平成 12 年度北海道大学大学院理学研究科
物理学専攻修士課程 (物理学分野) 入試問題

問題 E-II

一周の長さが Na の円上を運動している質量 m の自由電子に周期 a の弱い周期ポテンシャル $V(x)(=V(x+a))$ が作用しているとして以下の問に答えよ。なお、変数 x は円周に沿って定義する。

問 1 ポテンシャル $V(x)$ が無視できるほど小さい場合、電子の波動関数は

$$\varphi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{Na}} e^{ikx} \quad \left(k = \frac{2\pi}{Na} l,\ l = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots\right) \quad \cdots (a)$$

で与えられることを示せ。

問 2 ポテンシャル $V(x)$ が v_0を定数として、

$$V(x) = v_0 \sum_{n=1}^{N} \delta(x - na)\ (n, N\text{は正の整数})$$

と表されるとき、問 1 の (a) 式で与えられる波数 kと k'の状態に関数 $V(x)$ の行列要素

$$\langle k' | V | k \rangle = \int_0^{Na} \varphi_{k'}^*(x) V(x) \varphi_k(x) \mathrm{d}x$$

は

$$\begin{cases} v_0/a \equiv \Delta & (k' - k\ \frac{2\pi}{a} j\ \text{のとき}\ \text{:但し、} j = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots) \\ 0 & (\text{それ以外のとき}) \end{cases}$$

となることを示せ。

問 3 問 2 のポテンシャル $V(x)$ を摂動として扱う場合、波数 kの電子状態について 2 次摂動によるエネルギー変化は、縮退がないときには

$$\Delta\epsilon^{(2)} = \sum_j{}' \frac{\left| \left\langle k + \frac{2\pi}{a} j \,|V|\, k \right\rangle \right|^2}{\epsilon^o(k) - \epsilon^o\left(k + \frac{2\pi}{a} j\right)}$$

で与えられる (但し、$\epsilon^o = \hbar^2 k^2 / 2m$)。波数 kが$\frac{\pi}{a} m (m = \pm 1, \pm 2, \cdots)$ の電子状態に対しては、ポテンシャル $V(x)$ が弱くても上記の摂動公式が適用できなくなることを簡単に説明せよ。

問 4 波数 $k = \pm\frac{\pi}{a}$の電子状態では、問 2 の $j = \pm 1$ の行列要素が重要となる t め、波動関数が

$$\phi_{\pm\frac{\pi}{a}}(x) = \frac{1}{\sqrt{Na}} \left(\alpha e^{i\frac{\pi}{a}x} + \beta e^{-i\frac{\pi}{a}x}\right) \quad \cdots (b)$$

でよく表せるものとして以下の問に答えよ。

i) (b) 式中の係数α、βは

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

を満たさなければならぬことを示せ。

ii) (b) 式の波動関数$\psi_{\pm\frac{\pi}{a}}(x)$ は Schrödinger 方程式に従わなければならぬので

$$\left.\begin{array}{ll} \left[\epsilon^o\left(\frac{\pi}{a}\right)-\epsilon\right]\alpha+\Delta\beta & =0 \\ \Delta\alpha+\left[\epsilon^o\left(-\frac{\pi}{a}\right)-\epsilon\right]\beta & =0 \end{array}\right\} \quad \cdots(c)$$

が成立することを示せ。なお、上式中のϵは (b) 式の波動関数で記述される電子状態のエネルギーであり、問 2 の $j=0$ の行列要素は無視するものとする。

iii) (c) 式を解き、波動関数$\psi_{\pm\frac{\pi}{a}}(x)$ とエネルギーϵを求めよ。