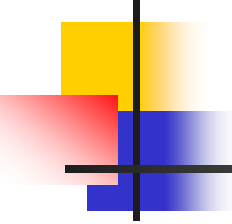


物理学, フーリエ級数, 行列の固有値問題

秋田高専 応用数学
成田 章



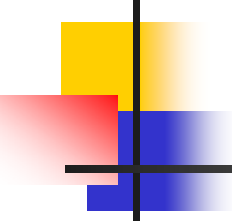
本校における応用数学

1) 本科(1～5年)

微分方程式, ベクトル解析, フーリエ解析,
複素関数論, ラプラス変換, 境界値問題,
確率・統計

2) 専攻科(本科卒業後2年間のコース)

線形代数, 微分方程式

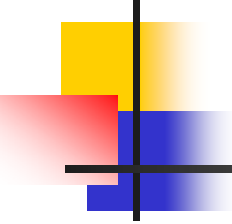


内 容

フーリエ級数, 行列の固有値問題
物理学で利用される例の紹介

固体物理学

固体中の電子の運動を取り上げる
(ただし, 簡単のため一次元結晶を考える)



Schrödinger方程式(電子に対する方程式)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad : \text{一次元}$$

m : 電子の質量

h : Plank定数 $\hbar = h / 2\pi$

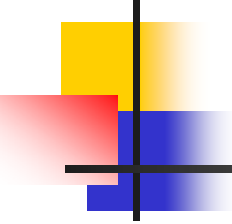
x : 電子の座標

$V(x)$: 周期的ポテンシャル(given)

$\psi(x)$: 電子の波動関数

E : 電子のエネルギー

求めるもの: $E, \psi(x)$



これを解くとわかる現象

電氣的性質

電気を伝えやすいもの, 伝えにくいものがある

これらの原因がわかる

(金属, 半導体, 絶縁体など)

量子力学が完成して直ぐにわかった(F. Bloch, 1928)

磁気, 光の吸収などの原因の一側面もわかる

例: 宝石は透明

一次元結晶

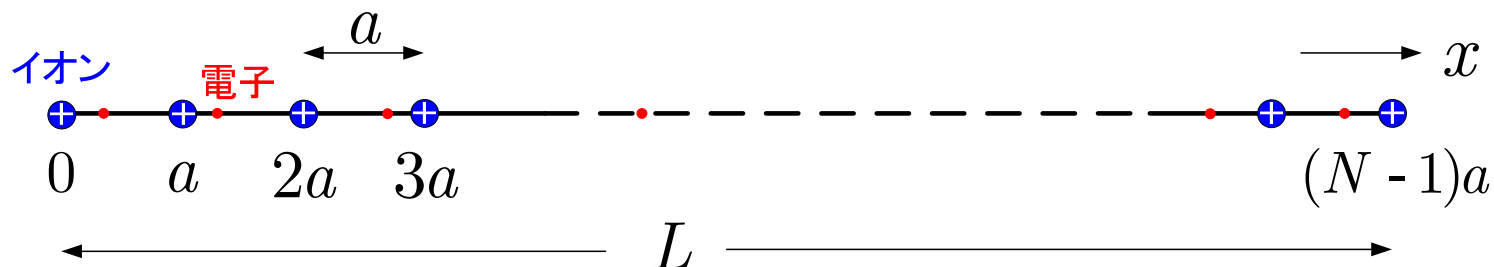
L : 結晶の長さ

a : 隣接イオン間の間隔 (格子定数)

ma : イオンの位置 (m : 整数)

N : イオンの個数 ($L = Na$)

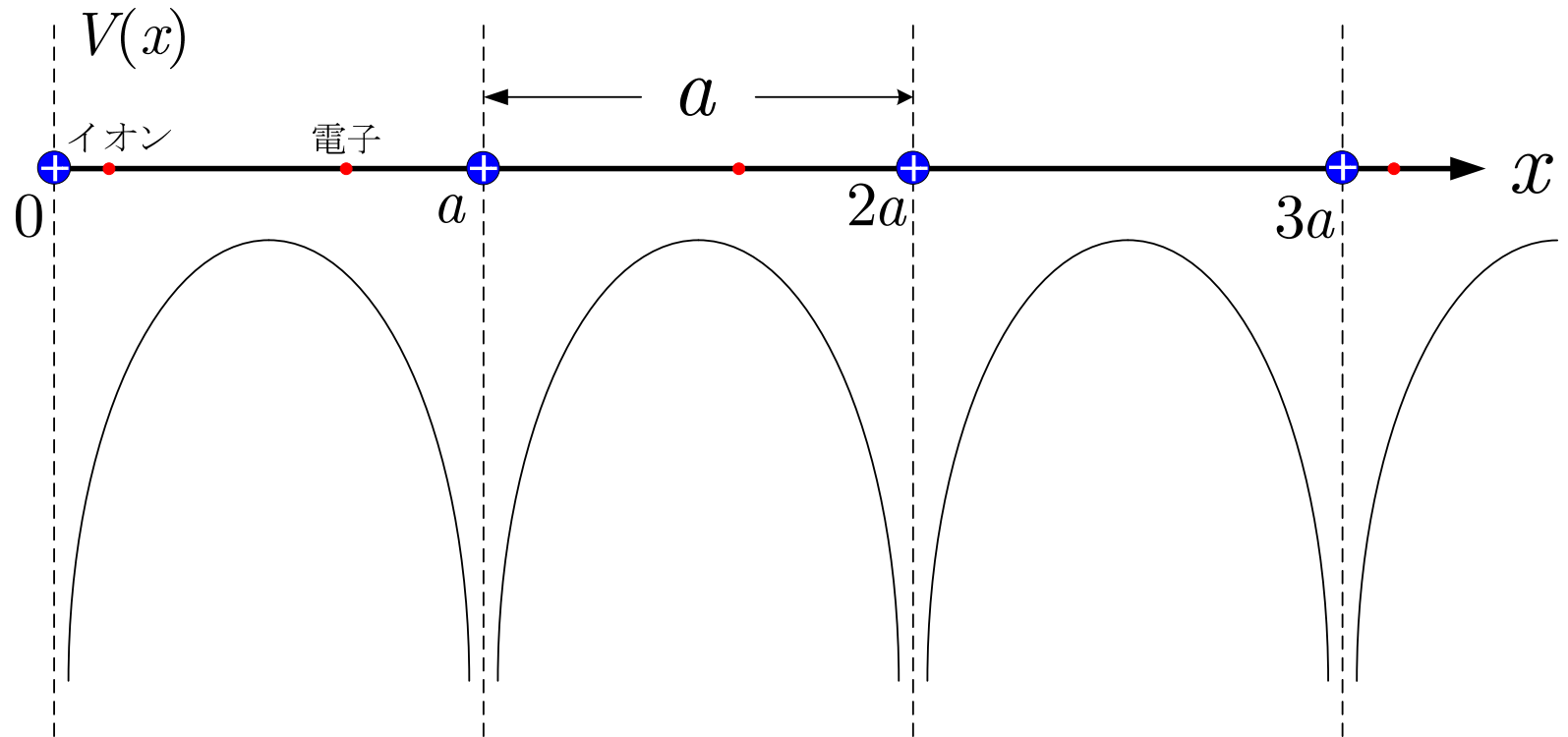
一次元結晶

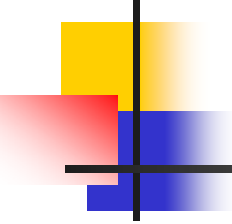


周期的ポテンシャル

$V(x)$: 周期的

$$V(x + ma) = V(x)$$



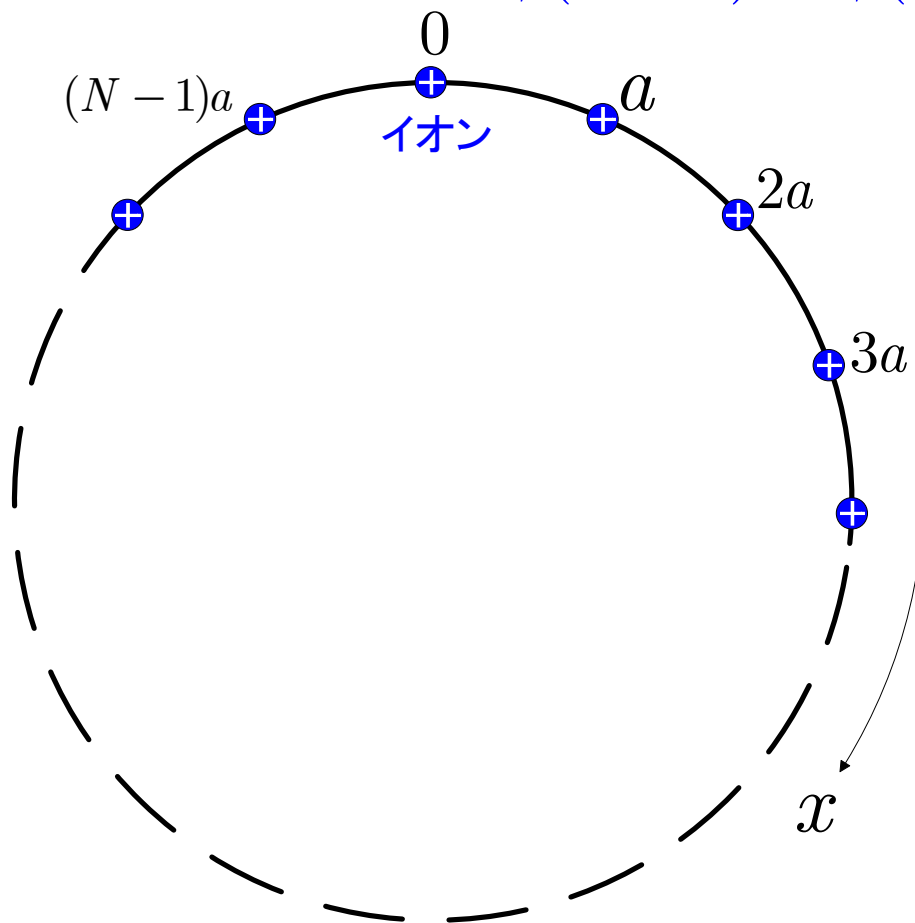


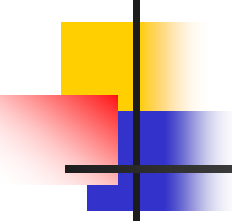
周期的境界条件: $\psi(x + L) = \psi(x)$

- イオンは円周上に等間隔で位置するのと等価
- 最初に E が決まる $\rightarrow$ 次に $\psi(x)$ が決まる
- E は離散値となる
- この微分方程式は固有値方程式

一 次 元 結 晶 ： 周 期 的 境 界 条 件

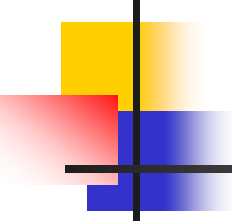
$$\psi(x + L) = \psi(x)$$





Schrödinger方程式の解法について

- 周期的 $V(x)$ を有する Schrödinger方程式に, 通常の微分方程式の解法を応用するのは困難
(変数係数のため級数解法 → 収束が問題)
例: $V(x) = 2V \cos(2\pi/a)x$ のときはMathieu方程式.
解はMathieu関数(特殊関数)
- 数値的に解かざるを得ないが, この微分方程式の形は数値解法には不向き



Blochの定理

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E \psi(x)$$

仮定: $V(x + ma) = V(x), \quad \psi(x + L) = \psi(x)$

結論1: $\psi(x + ma) = e^{ikma} \psi(x), \quad k = \frac{2\pi}{L} n$

結論2: $\psi(x) = e^{ikx} u(x), \quad u(x + ma) = u(x)$

Blochの定理の証明

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x)$$

置き換え: $x \rightarrow x + a$

$V(x)$ の周期性を利用

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x + a) = E\psi(x + a)$$

$$\therefore \psi(x + a) = C\psi(x)$$

$$\psi(x + Na) = C^N \psi(x)$$

周期的境界条件の仮定より

$$C^N = 1 = e^{i2\pi n}$$

$$\begin{aligned} \therefore C &= \exp\left(i \frac{2\pi n}{N}\right) = \exp\left(i \frac{2\pi n}{Na} a\right) \\ &= \exp\left(i \frac{2\pi n}{L} a\right) \end{aligned}$$

$$k = \frac{2\pi n}{L} \text{ とすると } C = e^{ika}$$

$$\therefore \psi(x + ma) = C^m \psi(x) = e^{ikma} \psi(x)$$

(Q.E.D.1)

結論1で $\psi(x) = e^{ikx} u(x)$ とおくと

$$e^{ik(x+ma)} u(x + ma) = e^{ikma} e^{ikx} u(x)$$

$$\therefore u(x + ma) = u(x)$$

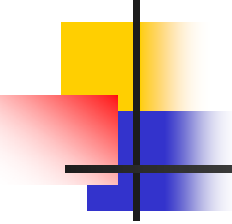
(Q.E.D.2)

$\psi_k(x)$: Bloch関数

$k (= \frac{2\pi}{L} n)$: 量子数

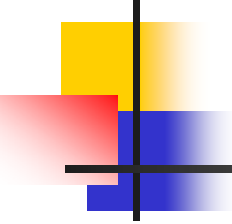
$$\psi_k(x + ma) = e^{ikma} \psi_k(x)$$

$$\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x)$$



群論の応用

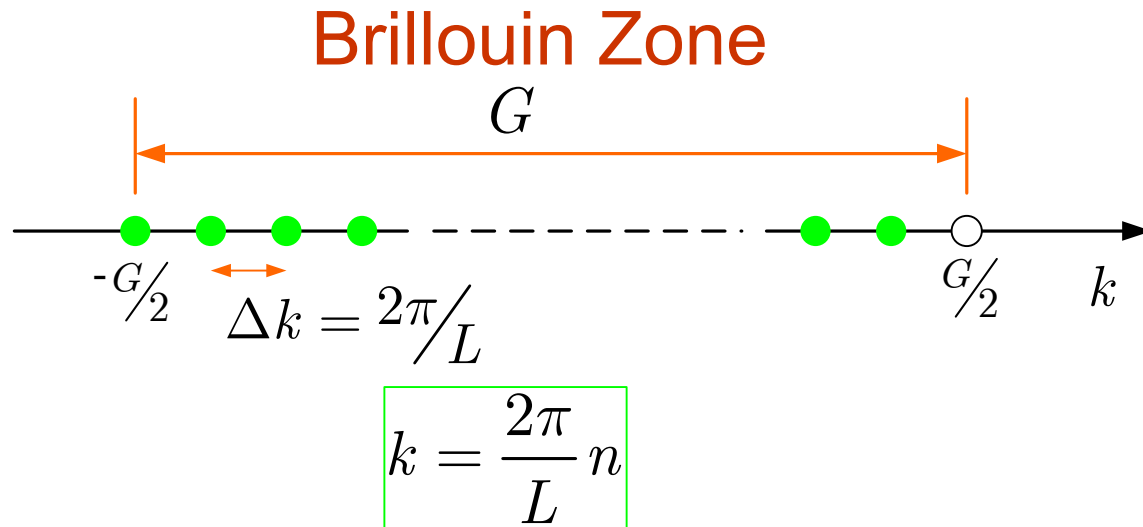
- 並進群: $\{T^m\} (m = 0, 1, \dots, N - 1)$ (Abel群)
- $T^m \psi_k(x) = \psi_k(x + ma)$
- k : 既約表現のなまえ, $\psi_k(x)$: 基底関数
- e^{ikma} : 表現行列 (一次元)
- 一次元表現が N 種類



ブリルアンゾーン (Brillouin zone)

- $G = 2\pi / a$
- $\psi_{k+nG}(x + ma) = e^{i(k+nG)ma} \psi_{k+nG}(x) = e^{ikma} \psi_{k+nG}(x)$
- $\psi_{k+nG}(x) = e^{i\alpha} \psi_k(x) (\alpha : \text{const.})$
- $\psi_{k+nG}(x)$ と $\psi_k(x)$ は同じ状態
-  独立な k の範囲: $-G/2 \leq k < G/2$

ブリルアンゾーン



B.Z. 内の k の個数: $\frac{G}{\frac{2\pi}{L}} = \frac{\frac{2\pi}{a}}{\frac{2\pi}{L}} = \frac{L}{a} = N$

Schrödinger方程式を変形：Blochの定理を利用

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x), \quad u_k(x+a) = u_k(x)$$

$u_k(x)$ をFourier級数に展開

$$u_k(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n(k) e^{iGnx} \quad (G = 2\pi/a)$$

$$\psi_k(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n(k) e^{i(k+Gn)x}$$

$\hbar(k + Gn)$: 運動量

周期的ポテンシャル $V(x)$ も
Fourier級数に展開

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_n e^{iGnx}$$

$$V_n = \frac{1}{a} \int_0^a e^{-iGnx} V(x) dx$$

$$V(x)^* = V(x) \Rightarrow V_n^* = V_{-n}$$

Schrödinger方程式に代入

→ $c_n(k)$ に対する方程式を得る

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} H_{nm} c_m(k) = E_k c_n(k)$$

$$H_{nm} = E_n(k) \delta_{nm} + V_{n-m}$$

$$E_n(k) = \frac{\hbar^2}{2m} (k + Gn)^2$$

行列の固有値問題

$$H_{nm} = E_n(k)\delta_{nm} + V_{n-m}$$

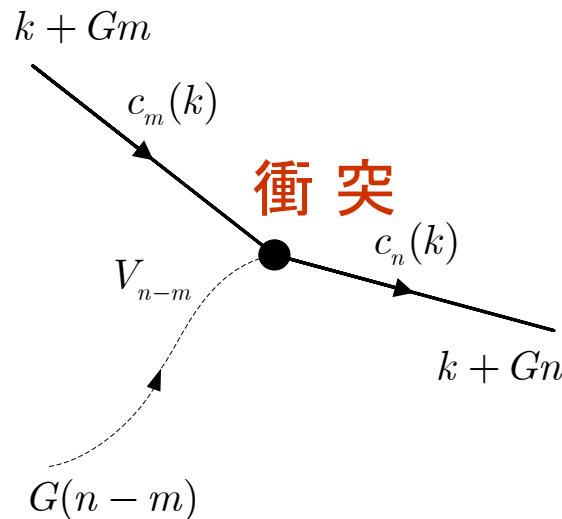
$$H = (H_{nm})$$

$${}^t\mathbf{c} = (\cdots, c_{-1}, c_0, c_1, \cdots)$$

$$H\mathbf{c} = \lambda\mathbf{c}$$

$\lambda (= E_k)$: 固有値

$\mathbf{c}$: 固有ベクトル

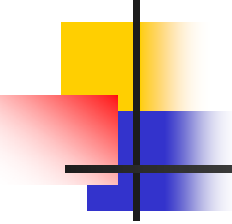


これは行列の固有値問題

H は無次元のHermite行列

固有値は E_k 実数でエネルギーを表す

固有ベクトル成分が $\psi_k(x)$ のFourier係数



量子力学

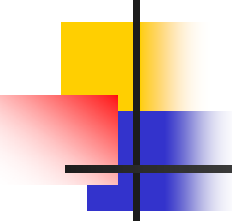
- 量子力学では

(Schrödinger方程式) = (行列の固有値問題)

基底関数の選び方が問題になる

基底は unitary 変換で関連

- 数値計算に適する(多くの方法が開発済み)



自由電子の極限

$$V(x) \rightarrow 0$$

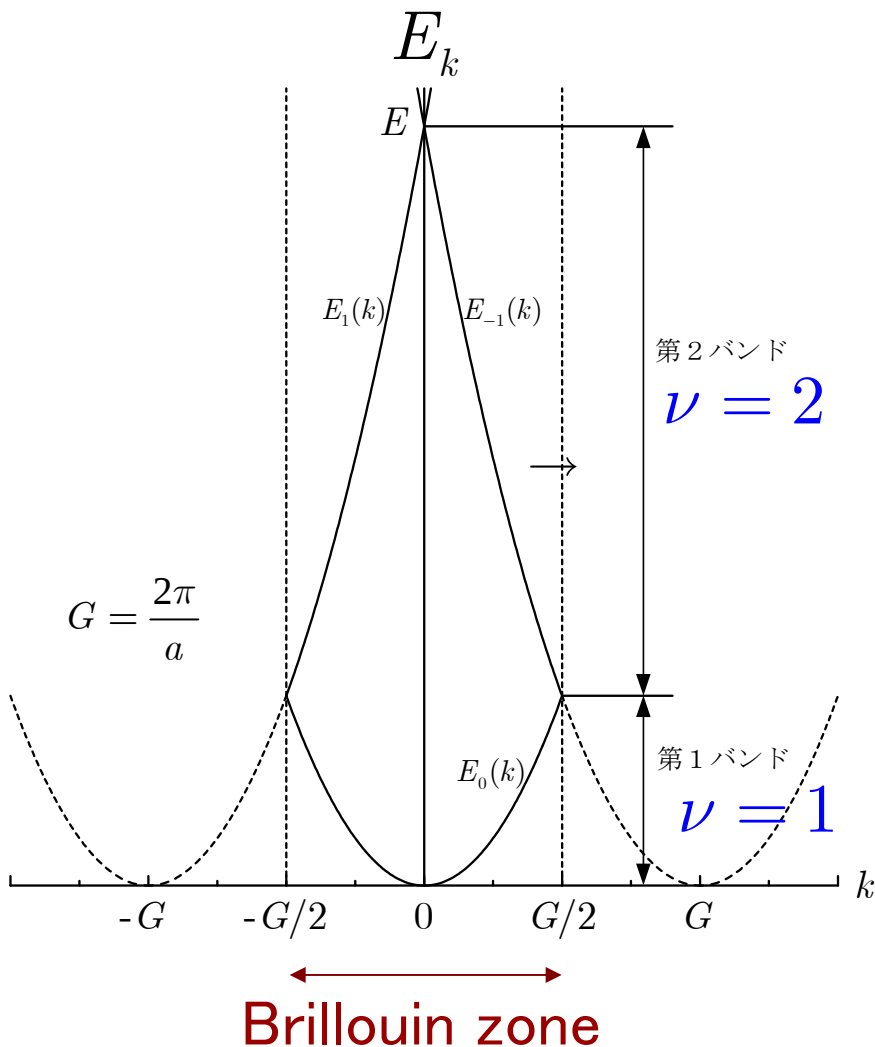
行列 H は対角形: $H_{nm} = E_n(k)\delta_{nm}$

この解は

$$E_k = E_n(k) = \frac{\hbar^2}{2m}(k + Gn)^2$$

$$c_m(k) = C\delta_{mn}$$

$$\psi_k(x) = Ce^{i(k+Gn)x} : 1つの平面波からなる$$



E_k のグラフは

k の多価関数



「バンド」を導入

$$E_k \rightarrow E_{\nu k}$$

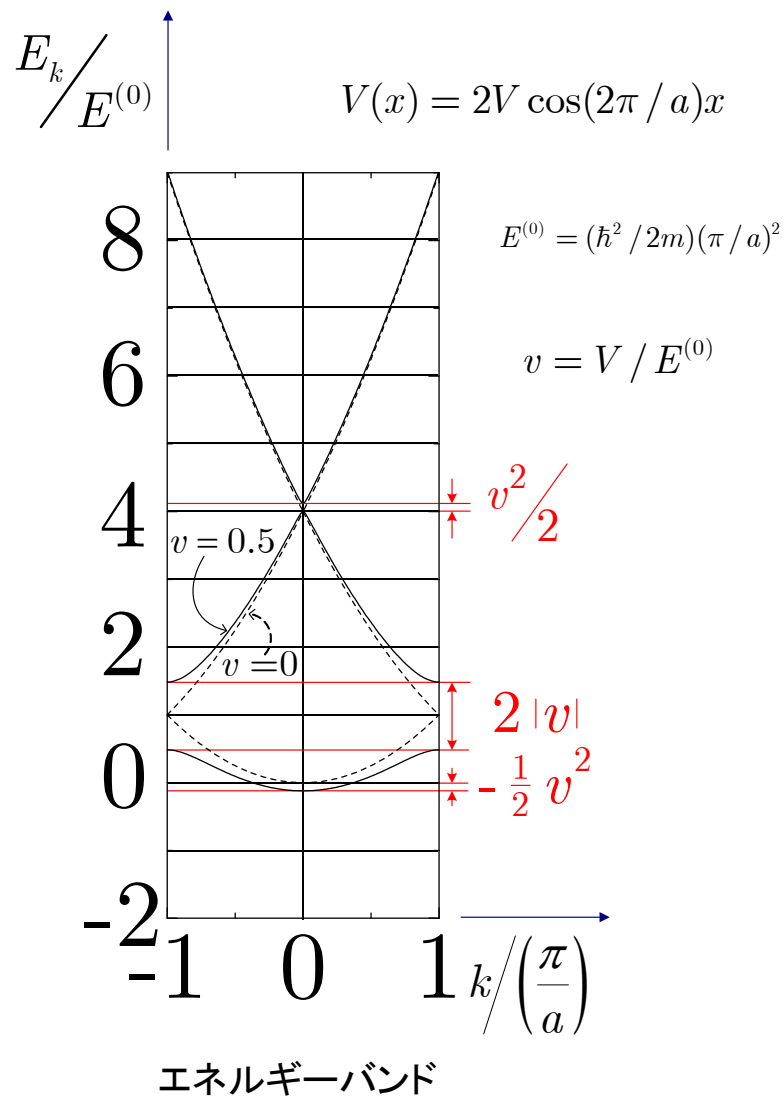
$$\psi_k(x) \rightarrow \psi_{\nu k}(x)$$

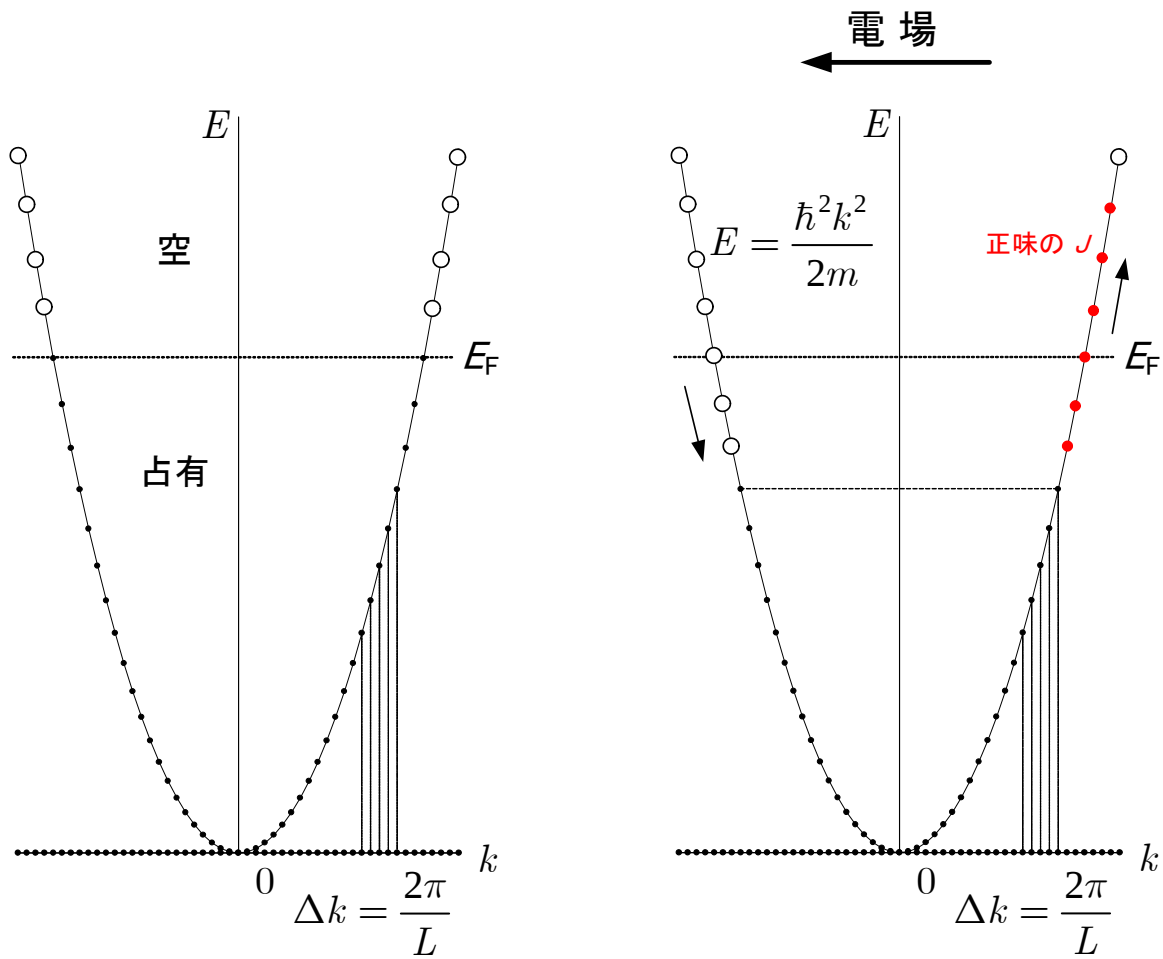
ν : バンドの番号

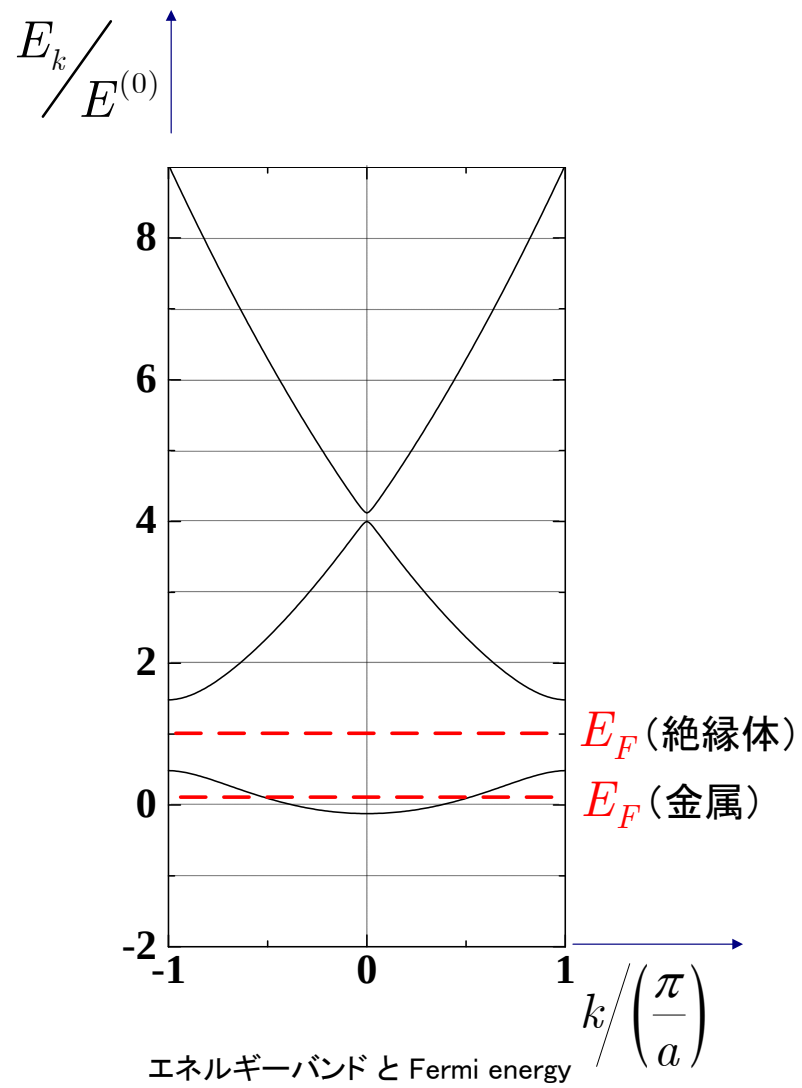
単純な周期ポテンシャル:

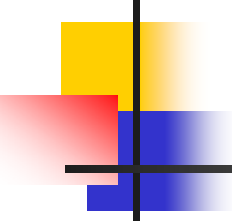
$$V(x) = 2V \cos(2\pi/a)x$$

行列の固有値方程式を
数值的に解いた結果









まとめ

- 波が顔を出したらフーリエ
周期的ならフーリエ級数
そうでないならフーリエ積分
- 境界値問題は行列の固有値問題に
繋がる;基底の選び方が重要