半導体物理学 付録編

勝本信吾

東京大学 理学系研究科・物性研究所

2016 年 7 月 18 日

付録 K：２次元電子閉じ込めの三角ポテンシャル近似

レポート問題を解くために必要になるため，どの教科書にも出ている話ではあるが，５年前の講義ノートの三角ポテンシャル近似の部分を再録しておく．

２次元電子系のポテンシャルを簡単な下三角ポテンシャルで近似することを考える．これは，量子力学で良く知られた「落下防止の壁がある斜面」の問題である．x 軸上の１次元問題と考え，Schrödinger 方程式を

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\psi=E\psi,\quad V(x)=\begin{cases}ax & (x>0,\quad a>0)\\ \infty & (x\le 0)\end{cases} \tag{8.1}$$

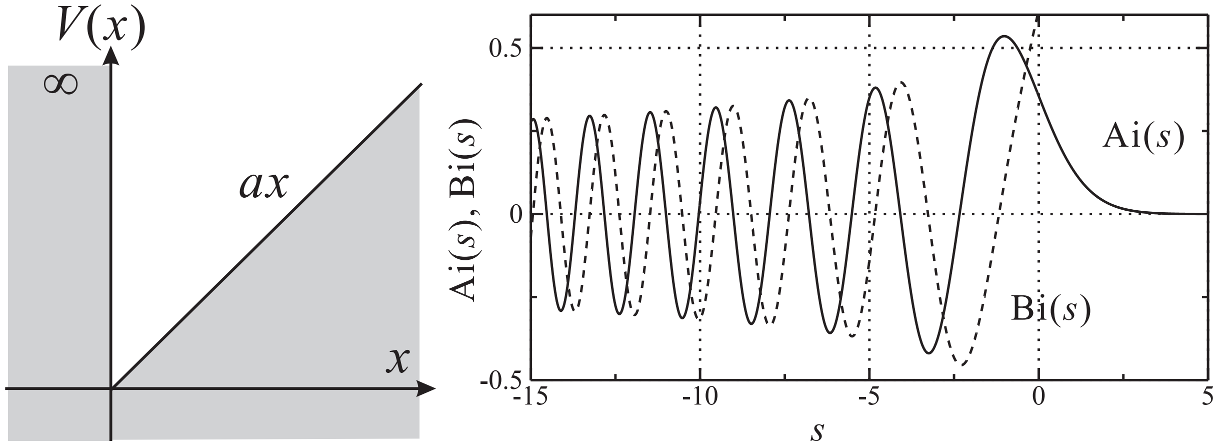
とする．次の変数変換を行う．

$$s=\left(\frac{2ma}{\hbar^2}\right)^{1/3}\left(x-\frac{E}{a}\right). \tag{8.2}$$

すると，Schödinger 方程式は

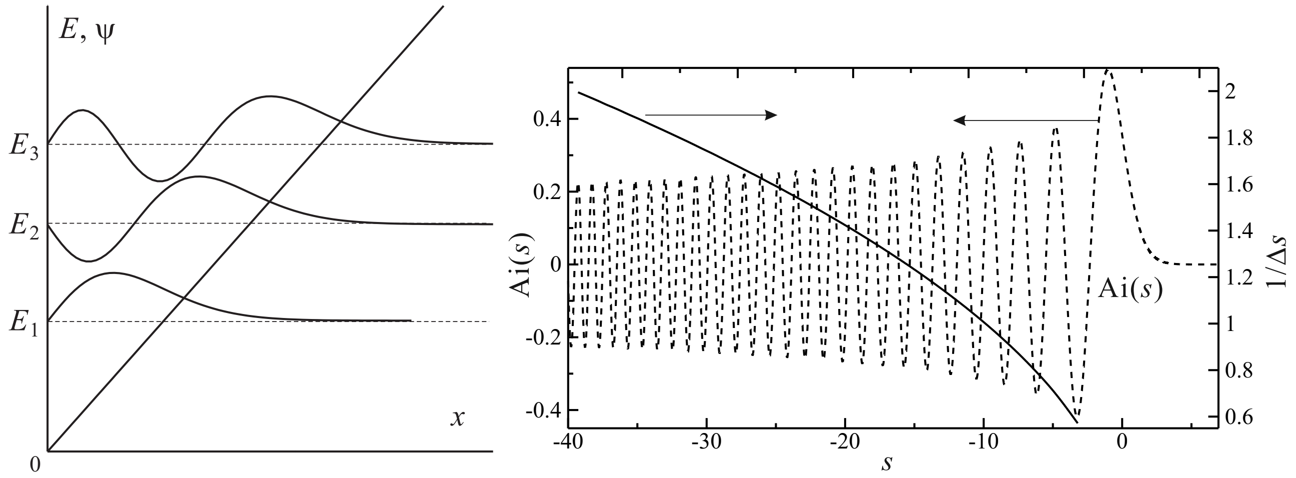
$$\frac{d^2\psi}{ds^2}=s\psi \tag{8.3}$$

という形になる．これは，エアリ (Airy) あるいはストークス (Stokes) の微分方程式と呼ばれる．その解は，**エアリ関数**と呼ばれ，$s\to\infty$ の境界条件により，$\psi\to 0$ となるものを Ai，$\psi\to\infty$ となるものを Bi と記す．その振舞いを図 8.1(b) に示した．



(a)　(b)

図 8.1　(a) 三角ポテンシャルの模式図．(b) エアリ関数．



(a) (b)

図 8.2 (a) 三角ポテンシャル中のエネルギー固有値と波動関数．エネルギーの低い順に $n = 1, 2, 3$ について描いたもの．(b) エアリ関数のゼロ点の間隔 Δs を計算し，$1/\Delta s$ をこのゼロ点の中点に対してプロットしたもの．エアリ関数そのものも破線で描かれている．

量子力学の波動関数の基底系としては無論，無限遠でゼロになる条件より Ai を採用すべきである．$s \to \pm\infty$ の漸近形は

$$\mathrm{Ai}(s) \sim \frac{1}{2\sqrt{\pi}s^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}s^{3/2}\right) \quad (s \to \infty) \tag{8.4}$$

$$\sim \frac{1}{\sqrt{\pi}|s|^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}|s|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) \quad (s \to -\infty) \tag{8.5}$$

と与えられている．

$x < 0$ では $V = \infty$ より，$x = 0$ の境界条件は $\psi(+0) = 0$ である．これより，$\mathrm{Ai}(s)$ のゼロ点が $x = 0$ に来なければならない．Ai のゼロ点を絶対値の小さい順に $s_1, s_2, \cdots s_n, \cdots$ と書くと，(8.2) より n に対応するエネルギー固有値 E_n が

$$E_n = -\left(\frac{\hbar^2 a^2}{2m}\right)^{1/3} s_n \tag{8.6}$$

と得られる．漸近形 (8.5) から，

$$s_n \sim -\left(\frac{3\pi(4n-1)}{8}\right)^{2/3} \tag{8.7}$$

が，大きな n に対する s_n の漸近解である．