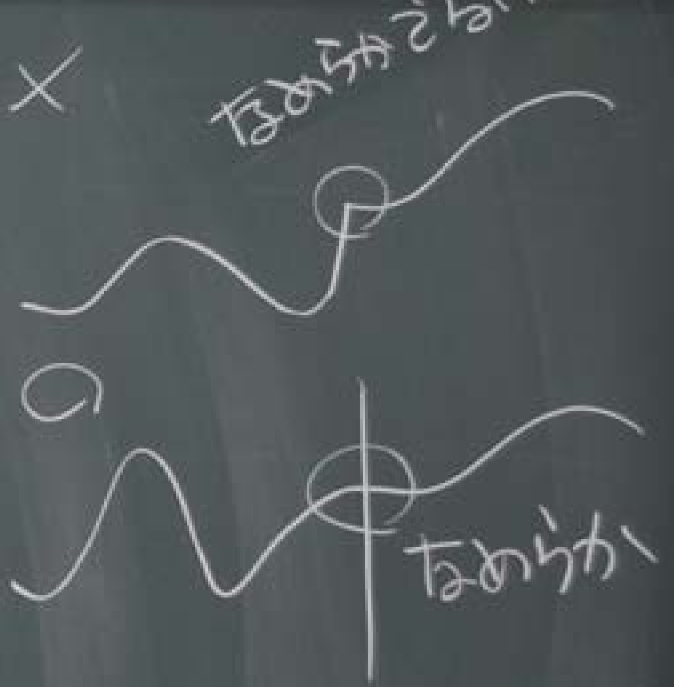
$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = A_2 \exp(ik_2x) + \underbrace{B_2 \exp(-ik_2x)}_{\text{題意から除外}}$$

→ 透過波

境界での連続性から

$$\begin{cases} \psi_{\mathrm{I}}(0) = \psi_{\mathrm{II}}(0) & \text{接続.} \\ \psi'_{\mathrm{I}}(0) = \psi'_{\mathrm{II}}(0) & \text{なめらか接続} \end{cases}$$

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + \cancel{B_2} \\ k_1(A_1 - B_1) = k_2(A_2 - \cancel{B_2}) \end{cases}$$



反射率

A_2を消去。

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - V/E}}{1 + \sqrt{1 - V/E}}\right)^2 \neq 0$$

$$k_1 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$$

$$k_2 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E-V)}$$

$E > V$にもかかわらず
反射が起こる

$E = 2V$ $R = \bigcirc$

透過率

$$T = \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2}\frac{v_2}{v_1} = \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2}\frac{k_2}{k_1}$$

$$mv = p = \hbar k$$

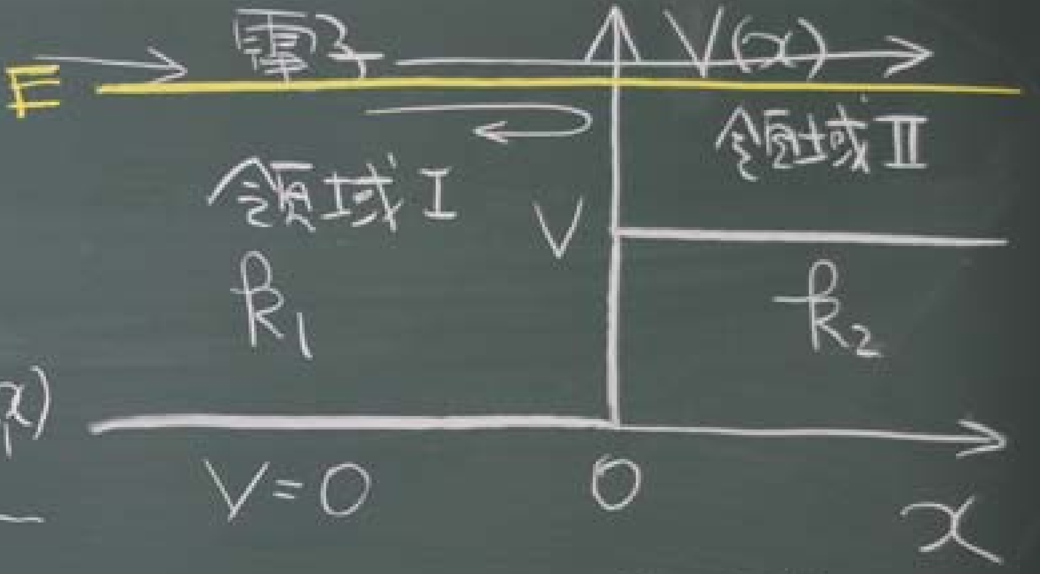
$$v \propto k$$

$$= \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2} = \frac{4\sqrt{1-V/E}}{1+\sqrt{1-V/E}} \neq 1$$

検算

$$R + T = 1$$

階段ポテンシャルへの入射



(i) $E > V$

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = \underbrace{A_1 \exp(ik_1x)}_{\substack{\text{左から右}\rightarrow \\ \text{入射波}}} + \underbrace{B_1 \exp(-ik_1x)}_{\substack{\leftarrow \\ \text{反射波}}}$$

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x<0) \\ V & (x>0) \end{cases}$$

$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = \underbrace{A_2 \exp(ik_2x)}_{\rightarrow \ \text{透過波}} + \underbrace{B_2 \exp(-ik_2x)}_{\text{題意から除外}}$$

(ii) $E < V$ の場合

$$\psi_{I}(x) = A_1 \exp(i k_1 x) + B_2 \exp(-i k_1 x)$$

$$\psi_{II}(x) = A_2 \exp(k_2 x) + B_2 \exp(-k_2 x)$$

境界条件

$$\psi_{I}(0) = \psi_{II}(0)$$

$$\psi'_{I}(0) = \psi'_{II}(0)$$

物理的にありえない

$A_2 = 0$ である

$$k_1 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$$

$$k_2 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V-E)}$$

$$
\begin{cases}
A_1 + B_1 = B_2 \\
ik_1 A_1 - ik_1 B_2 = -kA_2
\end{cases}
$$

$$
R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \left| \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} \right|^2 = 1
$$

複素数

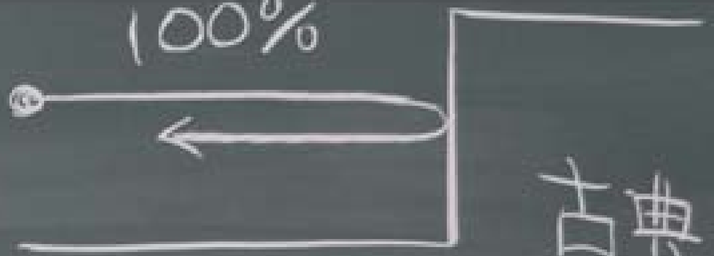
E<Vの場合は
古典論と同じように
R=1
だが…

反射率

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \Big(\frac{-}{k_1} \ldots$$

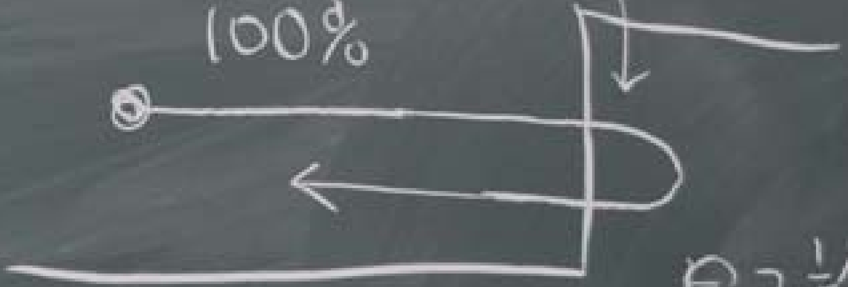
$$k_1 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$$

$$k_2 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E- \ldots}$$



古典

しみ出し



量子論

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = B_2 \\ ik_1 A_1 - ik_1 B_2 = -k A_2 \end{cases}$$

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \left| \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} \right|^2 = 1$$

複素数

反射係数

$$r = \frac{A_2}{A_1}$$ 複素数　位相

$E < V$の場合は
古典論と同じように
$R = 1$
だが…