量子物性工学

下記の問題について解答しなさい．解答は，結果だけでなく導出の過程も記すこと．解答に必要な記号は各自で定義して用いてよい．

問題 1

1-1)　ポテンシャル $V(x)$ 中の電子に対する時間に依存しない 1 次元シュレーディンガー方程式を，$V(x)$，ディラック定数 $\hbar$ ($=h/2\pi$，h はプランク定数)，電子の質量 m，波動関数 $\varphi(x)$，電子の位置座標 x，電子のエネルギー E を含む式で書きなさい（結果だけでよい）．

図 1 に示すように，無限大の障壁を持つ幅 d の井戸型ポテンシャルに対して $x = x_1 \sim x_1 + \delta$ の範囲で高さ $V_0(>0)$ の矩形型ポテンシャルが付加されているとする．このときポテンシャル $V(x)$ は次のように書ける．

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < x_1,\ x_1 + \delta < x < d \\ V_0, & x_1 \le x \le x_1 + \delta \\ \infty, & x \le 0,\quad x \ge d \end{cases}$$

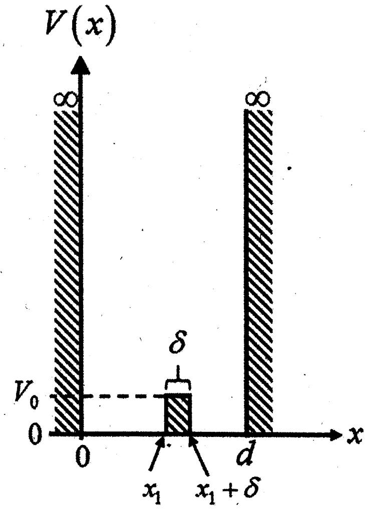

図 1

1-2)　$V_0 = 0$ であるとして問 1-1) で答えたシュレーディンガー方程式を解き，エネルギー固有値 E_n，および規格化された波動関数 $\varphi_n(x)$ を求めなさい．ただし，量子数 n が 1（$n=1$）のときに基底状態を表すものとする．

1-3)　問 1-2) で求めた波動関数のうち，基底状態（$n=1$）と第一励起状態（$n=2$）の波動関数を，横軸を位置座標 x，縦軸を波動関数 $\varphi_n(x)$ とするグラフに示しなさい．

1-4)　次に，高さ $V_0(>0)$ の矩形型ポテンシャルが付け加わった事によって電子のエネルギー準位 E_n が $E_n + \Delta E_n$ に変化したとする．エネルギー準位の変化 ΔE_n を 1 次の摂動論を用いて求めなさい．

1-5)　問 1-4) で得られたエネルギー準位の変化 ΔE_n を，ポテンシャル V_0 が付け加えられた幅 δ が井戸幅 d に比べて十分小さいとして δ に関してマクローリン展開し，δ に関する 1 次の項までで近似した式を求めなさい．

1-6)　問 1-5) の結果をふまえ，横軸を x_1，縦軸を ΔE_n とするグラフの概略を $n=1$ と $n=2$ の場合に対して図示しなさい．ただし，図においては幅 δ が有限である事は考慮しなくて良い．

（2 枚目に続く）

問題２　図２に示すような仮想的な３次元結晶格子を考える．ここで黒丸と白丸はそれぞれ別の原子種を表しており，基本併進ベクトルは$\boldsymbol{a}_1 = a\boldsymbol{i}$，$\boldsymbol{a}_2 = (a/2)\boldsymbol{i} + (a'/2)\boldsymbol{j}$，$\boldsymbol{a}_3 = c\boldsymbol{k}$となる．ここで$\boldsymbol{i}, \boldsymbol{j}, \boldsymbol{k}$はそれぞれ$x, y, z$方向の単位ベクトルである．

2-1)　上で与えられた基本併進ベクトル$\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，$\boldsymbol{a}_3$に対応する逆格子ベクトル$\boldsymbol{b}_1$，$\boldsymbol{b}_2$，$\boldsymbol{b}_3$を求めなさい．

2-2)　逆格子ベクトル$\boldsymbol{b}_1$，$\boldsymbol{b}_2$，$\boldsymbol{b}_3$のうち，$\boldsymbol{b}_1$，$\boldsymbol{b}_2$を逆格子空間上のベクトルとして図示しなさい．図中には逆格子空間の軸と目盛りも書き入れる事．

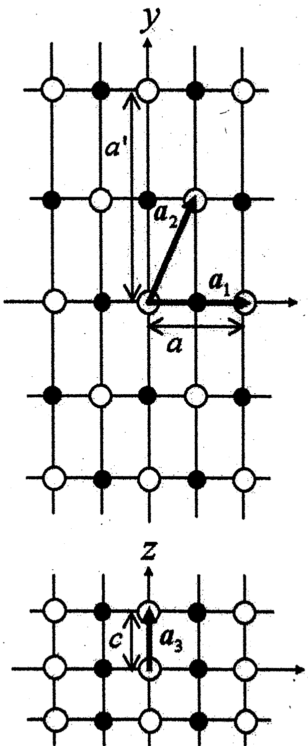

図２（上はxy平面図、下は$y=0$におけるxz平面図）

次に，a'およびcがaに比べて十分大きい場合，y, z方向での原子間の相互作用は無視でき，x方向での原子間の相互作用は図３に示すような単位胞当たり２原子の１次元結晶格子として考える事ができる．２原子の質量はそれぞれM_1，M_2であるとする（$M_1 > M_2$）．原子間に働く相互作用は最近接原子間のみであり，すべての原子間においてフックの法則に従うばね定数kのばねによって表現できるとする．

2-3)　n番目の単位胞内の２原子それぞれの平衡位置からのx方向の変位を$u_{n,1}$，$u_{n,2}$とし，これらについての運動方程式を書きなさい．結果だけでなく，なぜそのような式になるかを必要に応じて式を用いて文章で説明しなさい．

2-4)　この方程式の解として，$u_{n,1}(t) = A_1 \exp(iqna - i\omega t)$，$u_{n,2}(t) = A_2 \exp(iqna - i\omega t)$が成り立つと仮定する．ここで$t$は時間，$\omega$は角周波数，$q$は波数，$A_1$，$A_2$は振幅である．これらの式を運動方程式に代入し，$\omega^2$が波数$q$にどのように依存しているかを表す式を導出しなさい．

2-5)　分散関係（ωとqの関係）を第１ブリルアンゾーンの範囲で図示しなさい．また，ゾーン端における波数qの値，ゾーン端及び$q=0$におけるωの値を図中に書き入れなさい．

2-6)　単位胞当たり２原子の１次元格子振動を考えている事から一般には一つの波数qの値に対して二つのωの値［ω_1，$\omega_2(>\omega_1)$］が得られる．これを踏まえ，ω_1の場合とω_2の場合とで振幅の比A_2/A_1が定性的にどのように異なるかを，その根拠となる考えを含めて答えなさい．更に、$q=0$において得られるω_2の場合の振幅の比A_2/A_1を表す式を導出しなさい．

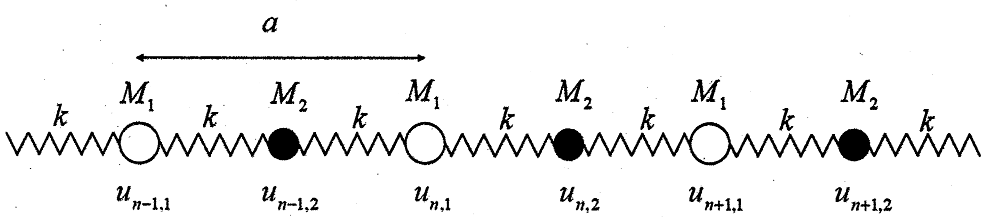

図３