

質量を含んだSchrödinger方程式の境界条件

$$\frac{\hbar^2}{2m(x)} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = 2(V(x) - E)\psi(x)$$

$m(x)$ は $x_0 - h \sim x_0$ と $x_0 \sim x_0 + h$ の範囲で一定とし、
両辺を $x_0 - h$ から $x_0 + h$ の範囲で積分する

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m(x_0 + h)} \psi'(x_0 + h) - \frac{\hbar^2}{2m(x_0 - h)} \psi'(x_0 - h) &= \int_{x_0 - h}^{x_0 + h} (V(x) - E) \psi(x) dx \\ &= h[(V(x_0 + h) - E)\psi(x_0 + h) + (V(x_0 - h) - E)\psi(x_0 - h)] \\ &\sim h[V(x_0 + h) + V(x_0 - h)]\psi(x_0) \end{aligned}$$

最後の変形で、 x_0 において $\psi(x)$ が連続の条件を用いた。

さらに、 $[V(x_0 + h) + V(x_0 - h)]$ が $1/h$ よりも十分小さければ、 $h \Rightarrow 0$ で

$$m(x_0 + h)^{-1} \psi'(x_0 + h) = m(x_0 - h)^{-1} \psi'(x_0 - h)$$

有限の井戸型ポテンシャルでは $h \Rightarrow 0$ で $hV_0 \Rightarrow 0$ であるから、
一次微分も x_0 で連続である必要がある。

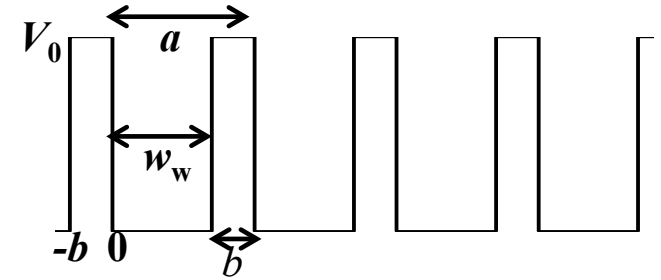
バンド理論: Kronig-Penneyモデル

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \phi = E\phi \text{ の解}$$

$$\phi_k(x) = \exp(ikx)u(x), u(x+a) = u(x)$$

$$\text{井戸内: } \phi(x) = A \exp(i\alpha x) + B \exp(-i\alpha x) \quad \alpha = \sqrt{2mE} / \hbar$$

$$\text{障壁内: } \phi(x) = C \exp(\beta x) + D \exp(-\beta x) \quad \beta = \sqrt{2m(V_0 - E)} / \hbar$$



井戸－障壁での境界条件: $x = 0, -b$ で $\phi_k(x), \phi_k'(x)$ が連続

Blochの定理

$$: \phi_k(x + a) = \lambda \phi_k(x), \lambda = \exp(ika)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ i\alpha & -i\alpha & -\beta & \beta \\ \exp(i\alpha w_w) & \exp(-i\alpha w_w) & -\lambda \exp(-\beta b) & -\lambda \exp(\beta b) \\ i\alpha \exp(i\alpha w_w) & -i\alpha \exp(-i\alpha w_w) & -\beta \lambda \exp(-\beta b) & \beta \lambda \exp(\beta b) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

左辺の行列の行列式が 0 になる必要がある

$$\cos ka = \left(\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \sin \alpha w_w \sinh \beta b + \cos \alpha w_w \cosh \beta b \right)$$

bV_0 が一定の条件で $b \Rightarrow 0$ の近似を取ると

$$\cos ka = \left(\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha} b \sin \alpha a + \cos \alpha a \right) \quad \longrightarrow \quad \cos ka = \left(\frac{mV_0}{\hbar^2} \frac{b}{2\alpha} \sin \alpha a + \cos \alpha a \right)$$

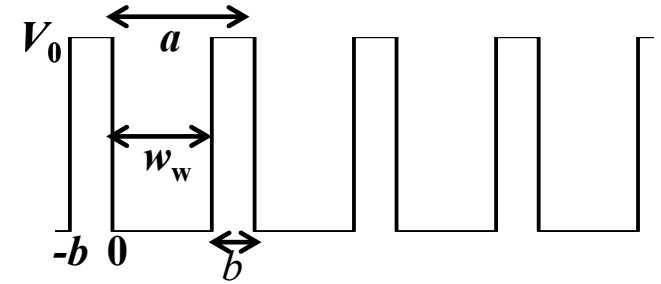
バンド理論: Kronig-Penneyモデル

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \phi = E\phi \text{ の解}$$

$$\phi_k(x) = \exp(ikx)u(x), u(x+a) = u(x)$$

$$\text{井戸内: } \phi(x) = A \exp(i\alpha x) + B \exp(-i\alpha x) \quad \alpha = \sqrt{2mE} / \hbar$$

$$\text{障壁内: } \phi(x) = C \exp(\beta x) + D \exp(-\beta x) \quad \beta = \sqrt{2m(V_0 - E)} / \hbar$$



$$\lambda = \exp(ika)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ i\alpha & -i\alpha & -\beta & \beta \\ \exp(i\alpha w_w) & \exp(-i\alpha w_w) & -\lambda \exp(-\beta b) & -\lambda \exp(\beta b) \\ i\alpha \exp(i\alpha w_w) & -i\alpha \exp(-i\alpha w_w) & -\beta \lambda \exp(-\beta b) & \beta \lambda \exp(\beta b) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

例えば $A = 1$ として

$$\begin{pmatrix} -i\alpha & -\beta & \beta \\ \exp(-i\alpha w_w) & -\lambda \exp(-\beta b) & -\lambda \exp(\beta b) \\ -i\alpha \exp(-i\alpha w_w) & -\beta \lambda \exp(-\beta b) & \beta \lambda \exp(\beta b) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i\alpha A \\ -\exp(i\alpha w_w) A \\ -i\alpha \exp(i\alpha w_w) A \end{pmatrix}$$

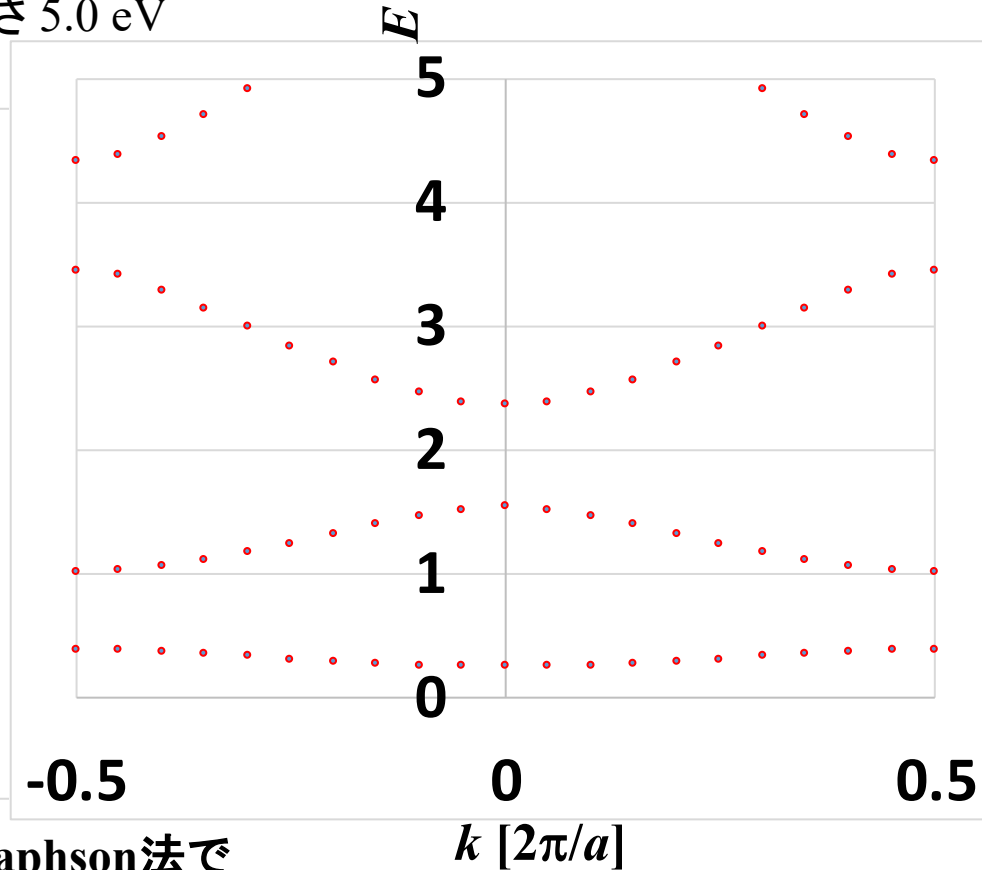
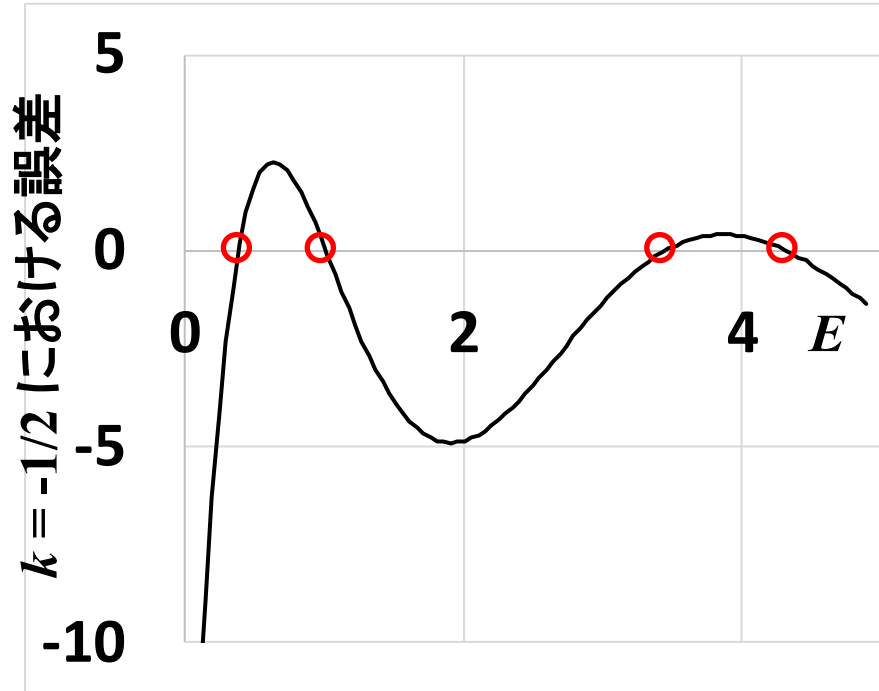
を解いて B, C, D を得る

Kronig-Penney方程式の解法

$$\Delta = -\left(\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \sin \alpha w_w \sinh \beta b + \cos \alpha w_w \cosh \beta b\right) + \cos ka$$

周期 $a = 1$ nm, 障壁厚さ 0.1 nm, 障壁高さ 5.0 eV

有効質量 m_e , $k = (2\pi/a)[-1/2, 1/2]$



左図から求めた近似値

0.3675

1.0045

3.4545

4.3365

Newton-Raphson法で
誤差 10^{-10} で計算

0.3934

1.0244

3.4585

4.3345

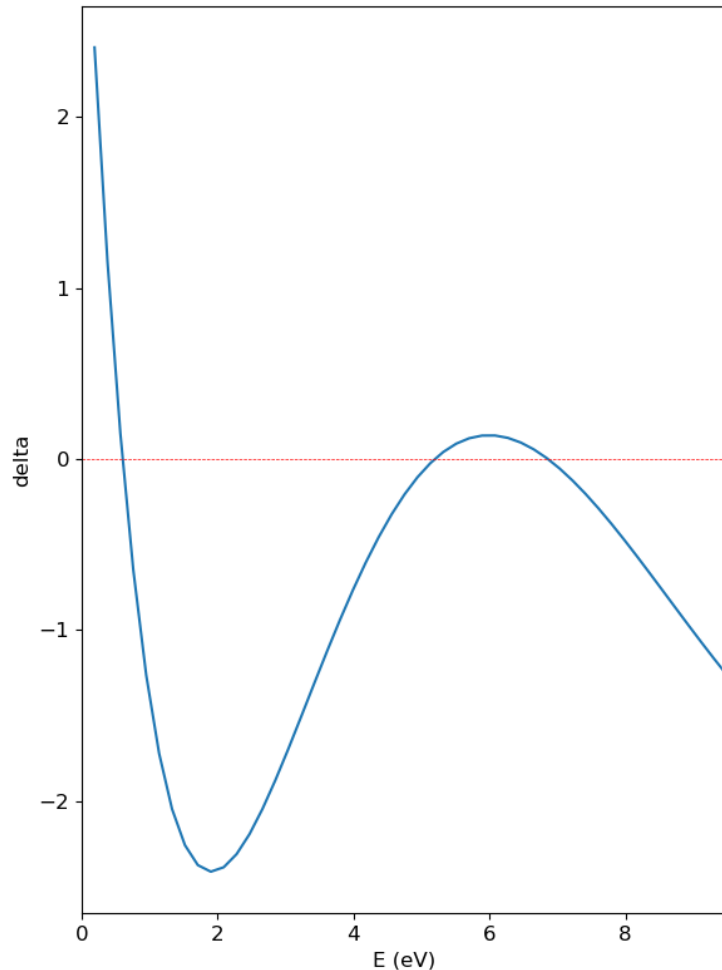
プログラム: Kronig-Penneyモデル

kronig_penney.py

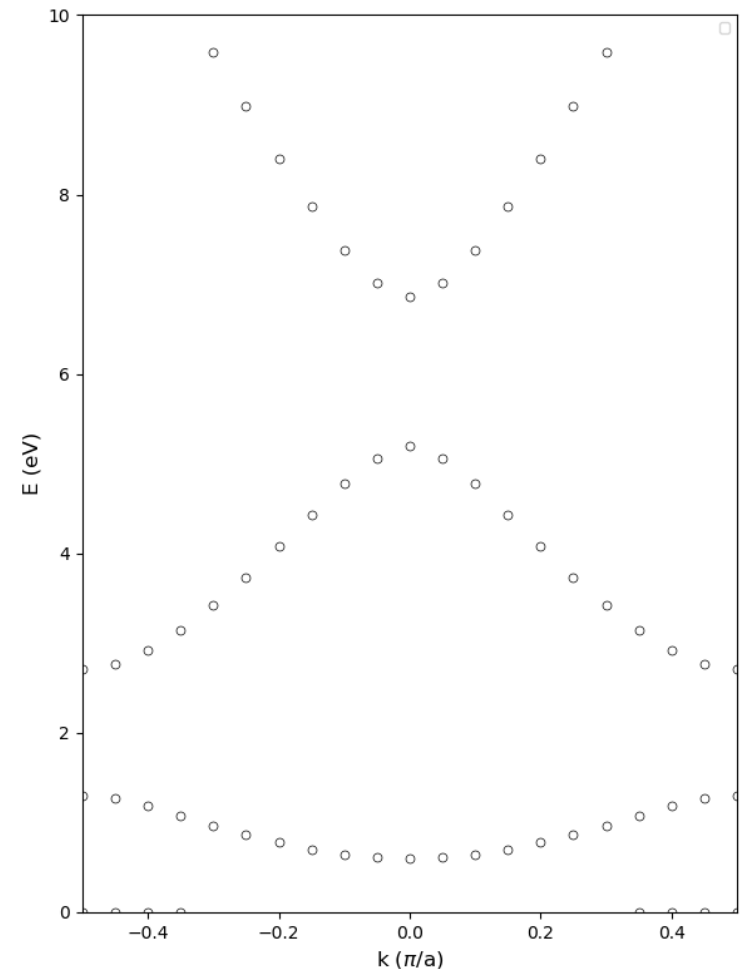
Si の格子定数 $a = 5.4064 \text{ \AA}$ $m^* = 1.0m_e$

障壁幅 $0.5 \text{ \AA}$ 障壁高さ 10.0 eV

python kronig_penney.py



python kronig_penney.py band



プログラム: Kronig-Penneyモデル

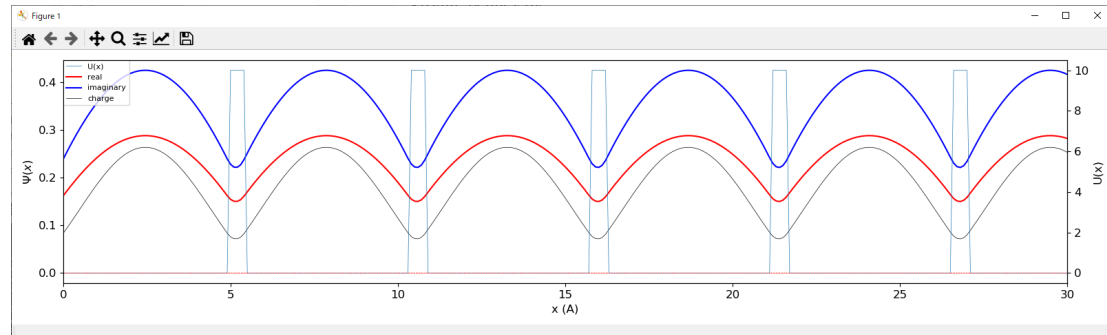
kronig_penney.py

Si の格子定数 $a = 5.4064 \text{ \AA}$ $m^* = 1.0m_e$

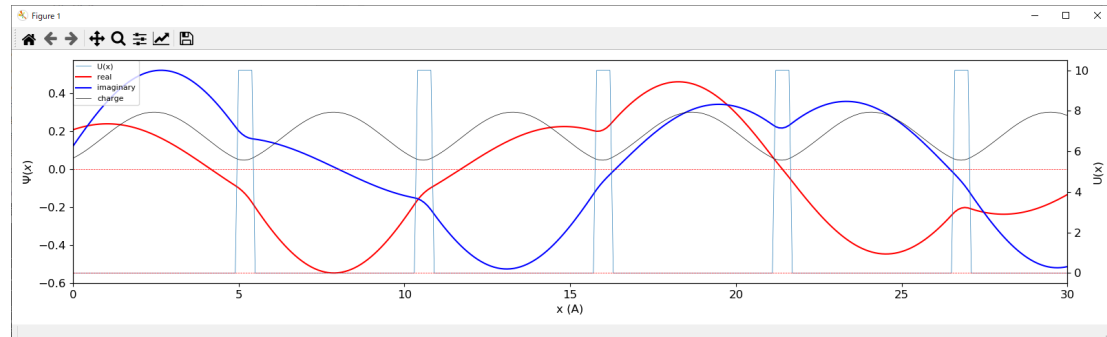
障壁幅 $0.5 \text{ \AA}$ 障壁高さ 10.0 eV

python kronig_penney.py wf 5.4064 0.5 10.0 **k** 0 0.0 16.2192 101

$k = 0$



$k = 0.3$



$k = 0.5$

