構造化学　No.8

理学部化学科　岡林潤
（スペクトル化学研究センター）
2015.2.1

【61】《井戸型ポテンシャル》
1次元の井戸型ポテンシャルにおいて, 一方の障壁だけが有限になったポテンシャルの場合の問題を考える. これは, 半導体量子井戸において見られる電子状態である.

$$x < 0\ ; \quad U(x) = \infty$$
$$0 < x < a\ ; \quad U(x) = 0 \qquad \text{（領域 I)}$$
$$a < x\ ; \quad U(x) = U_0 \qquad \text{（領域 II)}$$

このとき, 以下の問いに答えよ.

1. 領域 I における Schrödinger 方程式は, 以下となることを示せ. ただし, $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ である.
$$\frac{d^2\psi_{\rm I}}{dx^2} + k^2\psi_{\rm I} = 0$$
2. 上式を満たす波動関数は, 以下となることを示せ.
$$\psi_{\rm I} = A\mathrm{sin}kx$$
3. $E < U_0$ の場合, 領域 II の Schrödinger 方程式は, 以下となることを示せ.
ただし, $k' = \frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}$ である.
$$\frac{d^2\psi_{\rm II}}{dx^2} - k'^2\psi_{\rm II} = 0$$
4. 上式を満たす波動関数は, 以下となることを示せ.
$$\psi_{\rm II} = B\mathrm{exp}(-k'x)$$
5. $x = a$ にて領域 I と領域 II をなめらかに接続しよう. このときの境界条件としては,
$$\psi_{\rm I}(a) = \psi_{\rm II}(a), \quad \psi'_{\rm I}(a) = \psi'_{\rm II}(a)$$
が必要になる. これら 2 式から
$$\xi\mathrm{cot}\xi = -\eta$$
$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2}$$
となることを示せ. ただし, ここで $\xi = ka$, $\eta = k'a$ とおいた.

6. 上の 2 式をみたす ξ に対して, 小さいものから順に ξ_1, ξ_2, ... とすると, 系のエネルギー固有値は, 次式で与えられることを示せ.

$$E_i = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\xi_i^2 \qquad (\text{ただし } i = 1, 2, 3, ...)$$

7. $U_0 \to \infty$ の極限では, エネルギー固有値は井戸型ポテンシャルの場合の値と一致することを示せ.

【62】 《パウリ行列》

2 行 2 列の行列 I, σ_x, σ_y, σ_z を

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

と定義する. これらをパウリ行列とよぶ. そして, スピン角運動量演算子の行列表示 $S_x = (\hbar/2)\sigma_x$, $S_y = (\hbar/2)\sigma_y$, $S_z = (\hbar/2)\sigma_z$ と書ける. 一般に, 任意の 2 行 2 列の行列は, これらのパウリ行列と単位行列 I の 1 次結合で表わされることを示せ. これは, SU(2) の表現である.

【63】 《パウリ行列の性質》

任意の 3 次元ベクトル $\vec{v} = (v_x, v_y, v_z)$ に対して, 下記を定義する.

$$\vec{v}\cdot\vec{\sigma} \;\equiv\; v_x\sigma_x + v_y\sigma_y + v_z\sigma_z = \begin{pmatrix} v_z & v_x - iv_y \\ v_z + iv_y & -v_z \end{pmatrix}$$

1. 半径 1 の単位球上の任意の点をあらわす 3 次元単位ベクトルを $\vec{e}$ とするとき, 極座標 θ, ϕ を用いて $\vec{e}$ をあらわせ. θ, ϕ の定義域も示せ.

2. 2 行 2 列の行列 $A = \vec{e}\cdot\vec{\sigma}$ を θ, ϕ を用いてあらわせ.

3. 行列 A の固有値, 固有ベクトルを求めよ. ただし, 固有ベクトルは, $\theta = 0$ において $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ となるように決定せよ.
