1次元系の量子力学(要点）

目次

made by R. Okamoto (Kyushu Institute of Technology)

Filename=quantum-1dim-summary080513.ppt

自由粒子と平面波

自由粒子：他から力(相互作用）が働かない粒子

1次元の平面波とその表現

正弦波 $\Psi(x,t) = A\sin(kx - \omega t)$

余弦波 $\Psi(x,t) = A\cos(kx - \omega t)$

A:振幅、

k＝2π/λ：波数、

λ：波長、

ω＝2πf:角振動数、

f:振動数

複素数表現

$$\Psi(x,t) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)} \equiv A\exp[\mathrm{i}(kx - \omega t)]$$

オイラーの公式 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta} = \cos\theta + \mathrm{i}\sin\theta$

平面波を規格化する二つの方法

他から力が全く働かない粒子は不自然

平面波は単純には規格化できない→波動関数の確率解釈ができない？！

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx = |A|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kx-\omega t)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}dx = |A|^2\int_{-\infty}^{+\infty}dx \to \infty$$

$$\Downarrow$$

波動関数を変数分離型に表す

$$\Psi(x,t) = \psi_k(x)\exp(-iEt/\hbar)$$

$$E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$$

デルタ関数を用いる規格化

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\psi(x)dx = \delta(k-k') \leftarrow \delta(k) \equiv \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(ikx)dx$$

$$\longrightarrow \quad \psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(\mathrm{i}kx)$$

波数、エネルギーは連続的に変化する

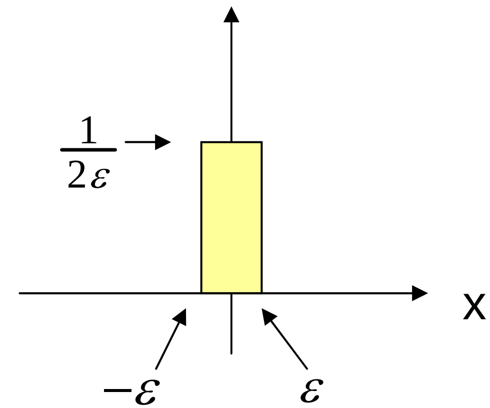
箱型規格化（周期的境界条件）

$$\psi_k(x) = \psi_k(x+L) \to k_n \equiv \left(\frac{2\pi}{L}\right)n, \quad (n = 0,1,2,\cdots,\infty)$$

$$\to \psi_{k_n}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}\exp(ik_n), \quad E_n = \left(\frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2}\right)n, \quad (n = 0,1,2,\cdots,\infty)$$

波数、エネルギーは離散的に変化する

デルタ関数の定義と性質



モデル関数による表現

$$\delta(x) \equiv \lim_{\varepsilon \to 0} \delta_\varepsilon(x), \quad \delta_\varepsilon(x) \equiv \begin{cases} \frac{1}{2\varepsilon} & (-\varepsilon \le x \le \varepsilon) \\ 0 & (|x| > \varepsilon) \end{cases}$$

ヘビーサイドの階段関数 θ (x)の広い意味の微分

$$\delta(x) = \frac{d\theta(x)}{dx} \longleftarrow \theta(x) \equiv \begin{cases} 1 & (x \ge 0) \\ 0 & (x < 0) \end{cases}$$

デルタ関数 δ (x)とは、点x＝0に面積1が集中した関数である。

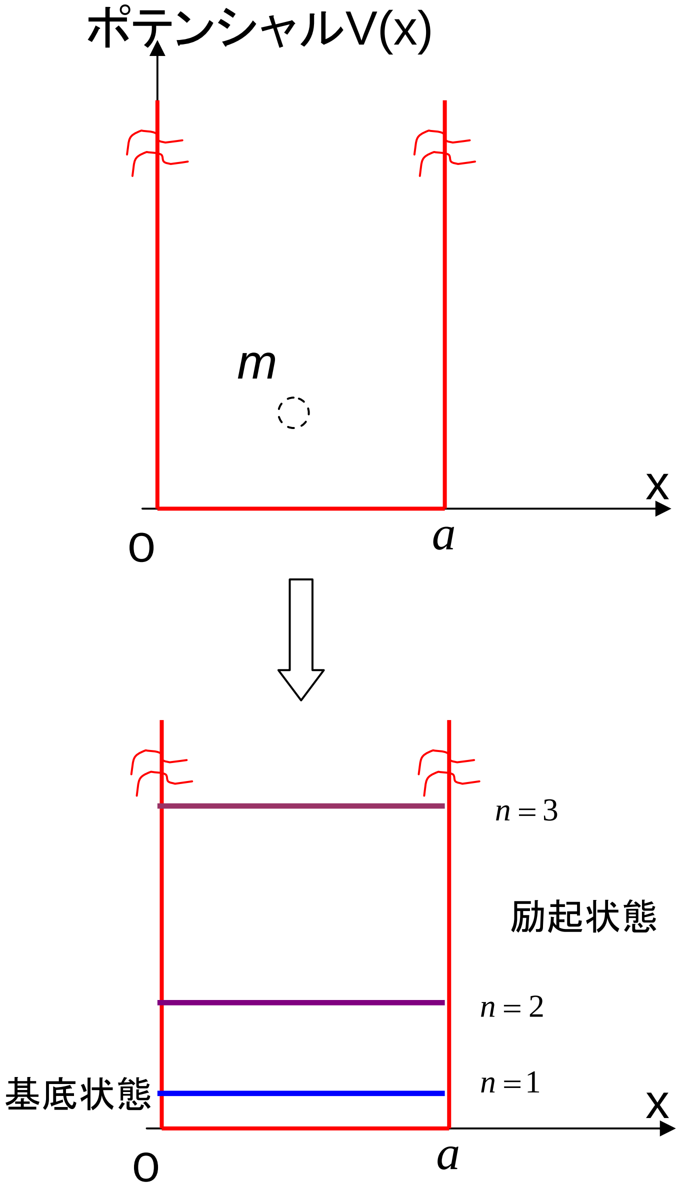
$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)dx = 1, \quad \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(x)dx = 1\,(\varepsilon : \text{任意正数})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)dx = f(0), \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-a)dx = f(a)$$

デルタ関数の有用な表現

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{ikx} dk \qquad \delta(x) = \lim_{a \to \infty} \frac{\sin(ax)}{\pi x}$$

無限量子井戸



シュレディンガー方程式

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

$$\rightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)$$

$$= -k^2\psi(x), \quad k \equiv \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

一般解

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$$

$$(A, B: \text{積分定数})$$

境界条件 $\psi(0) = \psi(a) = 0$

特殊解

$$\psi(x) = A\sin(kx)$$

波数、エネルギーの

量子化

$$k_n = (\tfrac{\pi}{a})n, \quad n = 1, 2, \cdots, \infty$$

$$E_n = (\tfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma})n^2$$

離散的エネルギー

をもつ束縛状態:

無限個!

無限量子井戸：波動関数、量子論的確率、古典的確率

規格化　$\int_0^a \psi_n^*(x)\psi_n(x)dx = 1 \rightarrow \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$

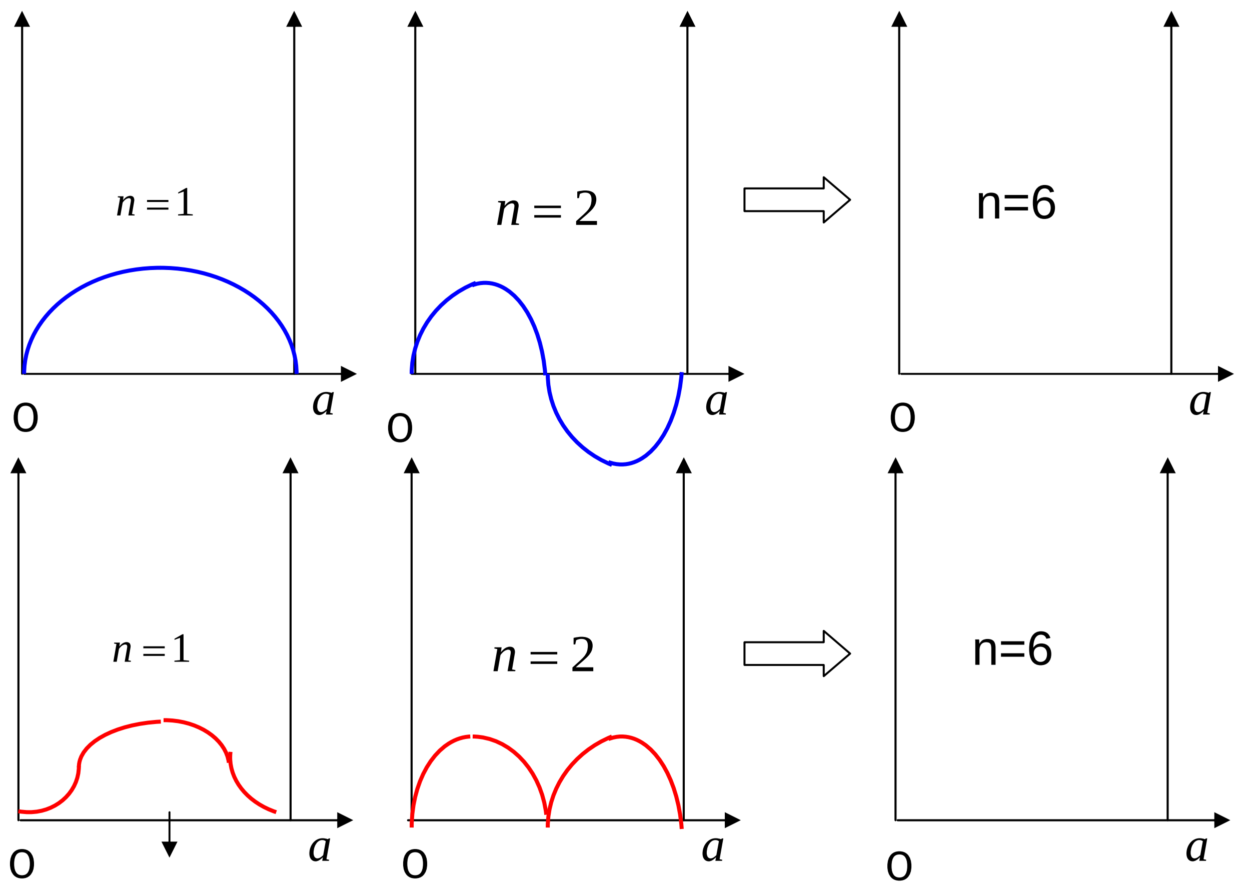
直交性　$\int_0^a \psi_{n'}^*(x)\psi_n(x)dx = 0 \quad (n \neq n')$

波動関数

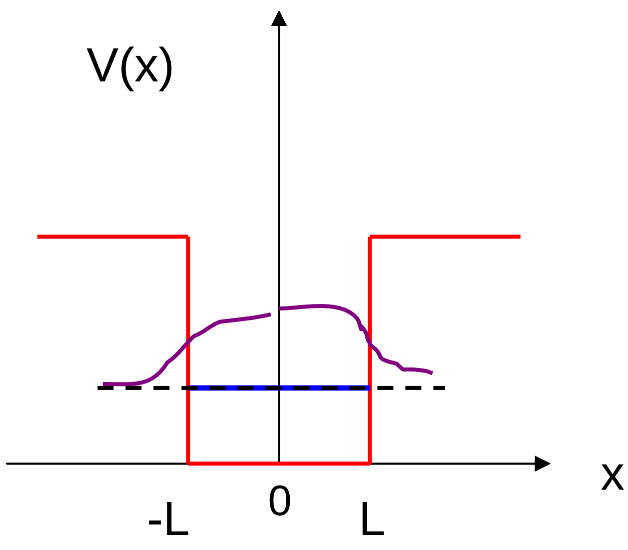
$\psi_n(x)$

確率密度

$|\psi_n(x)|^2$



有限量子井戸



離散的エネルギー

をもつ束縛状態:

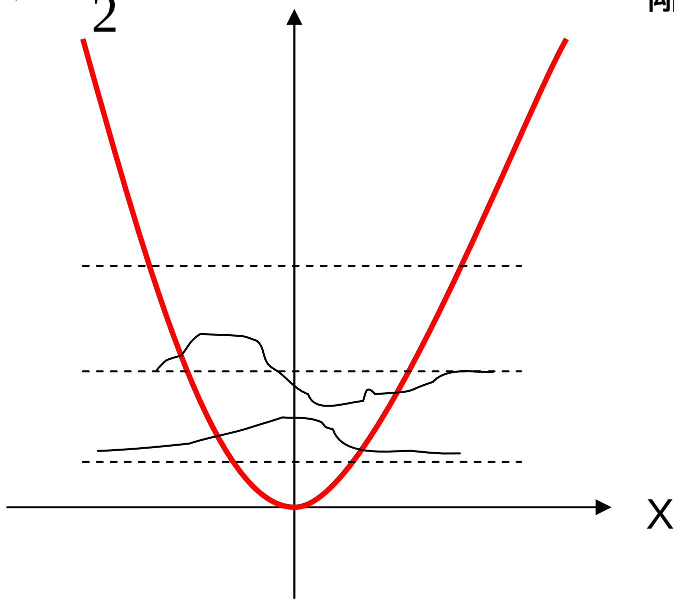
1本以上有限個

束縛状態:ポテンシャルの壁の中に

浸透する確率がある！

量子調和振動子

$$U(x)=\frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$



離散的エネルギー、等間隔

$$E_n=\hbar\omega(n+\tfrac{1}{2}),\quad (n=0,1,2,\infty)$$

零点エネルギー

$$E_0=\tfrac{1}{2}\hbar\omega$$

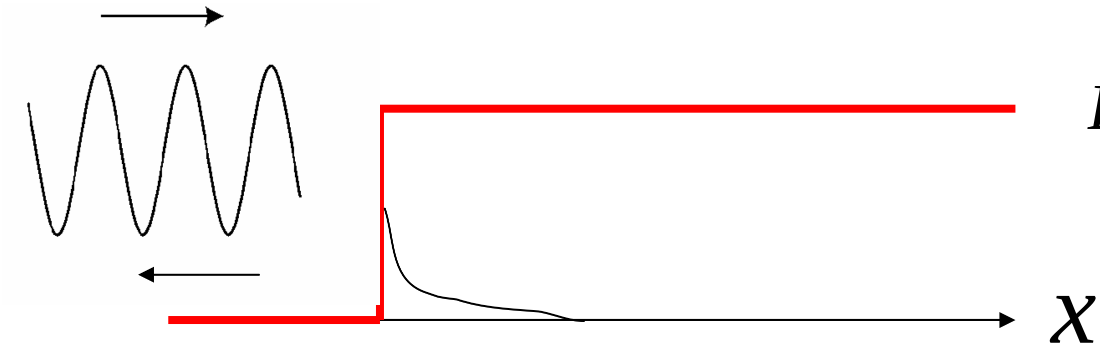
波動関数

$$\psi_n(x)\propto\exp(-\frac{x^2}{2b^2})H_n(x/b);\quad b\equiv\sqrt{\hbar/(m\omega)},\ H_n(x):\text{エルミート多項式}$$

$$\psi_0(x)\propto\exp(-\frac{x^2}{2b^2})$$

量子トンネル効果

量子反射

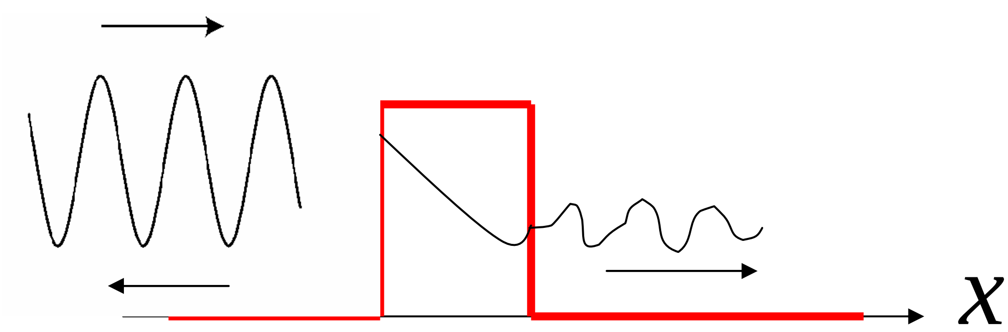


$E < V_0$ の場合でも

反射率＝1

しかし、波動関数は壁の中に浸透する！

量子トンネル効果



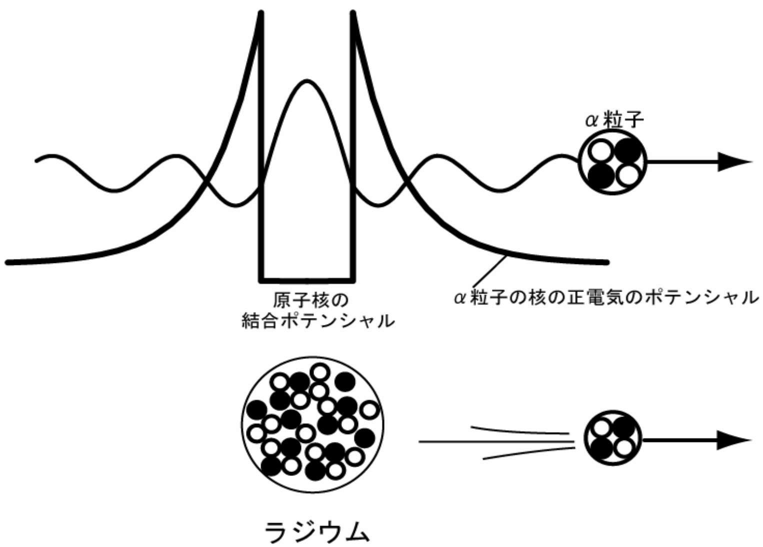
$E < V_0$ の場合でも

反射率＋透過率＝1

透過率＞0　！！

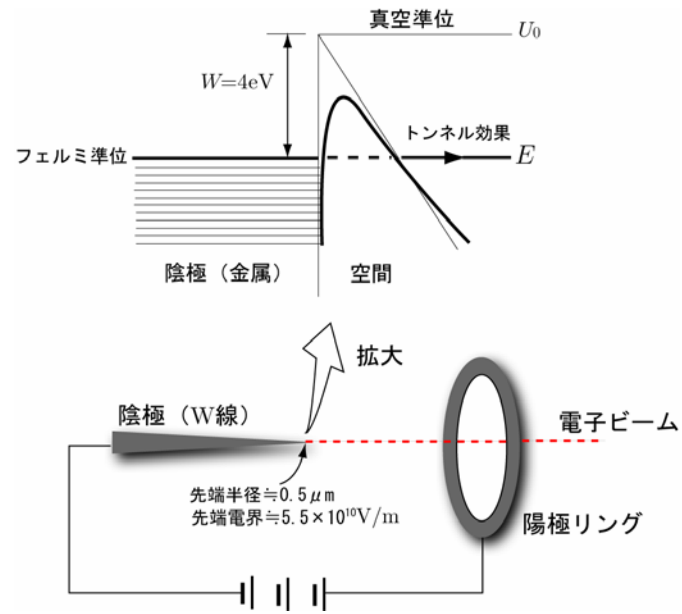
トンネル効果の実例

(1)アルファ崩壊

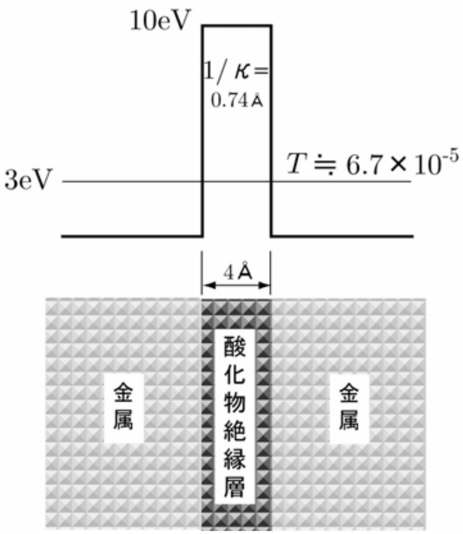


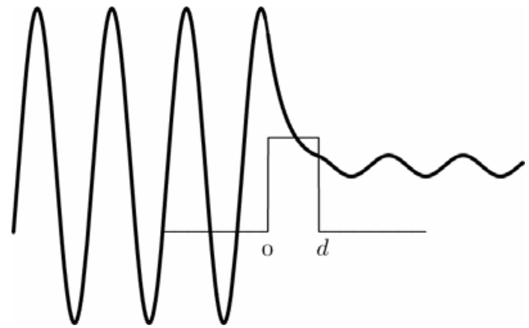
1928年、G.Gamowに
よりα崩壊がトンネル効果
の最初の例として紹介された。

(2)電界による電子の放出

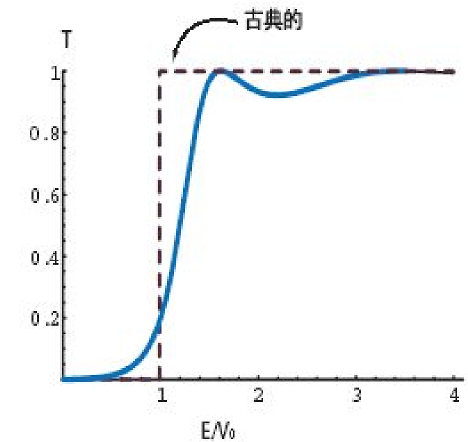


（3）薄い絶縁層の透過





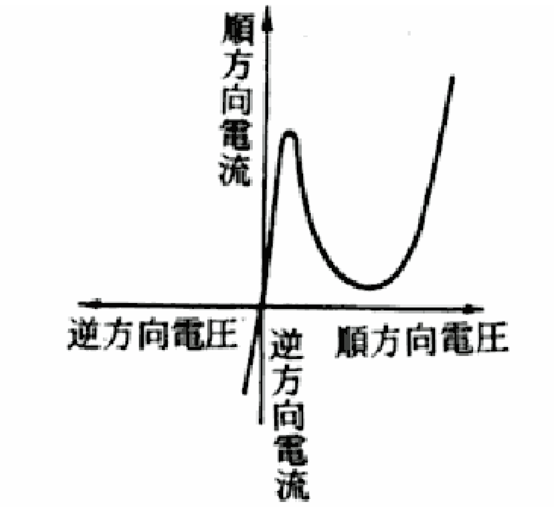
波動関数



透過率のエネルギー依存性

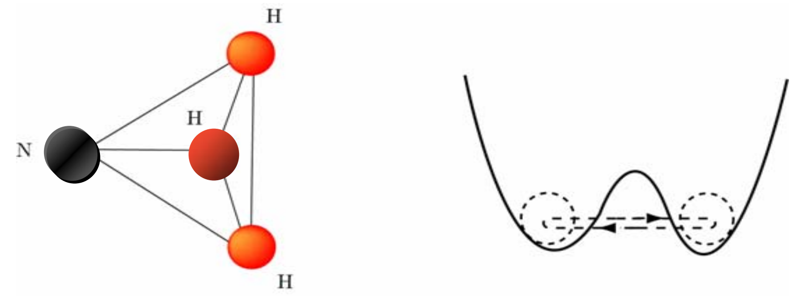
古典的には、粒子の入射エネルギーが障壁のポテンシャルよりも小さいときは、透過率はゼロとなり透過することはできない。しかし、量子的には、エネルギーが障壁のポテンシャルより小さくても透過率はゼロとはならずに、一部が透過する。

(3)エサキダイオード



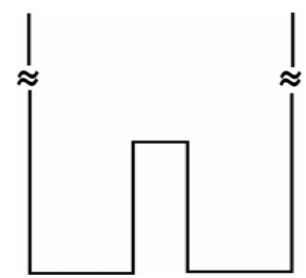
1957年に江崎玲於奈氏が発明した。
図からわかるように、順方向に電流を流すと、トンネル効果により、ある電圧領域では電圧をかけるほどに流れる電流量が少なくなるという「負性抵抗」が現れる。

(4)アンモニア分子におけるトンネル効果



(a)Nの上下運動　(b)N原子に働くポテンシャル

モデル化

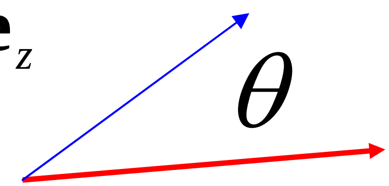


ベクトルの内積ー2つの表現ー

ベクトルと成分、基本ベクトルを用いたその表現

$$\mathbf{A} \equiv \vec{A} \equiv (A_x, A_y, A_z) = A_x \mathbf{e}_x + A_y \mathbf{e}_y + A_z \mathbf{e}_z$$

$$\mathbf{B} \equiv \vec{B} \equiv (B_x, B_y, B_z) = A_x \mathbf{e}_x + A_y \mathbf{e}_y + A_z \mathbf{e}_z$$



内積（スカラー積）

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \equiv AB\cos\theta \quad (\theta : \mathbf{A}\text{と}\mathbf{B}\text{のなす角度})$$

$$\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{e}_x = 1 \cdot 1 \cdot \cos 0 = 1, \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{e}_y = \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}_z = 1$$

$$\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{e}_y = 1 \cdot 1 \cdot \cos\left(\frac{\pi}{2}\right) = 0, \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{e}_x = \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{e}_z = \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}_x = \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{e}_z = \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}_y = 1$$

$$\langle \mathbf{A} \,|\, \mathbf{B} \rangle \equiv A_x B_x + A_y B_y + A_z B_z$$

ベクトルの成分が複素数であるように、
2つのベクトルの内積の定義を拡張すると

$$\langle \mathbf{A} | \mathbf{B} \rangle \equiv A_x^* B_x + A_y^* B_y + A_z^* B_z,$$

$$\langle \mathbf{A} | \mathbf{B} \rangle^* = A_x B_x^* + A_y B_y^* + A_z B_z^* = B_x^* A_x + B_y^* A_y + B_z^* A_z$$

$$\rightarrow \langle \mathbf{A} | \mathbf{B} \rangle^* = \langle \mathbf{B} | \mathbf{A} \rangle$$

$$\rightarrow \langle \mathbf{A} | \mathbf{A} \rangle = |A_x|^2 + |A_y|^2 + |A_z|^2$$

関数の内積、直交性、規格性とは何か

積分領域(x=a→x=b)で定義される2つの関数の次の積分を関数の内積と定義する。

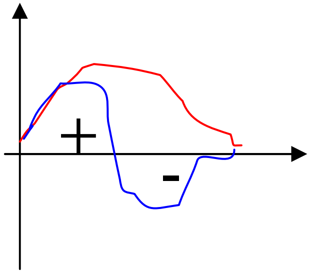
$$\text{関数}\,\psi(x),\phi(x)\text{の内積：}\ \int_{\mathrm{a}}^{b}\psi^{*}(x)\phi(x)dx$$

上付き添え字（星印）：複素共役（complex conjugate）

関数の規格性（正規性）

$$\int_{\mathrm{a}}^{b}\psi^{*}(x)\psi(x)dx=1\quad\int_{\mathrm{a}}^{b}\phi^{*}(x)\phi(x)dx=1$$

関数の直交性 $\int_{\mathrm{a}}^{b}\psi^{*}(x)\phi(x)dx=0$



直交規格関数系

$$\phi_1(x), \phi_2(x), \cdots, \phi_n(x) \equiv \left\{ \phi_k(x); k = 1, 2, \cdots, n \right\}$$

$$\int_{\mathrm{a}}^{b} \phi_k^*(x) \phi_{k'}(x) dx = \delta_{kk'}$$

Kroneckerのδ記号：$\delta_{kk'} \equiv \begin{cases} 1 \; (k = k') \\ 0 \; (k \neq k') \end{cases}$

完全直交規格関数系による任意の関数の展開

$$\psi(x) = c_1\phi_1(x) + c_2\phi_2(x) + \cdots \equiv \sum_{k=1}^{n} c_k\phi_k(x)$$

展開係数の求め方

$$\int \phi_1^*(x)\psi(x)dx = \int \phi_1^*(x)c_1\phi_1(x)dx = c_1\int \phi_1^*(x)\phi_1(x)dx = c_1$$

$$\rightarrow c_k = \int \phi_k^*(x)\psi(x)dx$$

しかし、これで万万歳か？係数cを展開式に代入すれば、もとの関数と等しいはず

$$\psi(x) = \sum_{k=1}^{n}\left[\int \phi_k^*(x')\psi(x')dx'\right]\phi_k(x) = \int\left[\sum_{k=1}^{n}\phi_k^*(x')\phi_k(x)\right]\psi(x')dx'$$

$$\Rightarrow \boxed{\sum_{k=1}^{n}\phi_k^*(x')\phi_k(x) = \delta(x-x')}$$

完全性（完備性）

完全直交規格関数系の実例

（1）フーリエ級数展開

（2）区間x=0→x=aの間の無限量子井戸に閉じ込められた粒子の

波動関数（固有状態）

$$\left\{ \phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right); n = 1, 2, \cdots \right\}$$

規格直交性

$$\int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n'\pi x}{a}\right) dx = \delta_{nn'}$$

完全性

$$\sum_n \frac{2}{a} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi x'}{a}\right) = \delta(x - x')$$

$$\mathrm{sum} \equiv \sum_n \frac{2}{a} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi x'}{a}\right)$$ の数値計算例

nmax= 100000000, a=1.0の場合

x=	1.0000000000	x'=	0.9000000000	→ sum=	3.65235
x=	1.0000000000	x'=	0.9900000000	→ sum=	-33.57476
x=	1.0000000000	x'=	0.9990000000	→ sum=	-360.48495
x=	1.0000000000	x'=	0.9999000000	→ sum=	416.26826
x=	1.0000000000	x'=	0.9999900000	→ sum=	-31868.66346
x=	1.0000000000	x'=	0.9999990000	→ sum=	-50201.51458
x=	1.0000000000	x'=	0.9999999000	→ sum=	-50406.16195
x=	1.0000000000	x'=	0.9999999900	→ sum=	50407.33862
x=	1.0000000000	x'=	0.9999999990	→ sum=	98365120.67781
x=	1.0000000000	x'=	0.9999999999	→ sum=	99983882.32352