i-PERC
電気通信大学

基礎電子工学CH-3

曽我部　東馬

電気通信大学
i-パワードエネルギーシステム研究センター(i-PERC）

概要:

- 波動関数とは何？　波動関数は波の表現か、それとも？
- 確率波とは何？　導入する意味はどこにあるか？
- 二重スリット実験　Vs　一重スリット実験:何がわかる？
- ポテンシャルがある場合のシュレーディンガー方程式の導入:
- 1次元の無限に高い井戸型ポテンシャルのシュレーディンガー方程式の解:

波動関数Ψは何？

古典の波動方程式

$$w\frac{\partial U(x,t)}{\partial t} = k^2\frac{\partial^2 U(x,t)}{\partial x^2}$$

古典の拡散方程式

$$\frac{1}{\tau}\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = \kappa_b T\frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial x^2}$$

シュレーディンガー方程式

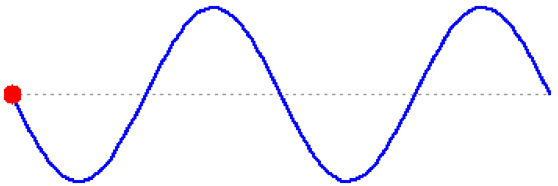
$$i\hbar\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}$$

方程式の類似性：

古典の波動方程式

$$w\frac{\partial U(x,t)}{\partial t} = k^2\frac{\partial^2 U(x,t)}{\partial x^2}$$

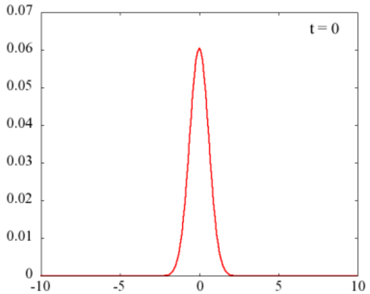
Uの物理的な意味は波



古典の拡散方程式

$$\frac{1}{\tau}\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = \kappa_b T\frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial x^2}$$

fの物理的な意味は粒子数の分布



シュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}$$

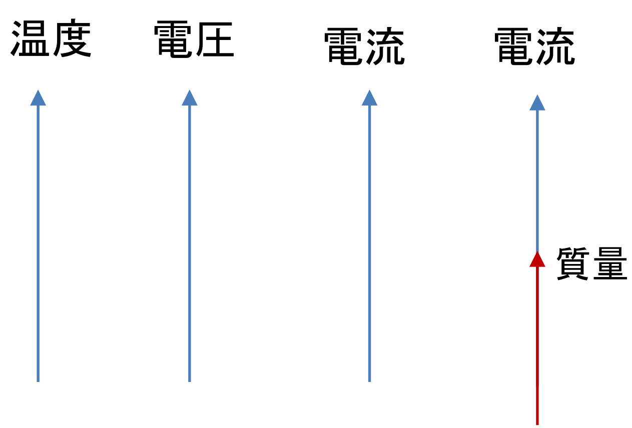
Ψとは何？

波動関数Ψの説明が難しい原因

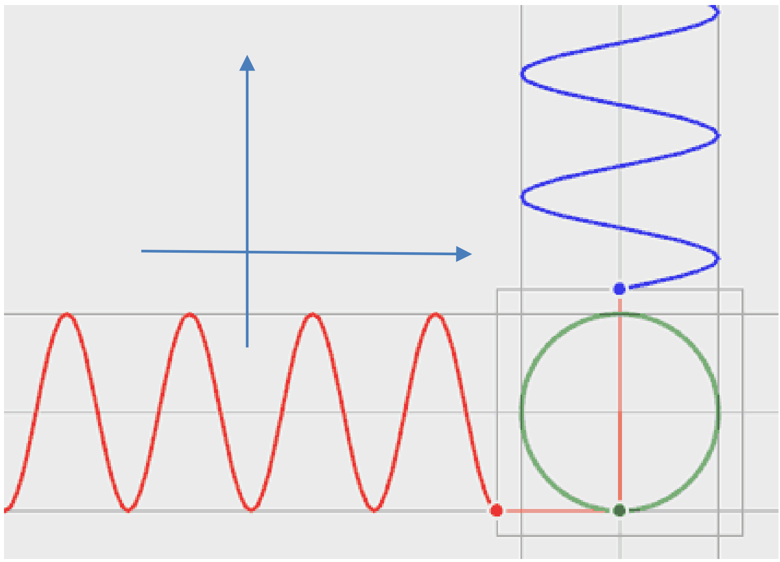
$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}$$

物理表現は1次元である

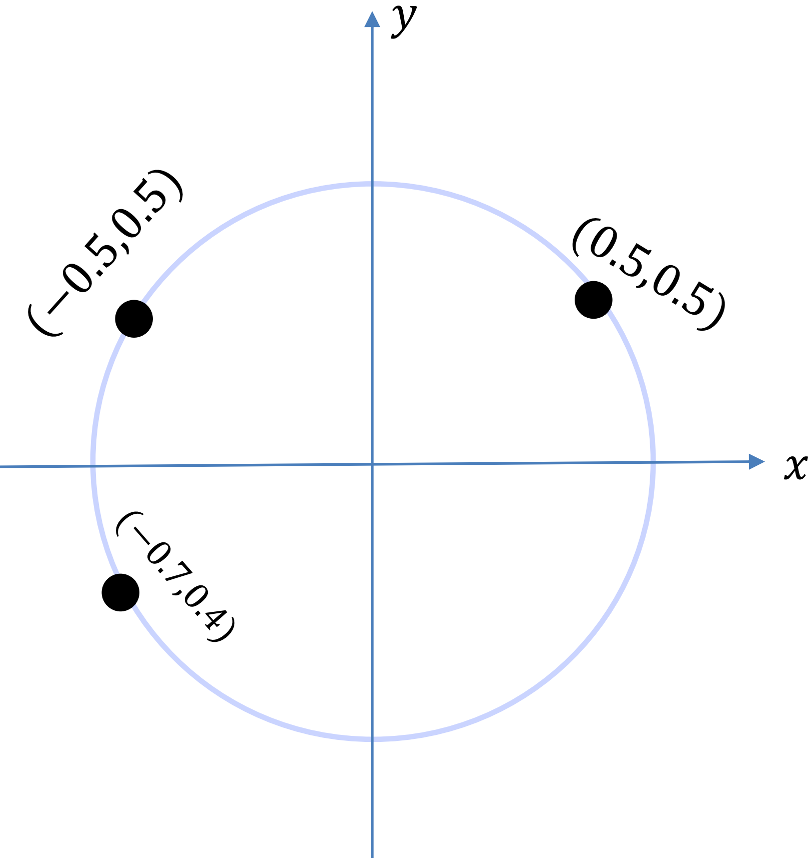
物理量は必ず1次元の表現が必須になる。速度、距離、粒子数、圧力、温度、気圧、質量、エネルギー、電圧、電流

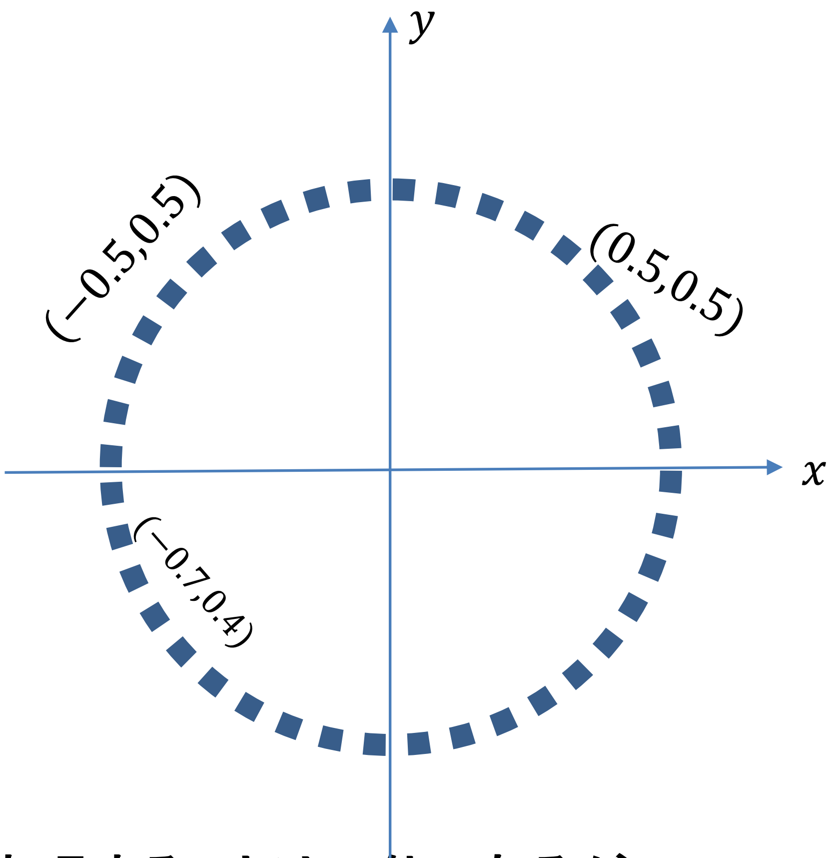


Ψは2次元の表現が必須



円を描像しましょう:

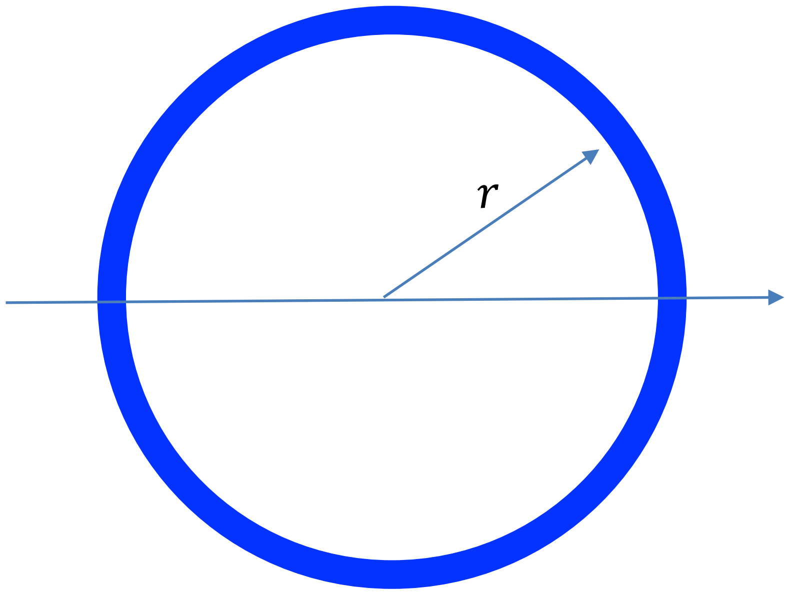




円を描像する場合、座標(x, y)を用いて表現することは可能であるが、
円の全体を表現するために、無限の座標情報が必要になる。

座標情報を使って円を完全に表現することは、不可能である

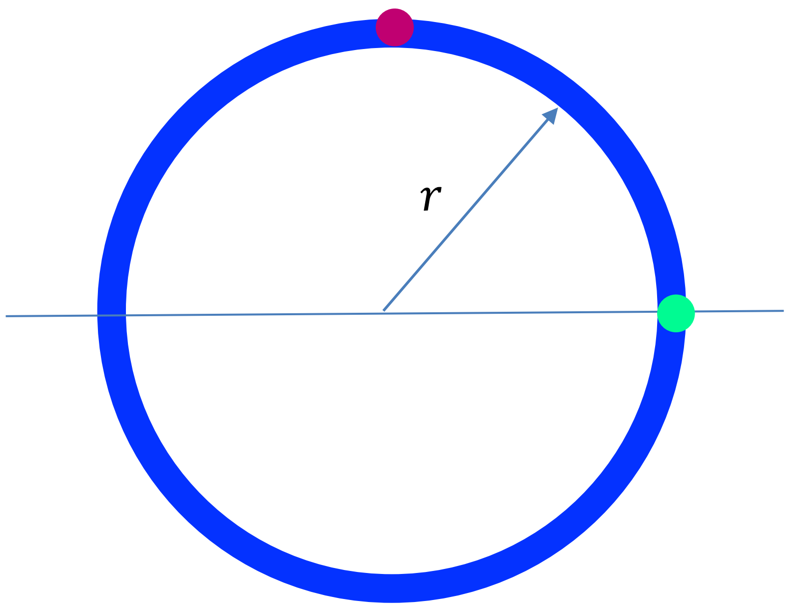
半径を使用して円を描像する:

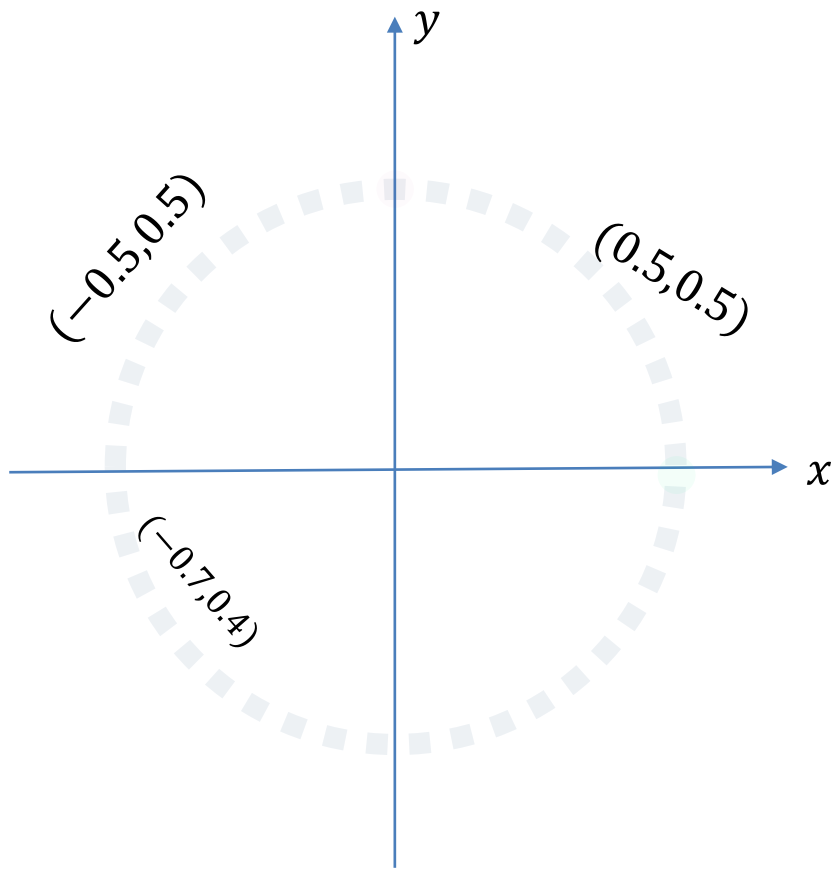


一つの円が一つの半径に対応している

半径は**円**を表現するための**物理量**である

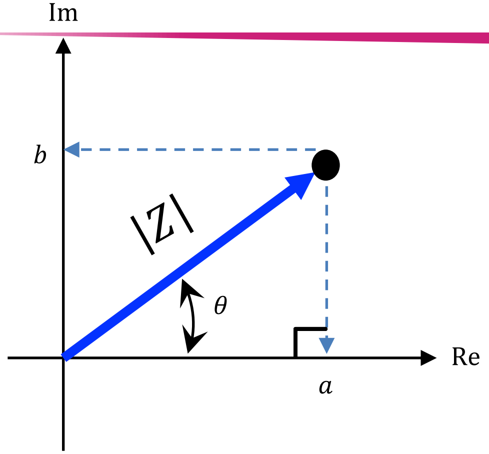
半径を使用して円を描像する:





半径で円を表現すると、円を構成した座標（X,Y）の具体的情報は‘消失’する

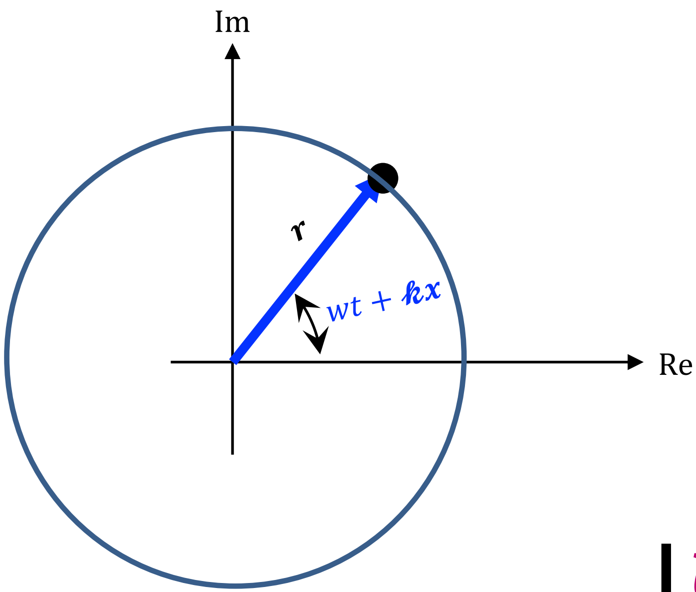
波動関数をどう描像する:複素数の大きさ： $|Z|$



一般複素数

$$z = a + ib = |Z|e^{i\theta}$$

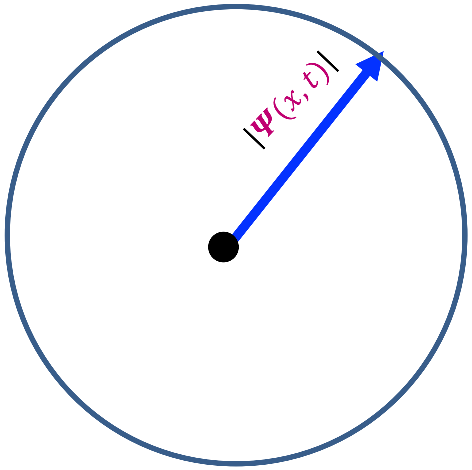
波動関数



$$\Psi(x,t) = re^{i(wt+kx)}$$

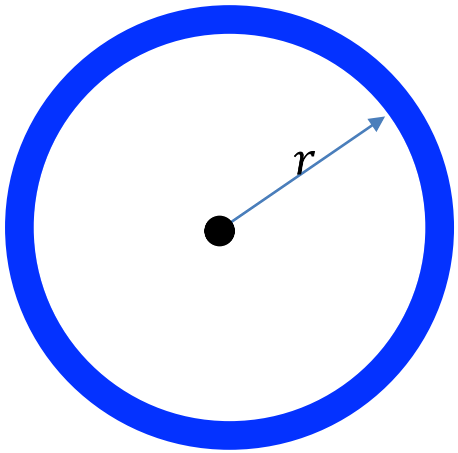
$$r = |\Psi(x,t)|$$

$|\Psi(x,t)|^2$: 確率波



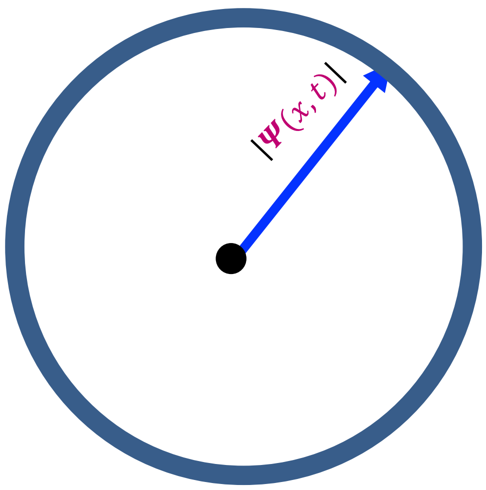
波動関数(複素数）の大きさ： $|\boldsymbol{\Psi}(x,t)|$

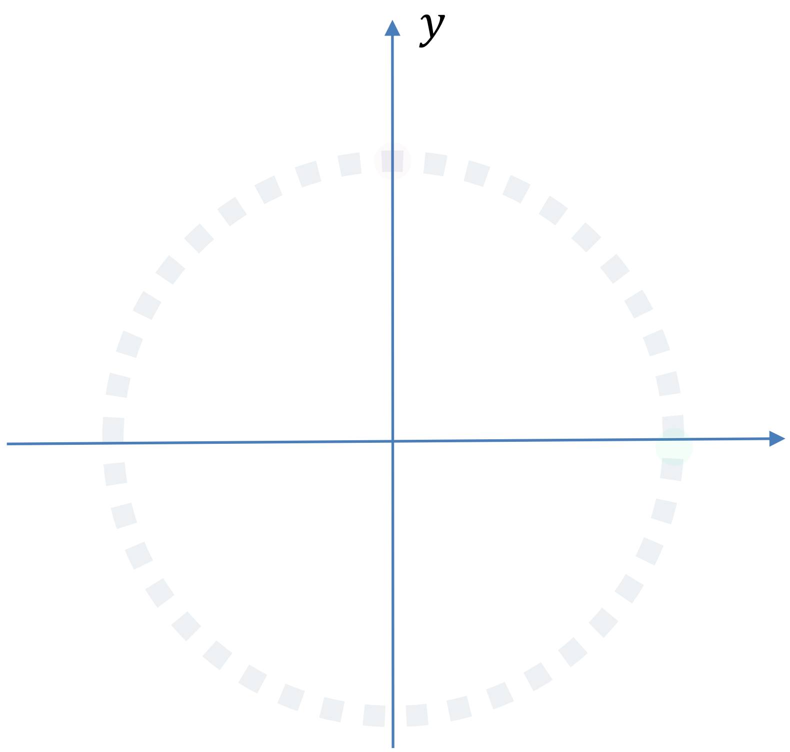
$|\boldsymbol{\Psi}(x,t)|^2$: 確率波



半径を使って円を表す

$|\Psi(x,t)|^2$: 確率波





確率波を使って波を表現すると、**波を構成する具体的位置情報が‘消失’する**

確率波派と波派の戦い

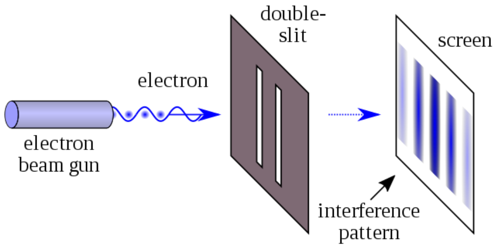
確率波派　$P(a)$

ボルン

ボーア

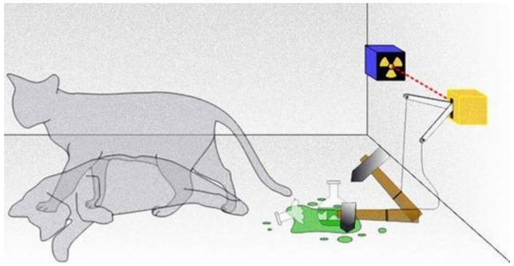
ハイゼンベルグ

ディラック

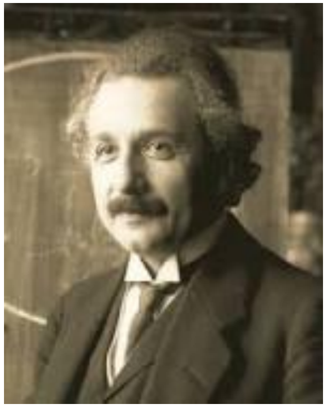


波派

シュレーディンガー



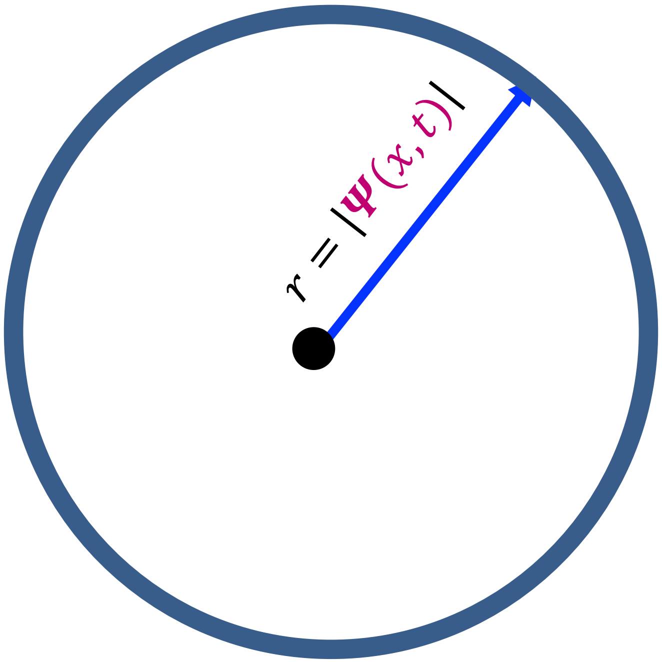
確率変数派



アインシュタイン

$$P(a) = \int P(a, h) dh$$

僕はどちらの味方：



二元要素を持つ円を表現するために、半径を使って表現したほうが自然！

二元要素を持つ波動関数を表現するために、波動関数の大きさ（半径）を使って表現したほうが自然！

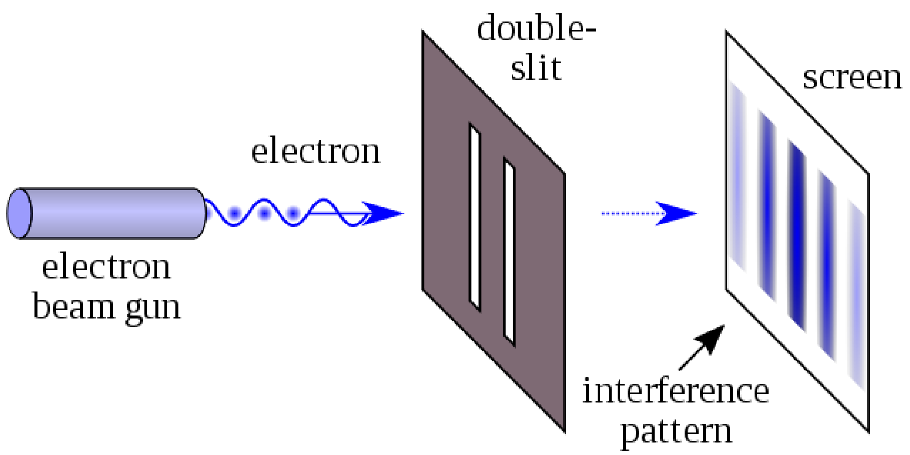
波動関数の大きさ$|\boldsymbol{\Psi}(x,t)|$を使った**確率波**$|\boldsymbol{\Psi}(x,t)|^2$表現のほうが

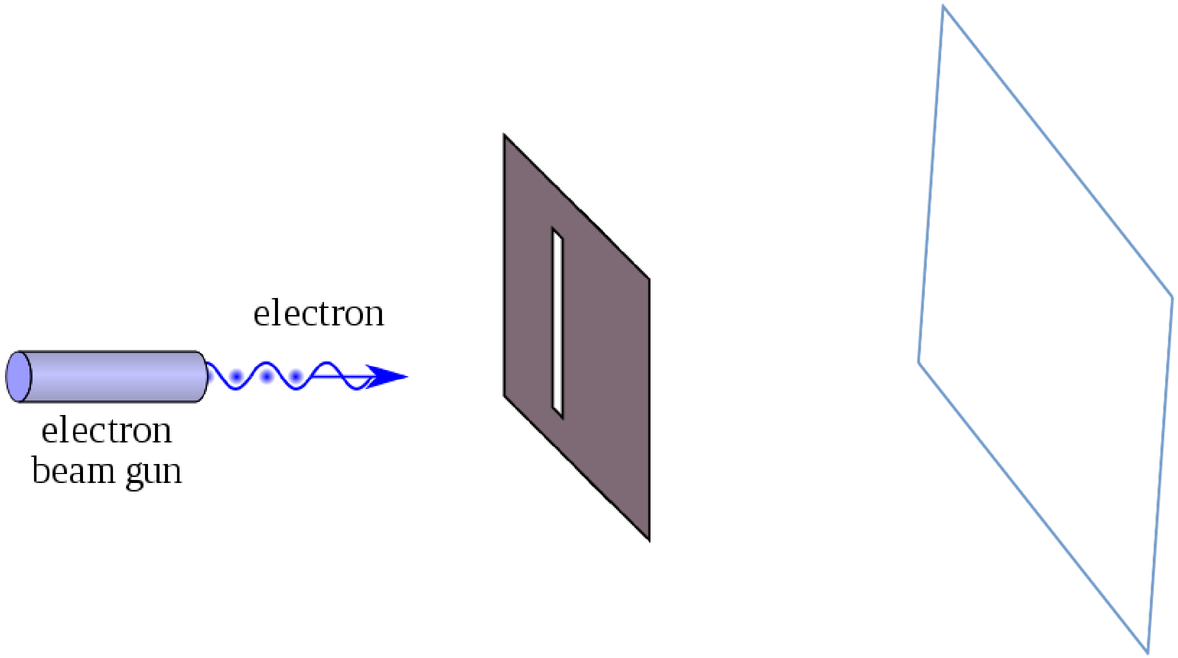
より適切だ！

電子2重スリット実験

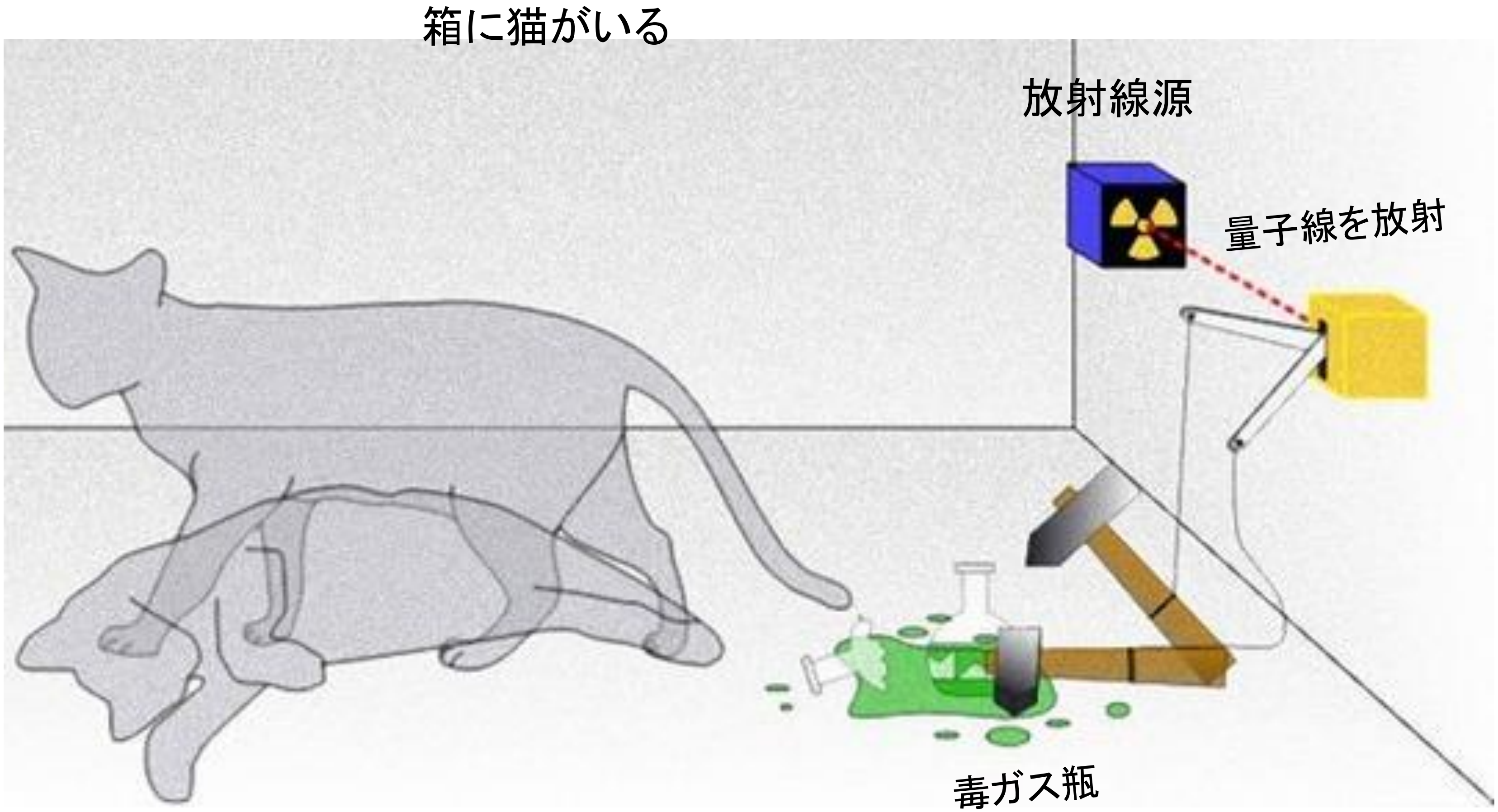
（思考実験→実験（1961)→外村（日立）

電子単重スリット実験


double-
slit
screen
electron
electron
beam gun
interference
pattern


electron
electron
beam gun

シュレーディンガーの猫（思考実験）



「蓋をあける前に猫が生きていると同時に死んでいる」ということである（ありえない）→シュレーディンガーの確率波派に対する反撃。

時間に依存しないシュレーディンガー方程式

自由電子シュレーディンガー方程式

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + \frac{8\pi^2 m}{\boldsymbol{h}^2} \boldsymbol{E} \Psi(x) = 0$$

自由電子ではないシュレーディンガー方程式

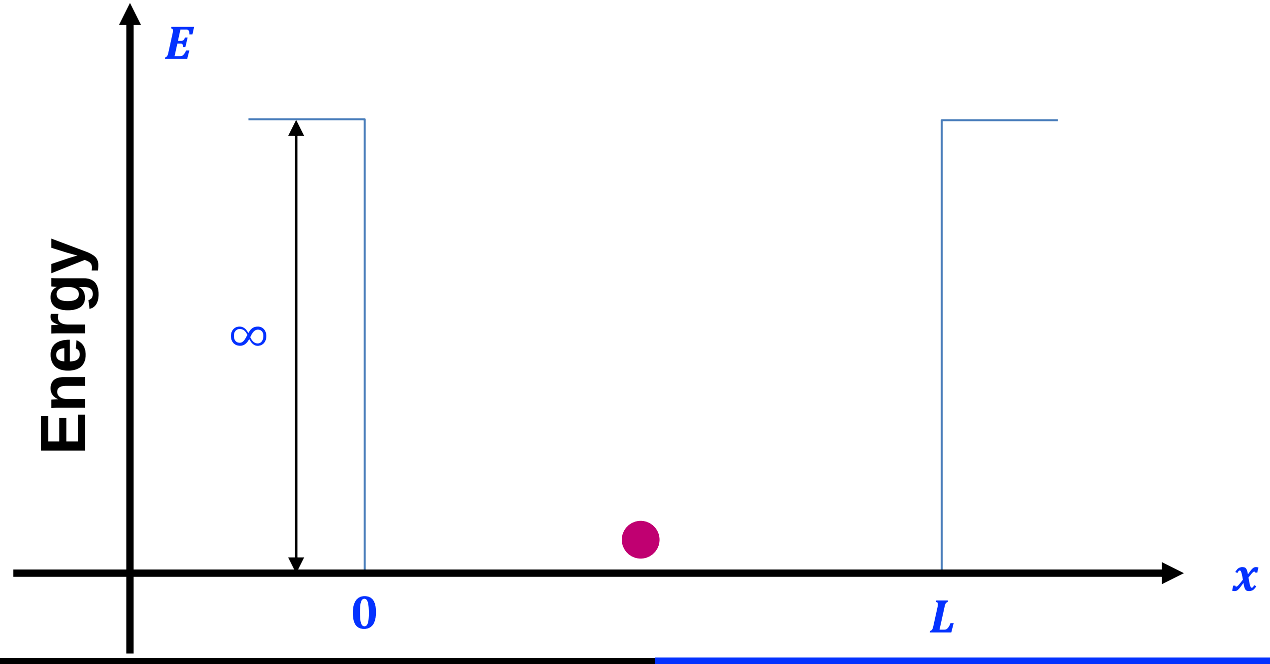
$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + \frac{8\pi^2 m}{\boldsymbol{h}^2} (\boldsymbol{E} - \boldsymbol{V}) \Psi(x) = 0$$

$\boldsymbol{E}$: 運動エネルギー　　$\boldsymbol{V}$: ポテンシャル

ゾンマーフェルトモデル　(Sommerfeld model)

電子は金属内では自由電子である。空気が絶縁体なので、電子が金属棒から出ることはできないようになっている

空気が絶縁体であること、すなわち、金属とポテンシャルもバリア高さは ∞



電子は$0 \leq x \leq L$　の範囲では、　$V = 0$

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - V)\Psi(x) = 0$$

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}E\Psi(x) = 0$$

電子は$x \geq L, x \leq 0$　の範囲では、$V = \infty$

電子の存在確率は0である

$$\Psi(x) = 0 \qquad \Psi(0) = 0 \qquad \Psi(L) = 0$$

境界条件は物理の描像を変える

連続条件が成立するため、**電子は$0 \le x \le L$の範囲では、$\mathbf{V = 0}$**
であるとともに、$\Psi(0) = 0$ と$\Psi(L) = 0$という境界条件が成り立たないといけません。

解く問題

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + \dfrac{8\pi^2 m}{\boldsymbol{h}^2}(\boldsymbol{E} - \overset{V=0}{V})\Psi(x) = 0 \\ \\ \Psi(0) = 0 \quad \Psi(L) = 0 \end{cases}$$

計算方法：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2} + \dfrac{8\pi^2 m}{\boldsymbol{h}^2}(\boldsymbol{E})\Psi(x) = 0 \\ \Psi(0) = 0 \quad \Psi(L) = 0 \end{cases}$$

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} + Dy = 0 \qquad y = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

一般解： $\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

計算方法：

$$\begin{cases} \Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ \Psi(0) = 0 \quad \Psi(L) = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} A + B = 0 \rightarrow B = -A \\ Ae^{ikL} + Be^{-ikL} = 0 \end{cases}$$

$$Ae^{ikL} - Ae^{-ikL}$$

$$2A\sin(kL) = 0 \qquad 2A = C$$

計算方法：

$$2A\sin(kL) = 0 \qquad kL = n\pi$$

$$\begin{cases} \boldsymbol{k = \dfrac{n\pi}{L}} \\ B = -A \end{cases}$$

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$\Psi(x) = C\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

計算方法：

$$\Psi(x)=C sin(\frac{n\pi}{L}x)$$

$$\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2}+\frac{8\pi^2 m}{\boldsymbol{h}^2}(\boldsymbol{E})\Psi(x)=0$$

$$\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2}=-(\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 C\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)=-\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2\Psi(x)$$

$$-\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2\Psi(x)+\frac{8\pi^2 m}{\boldsymbol{h}^2}(\boldsymbol{E})\Psi(x)=0$$

$$-\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2+\frac{8\pi^2 m}{\boldsymbol{h}^2}(\boldsymbol{E})=0$$

$$\boldsymbol{E}=\frac{\boldsymbol{h}^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{\boldsymbol{n\pi}}{\boldsymbol{L}}\right)^2$$

確率波解釈の役割

$\Psi(x)=2A sin(\frac{n\pi}{L}x)$　　Aをどうやって決めるか？

$$\int_0^L |\Psi(x)|^2 = 1 \qquad \boldsymbol{C = \sqrt{\frac{2}{L}}}$$

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} sin(\frac{n\pi}{L}x)$$

エネルギーの離散化：量子準位

$$E=\frac{h^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \quad L=3nm \quad m\text{: 自由電子の質量}$$

$$E_1=\frac{h^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{1\pi}{L}\right)^2$$

$$E_1=\frac{(6.6*10^{-34})^2}{8*3.14^2*9.11*10^{-31}}\left(\frac{3.14}{3*10^{-9}}\right)^2=6.6*10^{-21}J$$

$$E_1=\frac{6.6*10^{-21}J}{1.6*10^{-19}}=0.041eV$$

$$E_2=\frac{h^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2$$

$$E_2=0.041*4=0.164eV$$

$$E_3=\frac{h^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{3\pi}{L}\right)^2$$

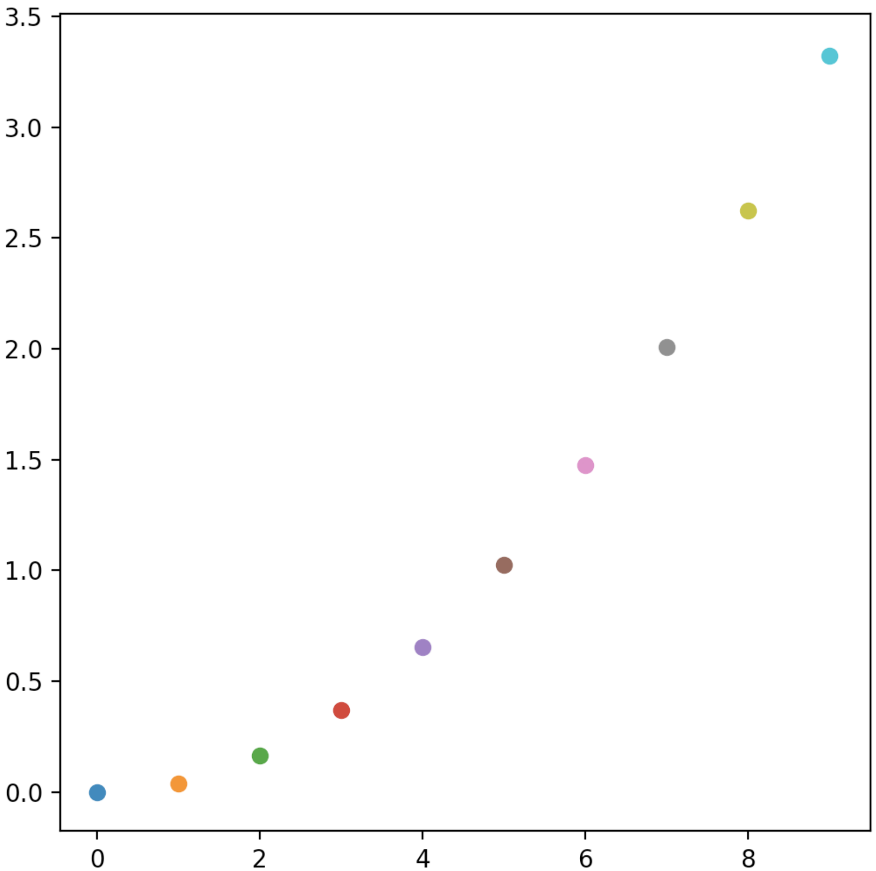
$$E_3=0.041*9=0.369eV$$

$$E_4=\frac{h^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{4\pi}{L}\right)^2$$

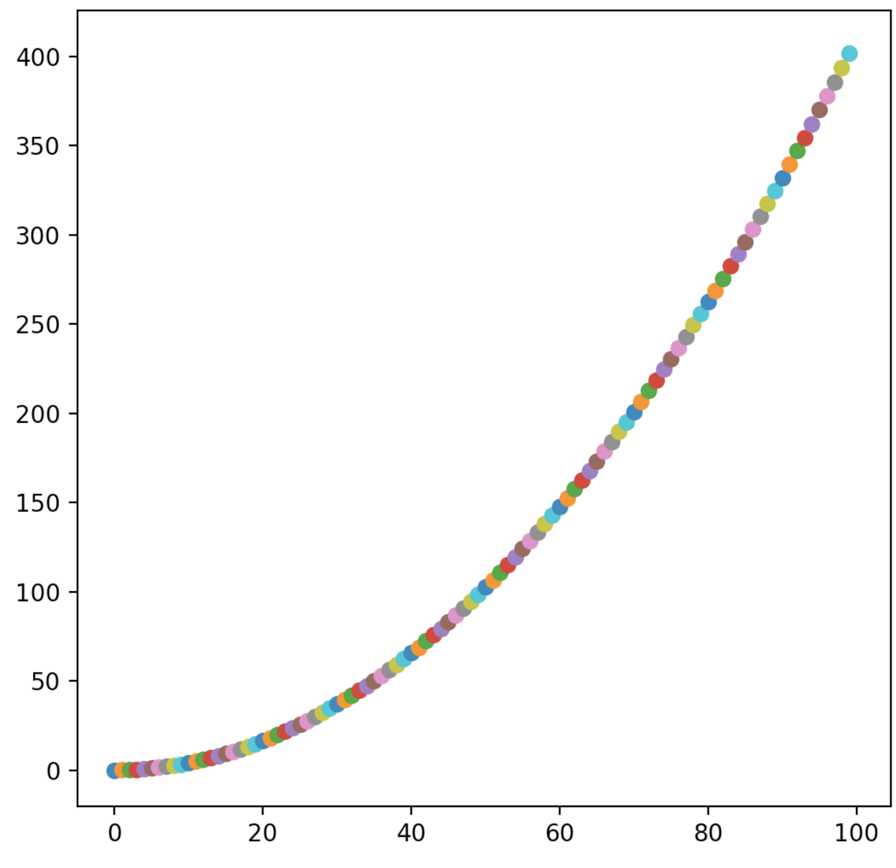
$$E_3=0.041*16=0.656eV$$

エネルギーの離散化：量子準位

$$E = \frac{h^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$$



$n = 1, 2, ..10$



$n = 1, 2, ..100$

波動関数:

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} sin(\frac{n\pi}{L}x)$$

$$\Psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} sin(\frac{\pi}{L}x)$$

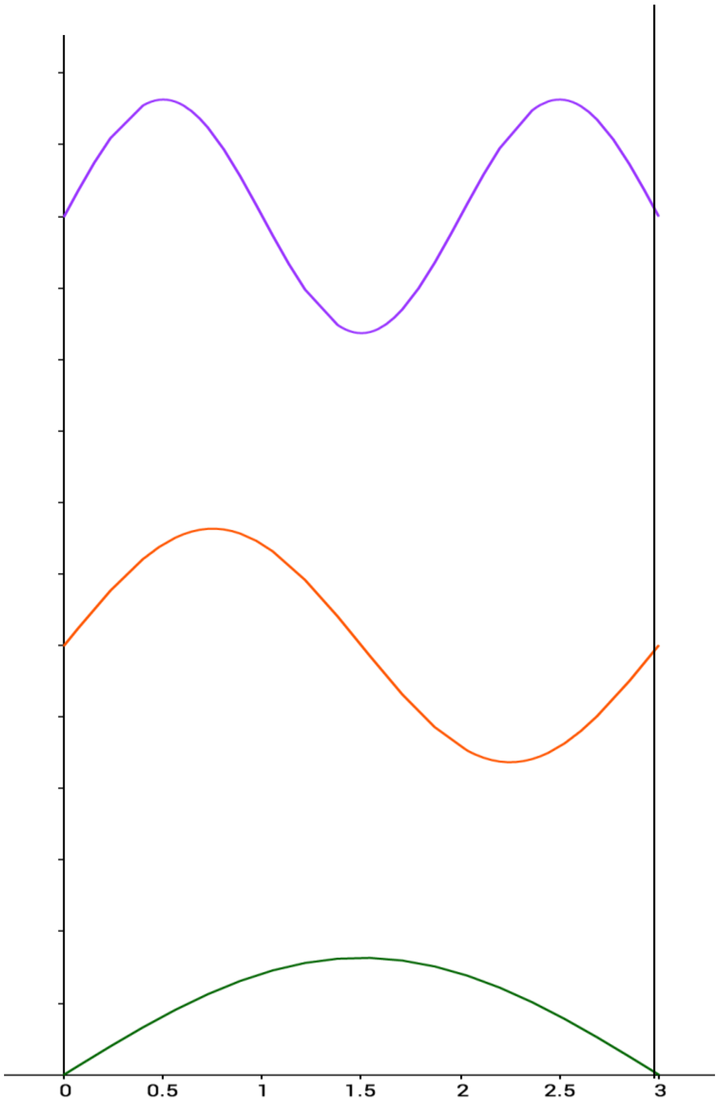
$$\Psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} sin(\frac{2\pi}{L}x)$$

$$\Psi_3(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} sin(\frac{3\pi}{L}x)$$

$\boldsymbol{E_3} = 0.656eV$

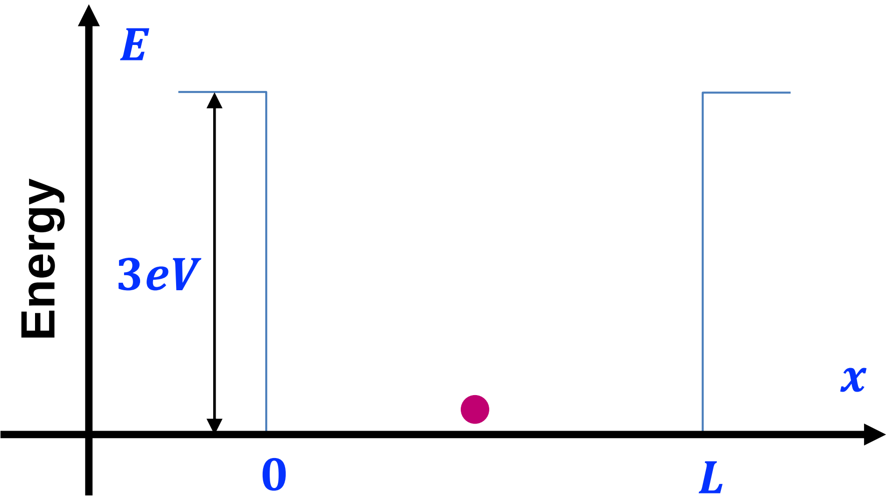
$\boldsymbol{E_2} = 0.164eV$

$\boldsymbol{E_1} = 0.041eV$

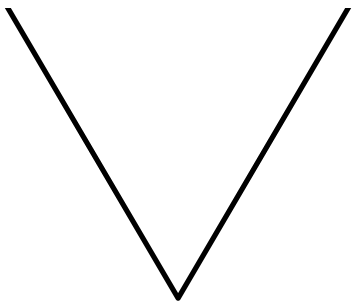


有限の高さかつ任意の形状を持つポテンシャル:

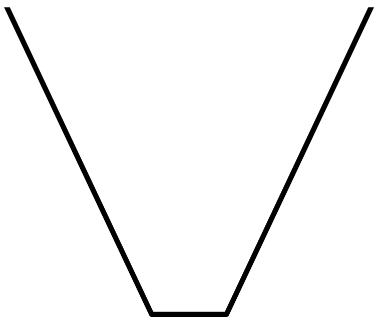
①



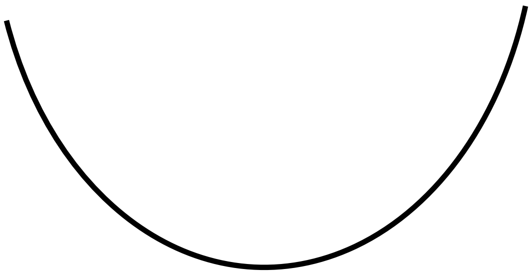
②



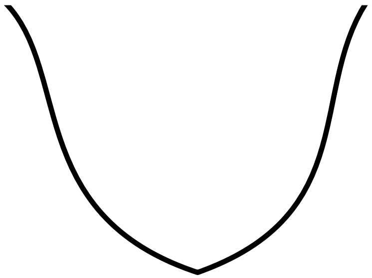
③



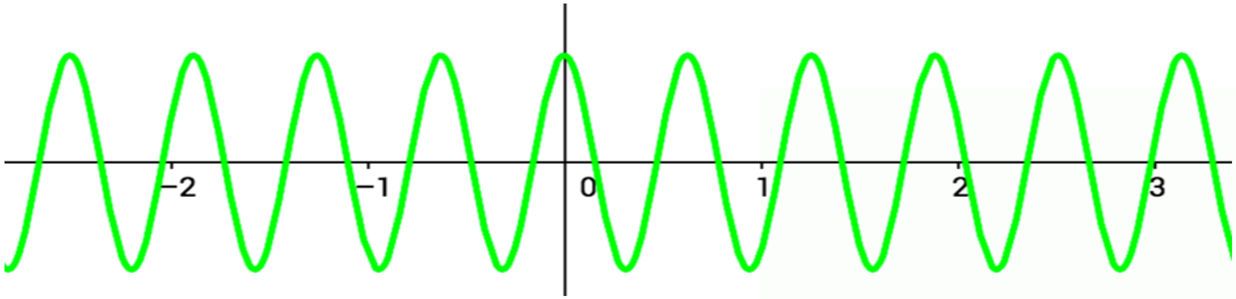
④

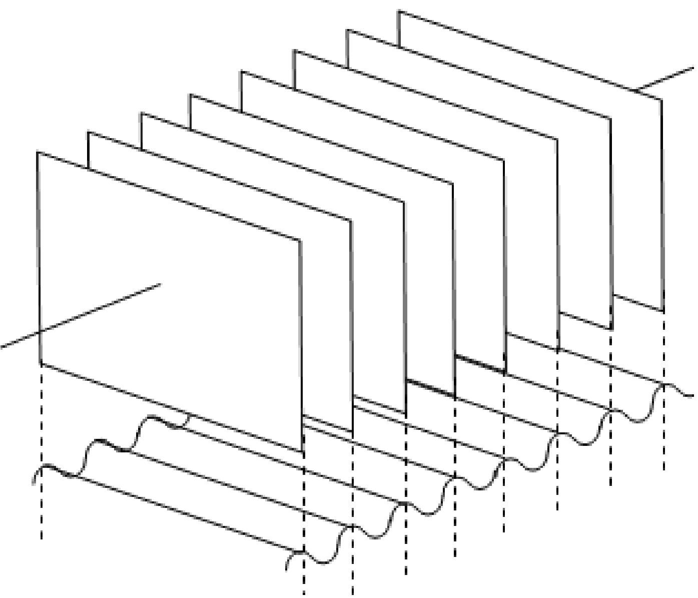


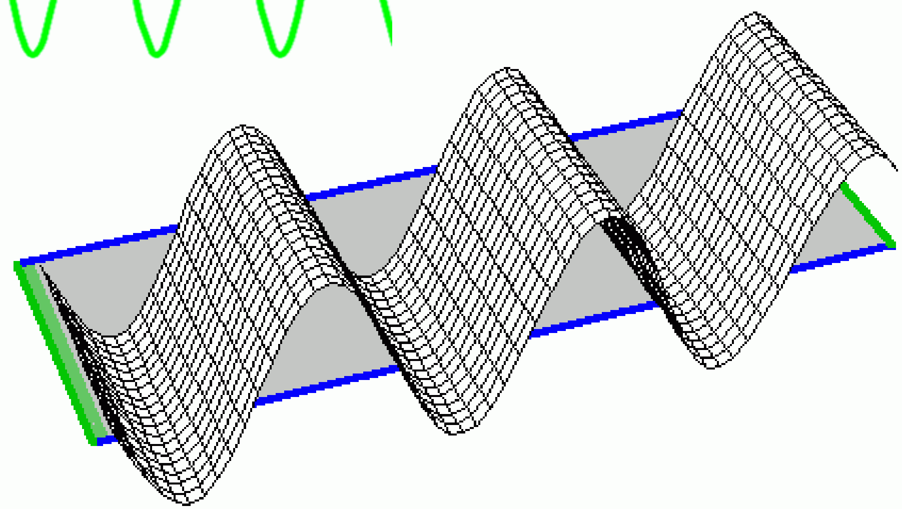
⑤



平面波という概念の導入：一次元から2，3次元を拡張





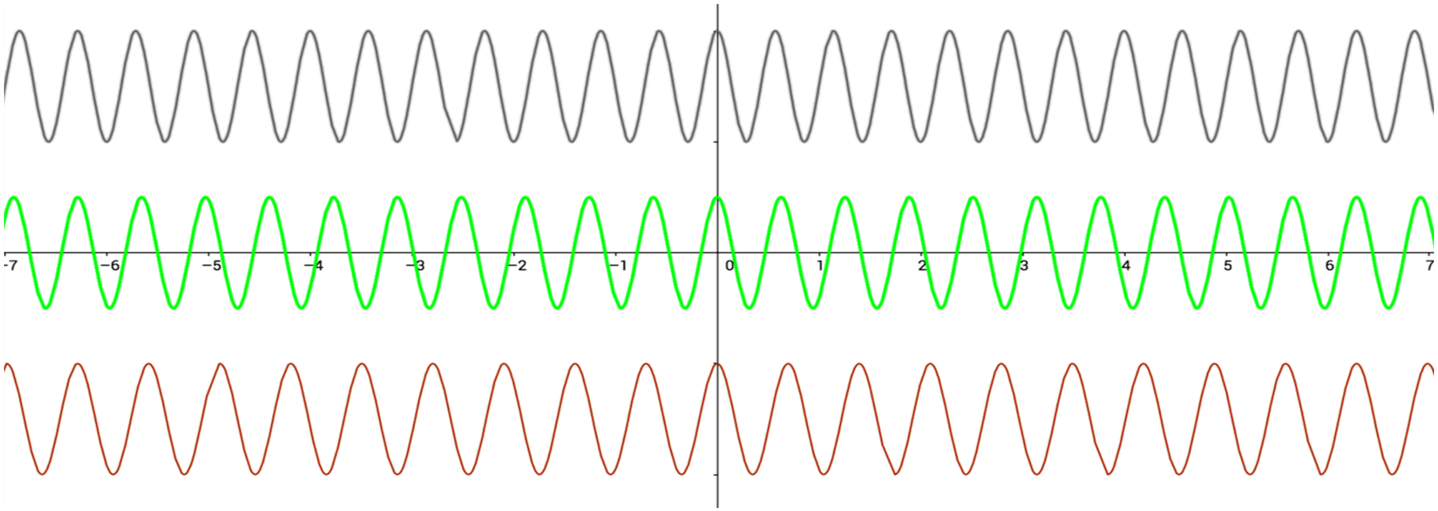


$$\Psi(x,t) = e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})}$$

$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x} =$ 位相＝定数

余弦波の等位相面が平面になっているので、平面波と呼んでいる

平面波の合成:

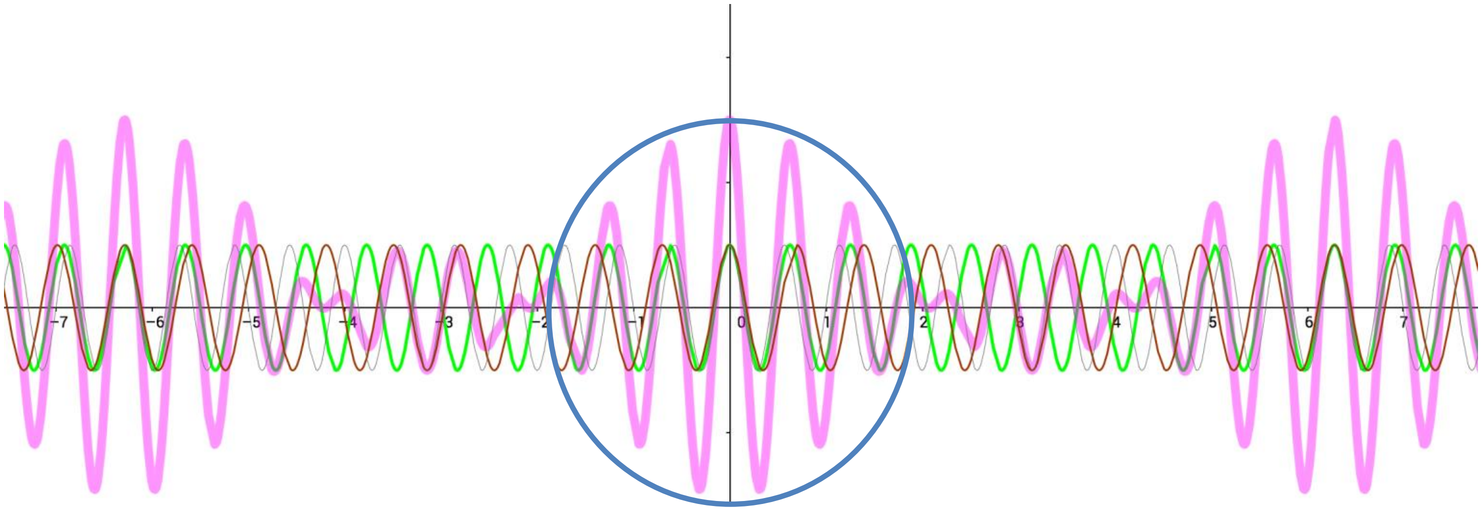


$\cos(11x)$

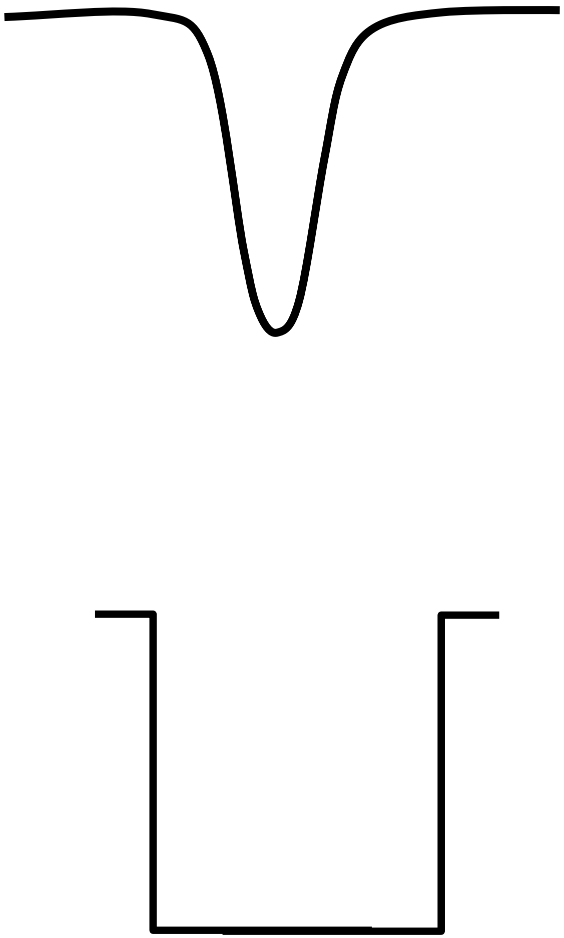
$\cos(10x)$

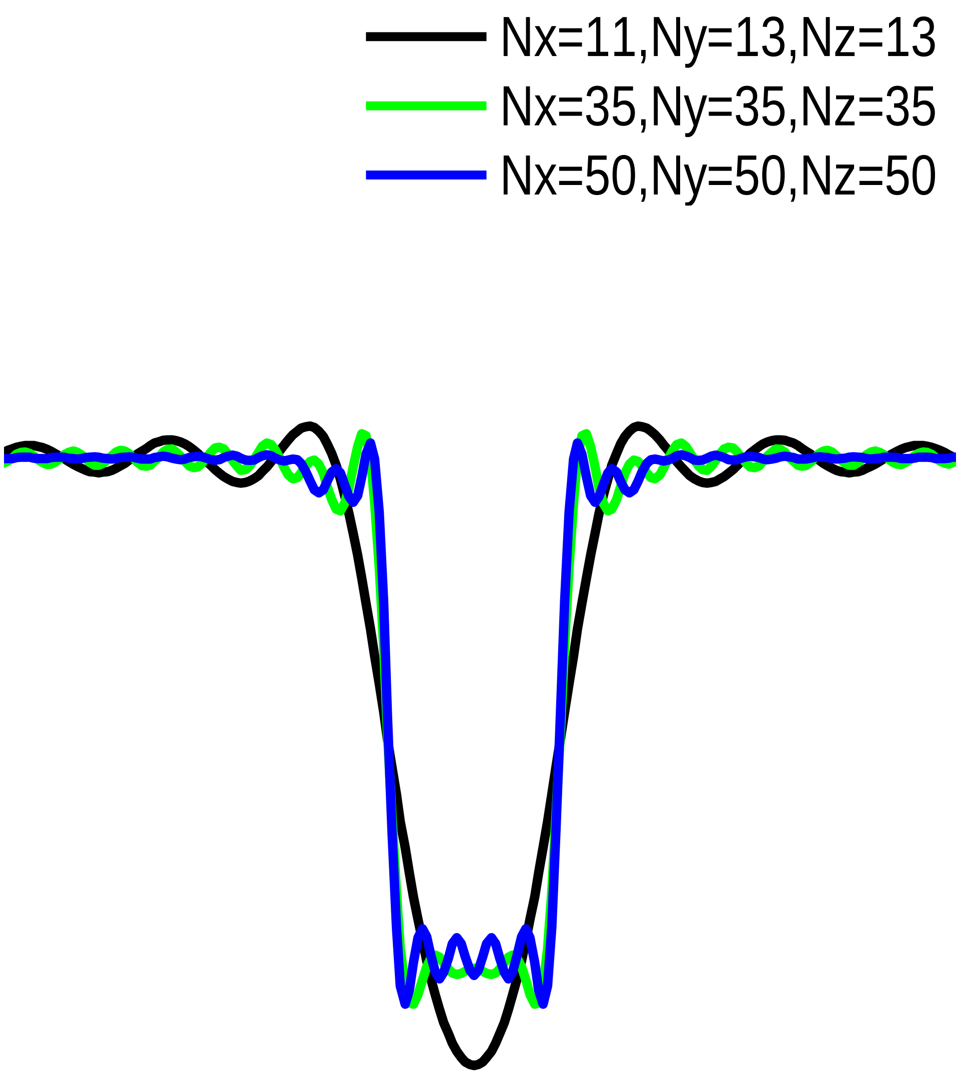
$\cos(9x)$

$$\cos(9x) + \cos(10x) + \cos(11x)$$



平面波の合成による任意形状のポテンシャルを作成する:





シュレーディンガー方程式を少し変形する

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + \frac{8\pi^2 m}{\boldsymbol{h}^2}(\boldsymbol{E} - \boldsymbol{V})\Psi(x) = 0$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + (\boldsymbol{E} - \boldsymbol{V})\Psi(x) = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + \boldsymbol{V}\Psi(x) = E\Psi(x)$$

シュレーディンガー方程式を少し変形する

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi(x)$$

①

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + \boldsymbol{V}\Psi(x) = E\Psi(x)}$$

②

$$(\frac{p^2}{2m} + \boldsymbol{V})\Psi(x) = E\Psi(x)$$

$$H\Psi(x) = E\Psi(x)$$

波動関数の平面波基底近似

$$\boldsymbol{\Psi}(x)=\sum_i c_i\, e^{ik_i x}$$

$$\{\frac{p^2}{2m}+V(x)\}\boldsymbol{\Psi}=\boldsymbol{E}\boldsymbol{\Psi}$$

$$\{\frac{p^2}{2m}+V(x)\}\sum_i c_i\, e^{ik_i x}=\boldsymbol{E}\sum_i c_i\, e^{ik_i x}$$

両側に$e^{-ik_j x}$をかけて積分する

波動関数の平面波基底近似

$$\boldsymbol{e^{-ik_jx}}\left\{\frac{p^2}{2m^*}+V(x)\right\}\sum_i c_i\, e^{ik_ix}\boldsymbol{dx}=\ \boldsymbol{e^{-ik_jx}}\boldsymbol{E}\sum_i c_i\, e^{ik_ix}\boldsymbol{dx}$$

$$\int \boldsymbol{e^{-ik_jx}}\left\{\frac{p^2}{2m^*}+V(x)\right\}\sum_i c_i\, e^{ik_ix}\boldsymbol{dx}=\int \boldsymbol{e^{-ik_jx}}\boldsymbol{E}\sum_i c_i\, e^{ik_ix}\boldsymbol{dx}$$

$$\delta(k_i-k_j)=\frac{1}{2\pi}\int e^{ix(k_i-k_j)}dx$$

式の展開と計算:

$$\int e^{-ik_jx}\left\{\frac{p^2}{2m}\right\}\sum_i c_i\, e^{ik_ix}dx = \delta_{ij}\frac{\hbar^2 k_i{}^2}{2m}\ c_i$$

$$+ \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad +$$

$$\int e^{-ik_jx}\{V(x)\}\ \sum_i c_i\, e^{ik_ix}\boldsymbol{dx} = \int V(x)e^{k_i-k_j}\,dx\ \ c_i$$

$$= \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad =$$

$$\int e^{-ik_jx}\boldsymbol{E}\sum_i c_i\, e^{ik_ix}\boldsymbol{dx} = E\,\delta_{ij}\ c_i$$

行列計算における固有値と固有関数

$$\{\frac{p^2}{2m}+V(x)\}\boldsymbol{\Psi}=\boldsymbol{E\Psi}$$

$$H_{ij}=\ \delta_{ij}\frac{\hbar^2 {k_i}^2}{2m}+\int V(x)e^{k_i-k_j}\,dx=E\ \delta_{ij}$$

（例：４個の平面波を展開した場合：$H_{4,4}$）

$\frac{\hbar^2 {k_1}^2}{\mathbf{2m}}$	$\int V(x)e^{k_1-k_2}dx$	$\int V(x)e^{k_1-k_3}dx$	$\int V(x)e^{k_1-k_4}dx$
$\int V(x)e^{k_2-k_1}dx$	$\frac{\hbar^2 {k_2}^2}{2m}$	$\int V(x)e^{k_2-k_3}dx$	$\int V(x)e^{k_2-k_4}dx$
$\int V(x)e^{k_3-k_1}dx$	$\int V(x)e^{k_3-k_2}dx$	$\frac{\hbar^2 {k_3}^2}{2m}$	$\int V(x)e^{k_3-k_4}dx$
$\int V(x)e^{k_4-k_1}dx$	$\int V(x)e^{k_4-k_2}dx$	$\int V(x)e^{k_4-k_3}dx$	$\frac{\hbar^2 {k_4}^2}{2m}$

=

$E_{\mathbf{1}}$			
	$E_{\mathbf{2}}$		
		$E_{\mathbf{3}}$	
			$E_{\mathbf{4}}$

行列の対角化：固有値と固有関数

$$\{\frac{p^2}{2m} + V(x)\}\boldsymbol{\Psi} = \boldsymbol{E}\boldsymbol{\Psi}$$

$$H_{ij} = \delta_{ij}\frac{\hbar^2 {k_i}^2}{2m} + \int V(x) e^{k_i - k_j}\, dx = E\, \delta_{ij}$$

（例：４個の平面波を展開した場合：$H_{4,4}$）

$$\begin{pmatrix} E_1 & & & \\ & E_2 & & \\ & & E_3 & \\ & & & E_4 \end{pmatrix} = \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline E_1 & & & \\ \hline & E_2 & & \\ \hline & & E_3 & \\ \hline & & & E_4 \\ \hline \end{array}$$

行列計算における固有値と固有関数

$$\{\frac{p^2}{2m}+V(x)\}\boldsymbol{\Psi}=\boldsymbol{E}\boldsymbol{\Psi}$$

$$H_{ij}=\ \delta_{ij}\frac{\hbar^2 {k_i}^2}{2m}+\int V(x)e^{k_i-k_j}\,dx=E\ \delta_{ij}$$

(例：４個の平面波を展開した場合：$H_{4,4}$)

$\frac{\boldsymbol{\hbar^2 {k_1}^2}}{\boldsymbol{2m}}$	$\int V(x)e^{k_1-k_2}dx$	$\int V(x)e^{k_1-k_3}dx$	$\int V(x)e^{k_1-k_4}dx$
$\int V(x)e^{k_2-k_1}dx$	$\frac{\hbar^2 {k_2}^2}{2m}$	$\int V(x)e^{k_2-k_3}dx$	$\int V(x)e^{k_2-k_4}dx$
$\int V(x)e^{k_3-k_1}dx$	$\int V(x)e^{k_3-k_2}dx$	$\frac{\hbar^2 {k_3}^2}{2m}$	$\int V(x)e^{k_3-k_4}dx$
$\int V(x)e^{k_4-k_1}dx$	$\int V(x)e^{k_4-k_2}dx$	$\int V(x)e^{k_4-k_3}dx$	$\frac{\hbar^2 {k_4}^2}{2m}$

=

$E_{\mathbf{1}}$			
	$E_{\mathbf{2}}$		
		$E_{\mathbf{3}}$	
			$E_{\mathbf{4}}$

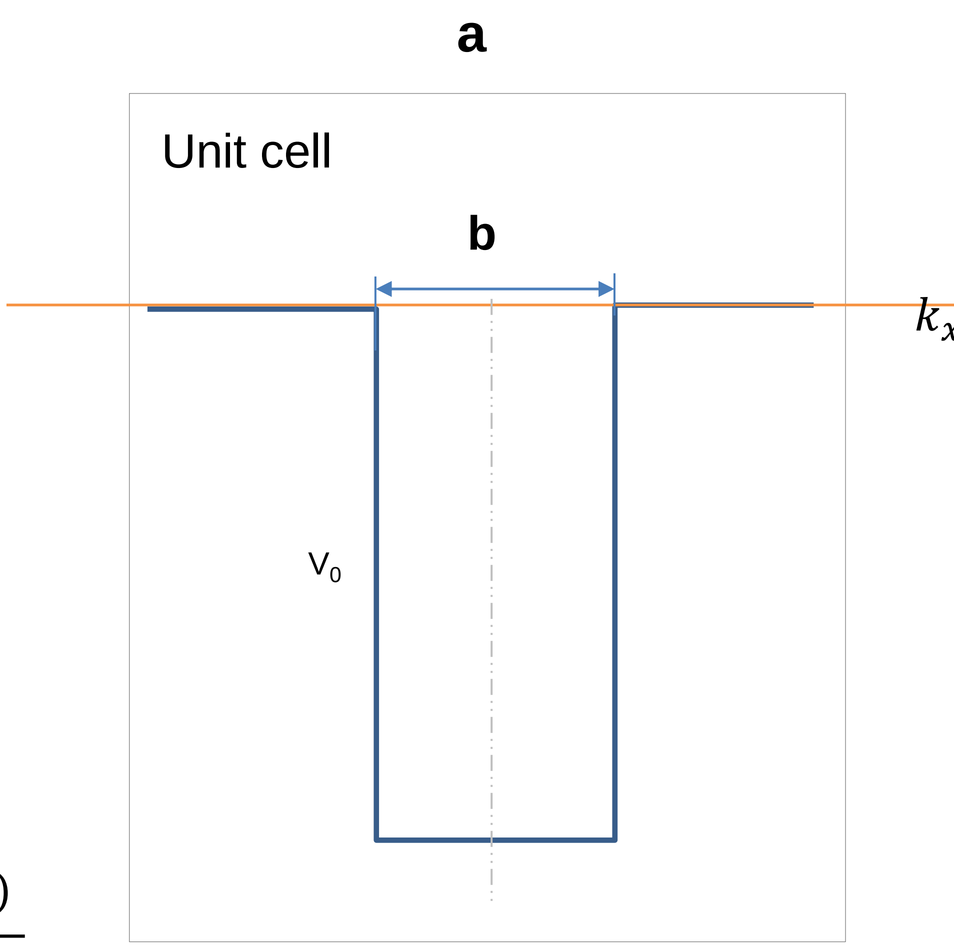
具体例:

平面波設計:

$$\Phi(x) = \sum_i c_i \frac{1}{\sqrt{a}} e^{ik_i x}$$

$$k_i = \frac{2\pi}{a} i$$

$$i = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots\ldots \pm N$$



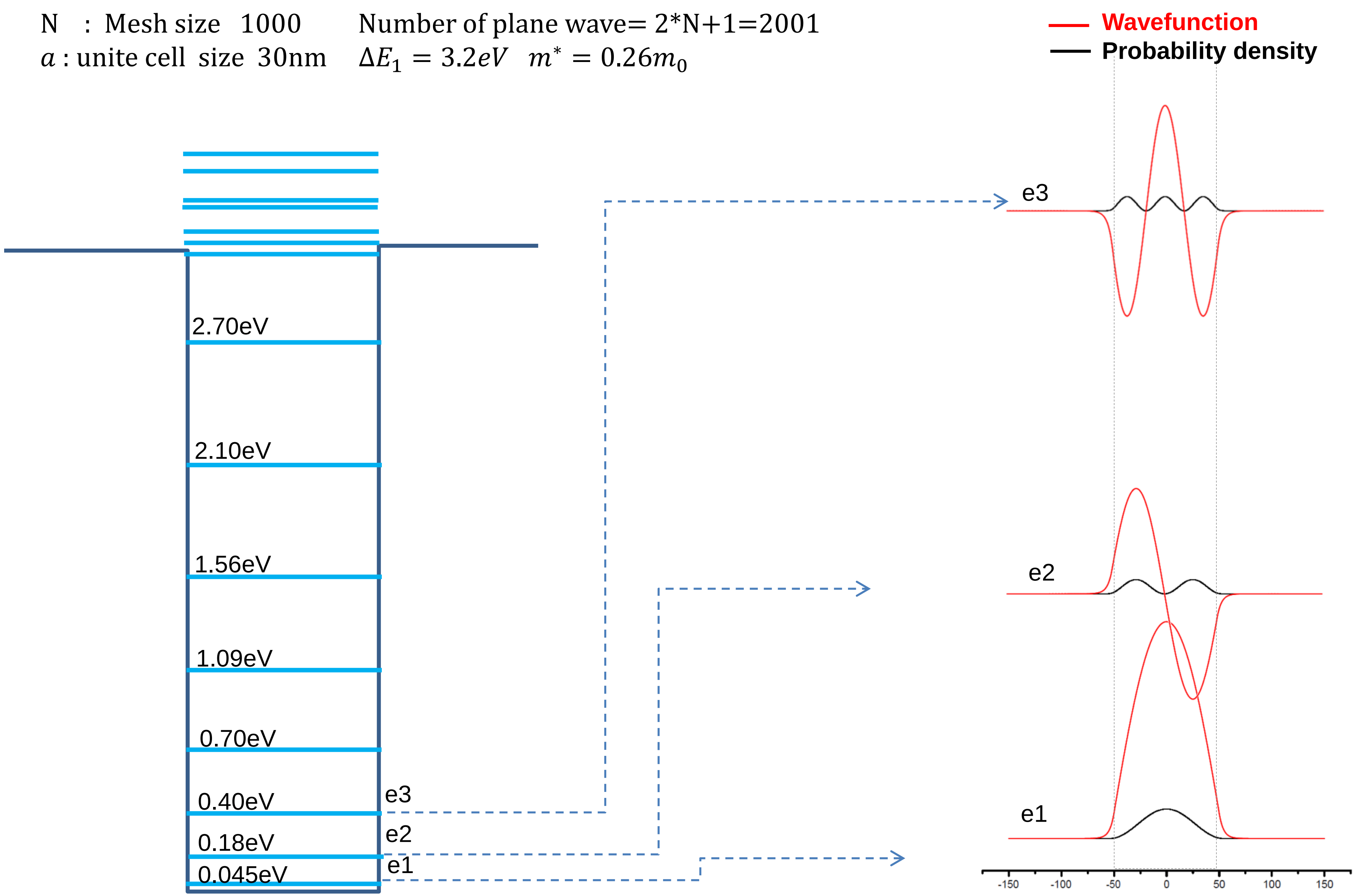
$V(x)$

$$\int V(x) e^{k_i - k_j} dx = \frac{V_0}{a} * \frac{Sin(b * (\frac{k_i - k_j}{2}))}{(\frac{k_i - k_j}{2})}$$

計算結果：a=30nm　b=10nm

N　: Mesh size　1000　　Number of plane wave= 2*N+1=2001

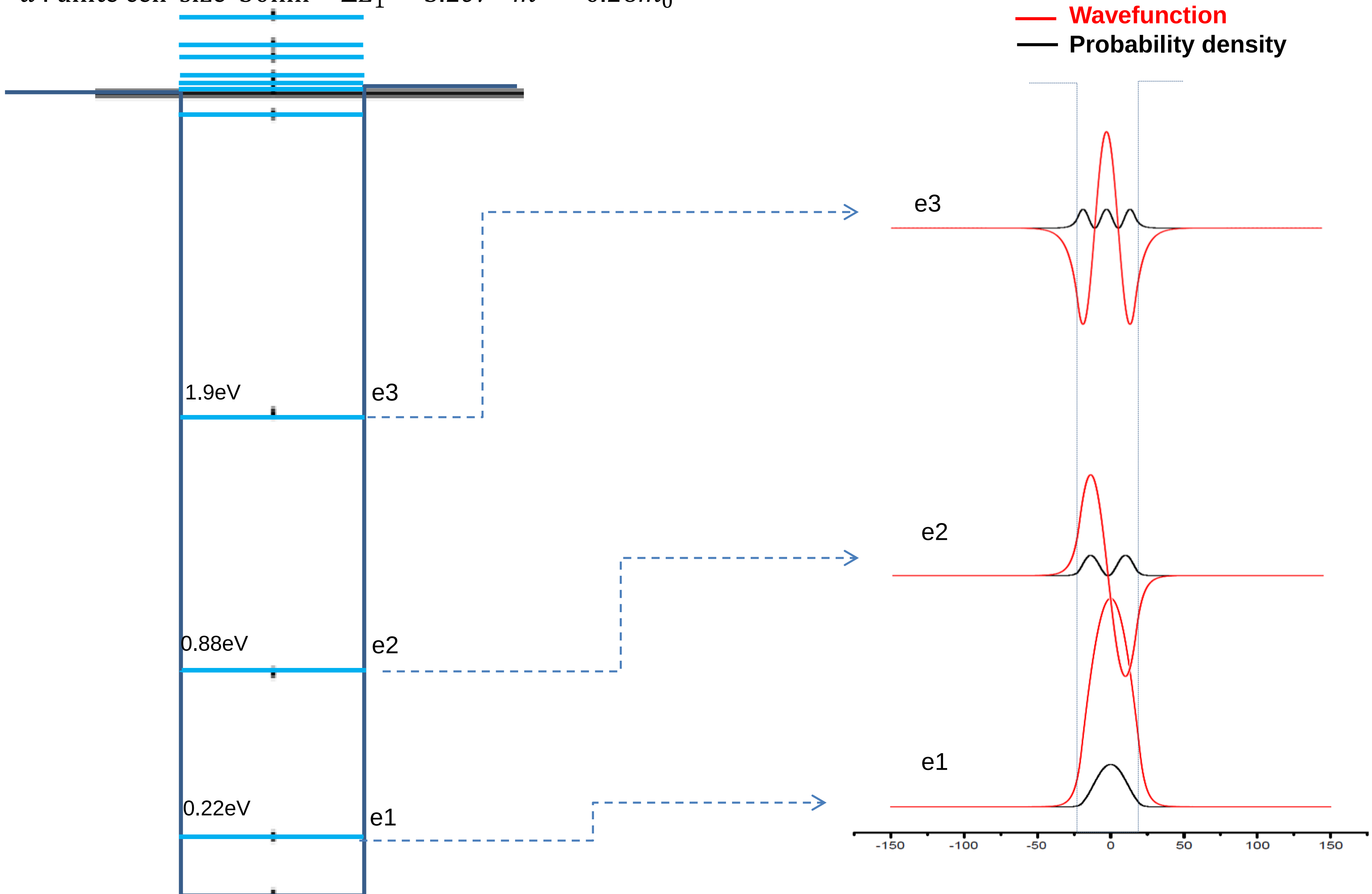
a : unite cell　size　30nm　　$\Delta E_1 = 3.2eV \quad m^* = 0.26m_0$



計算結果：　a=30nm　b=4nm

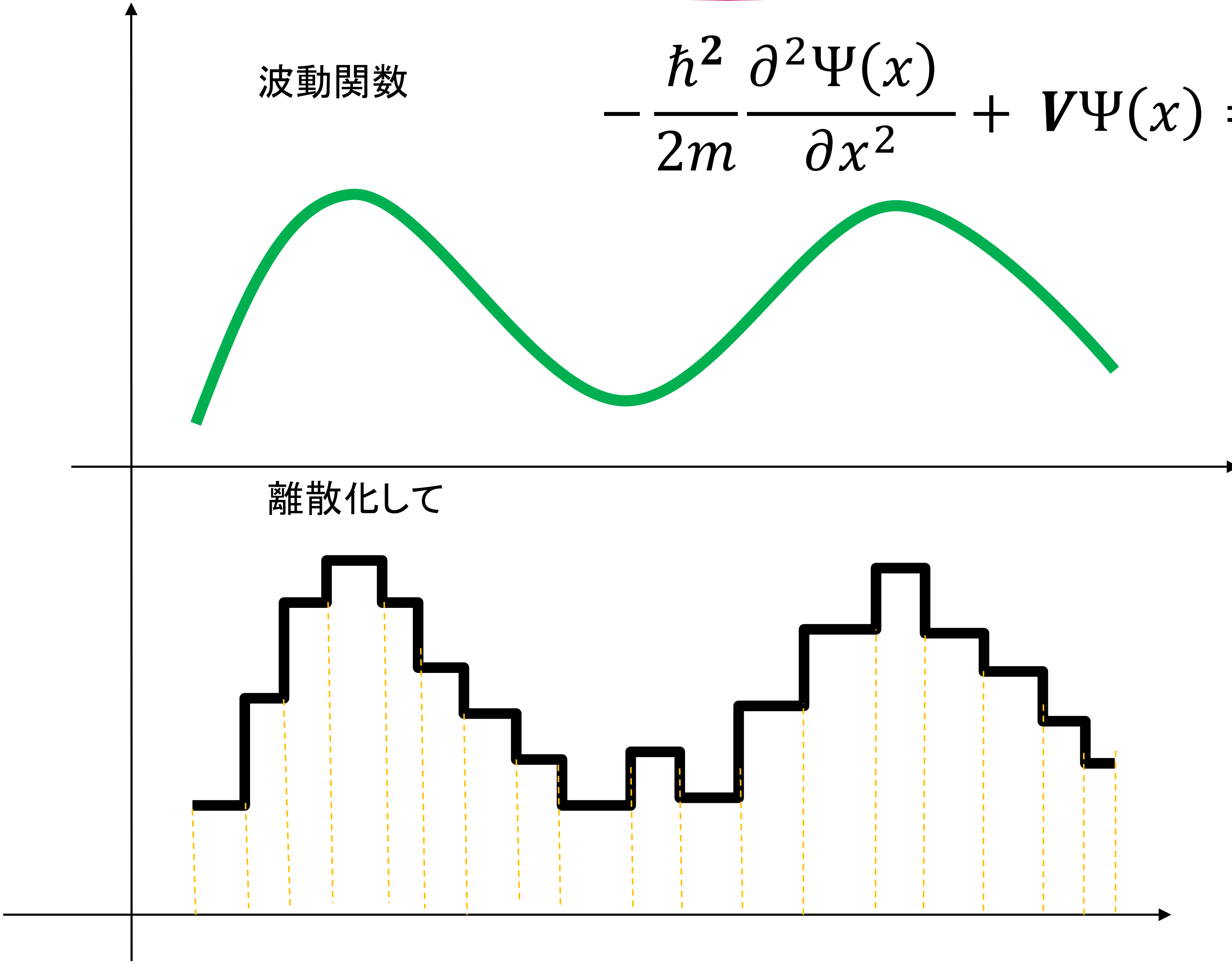
N　：Mesh size　1000　　Number of plane wave= 2*N+1=2001

a : unite cell size 30nm　$\Delta E_1 = 3.2eV$　$m^* = 0.26m_0$



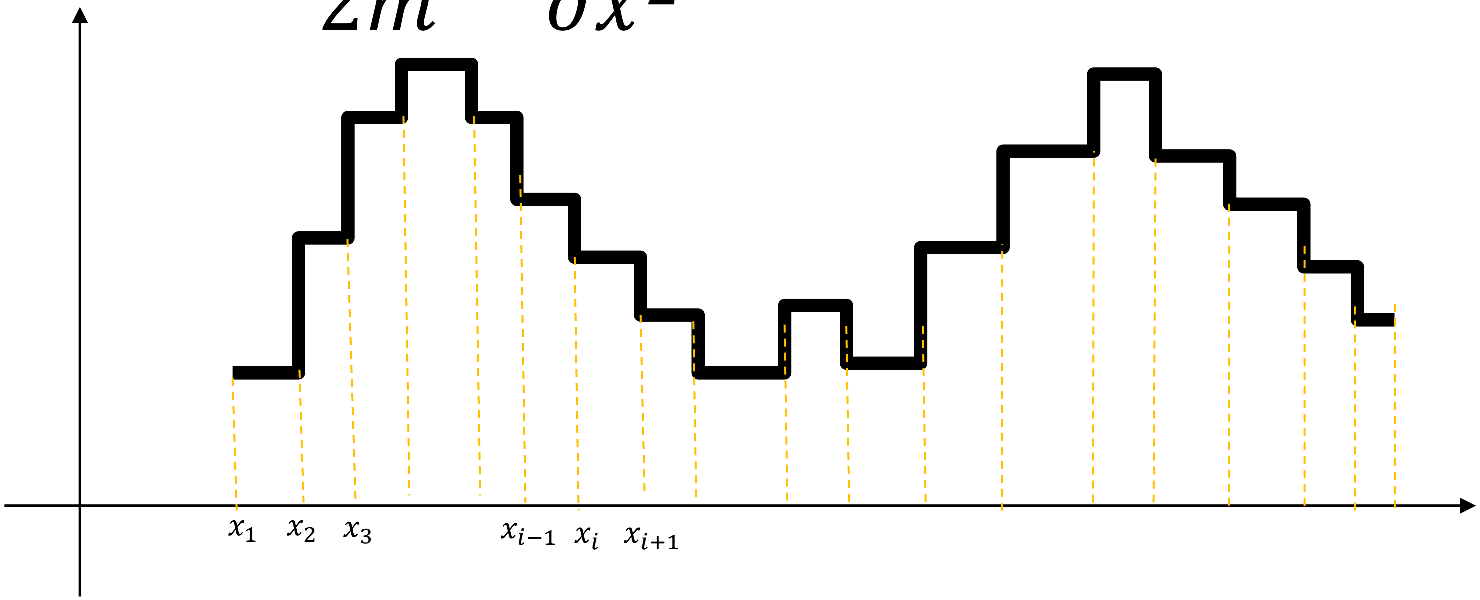
差分法で微分方程式を計算する：波動関数離散化

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2}+\boldsymbol{V}\Psi(x)=E\Psi(x)$$



波動関数離散化：差分法の応用

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x_i)}{\partial x^2}+\boldsymbol{V}(x_i)\Psi(x)=E\Psi(x)$$



$$\frac{d\Psi_{x_i}}{dx}=\frac{\Psi_{x_{i+1}}+\Psi_{x_i}}{d}$$

$$\frac{d^2\Psi_{x_i}}{dx^2}=\frac{\Psi_{x_{i+1}}-2\Psi_{x_i}+\Psi_{x_{i-1}}}{d^2}$$

2階微分の行列化

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{\Psi_{i+2} - 2\Psi_{i+1} + \Psi_i}{d^2}$$

$$\frac{\Psi_{x_2} - 2\Psi_{x_1}}{d^2}$$

$$\frac{\Psi_{x_3} - 2\Psi_{x_2} + \Psi_{x_1}}{d^2}$$

$$\frac{\Psi_{x_4} - 2\Psi_{x_3} + \Psi_{x_2}}{d^2}$$

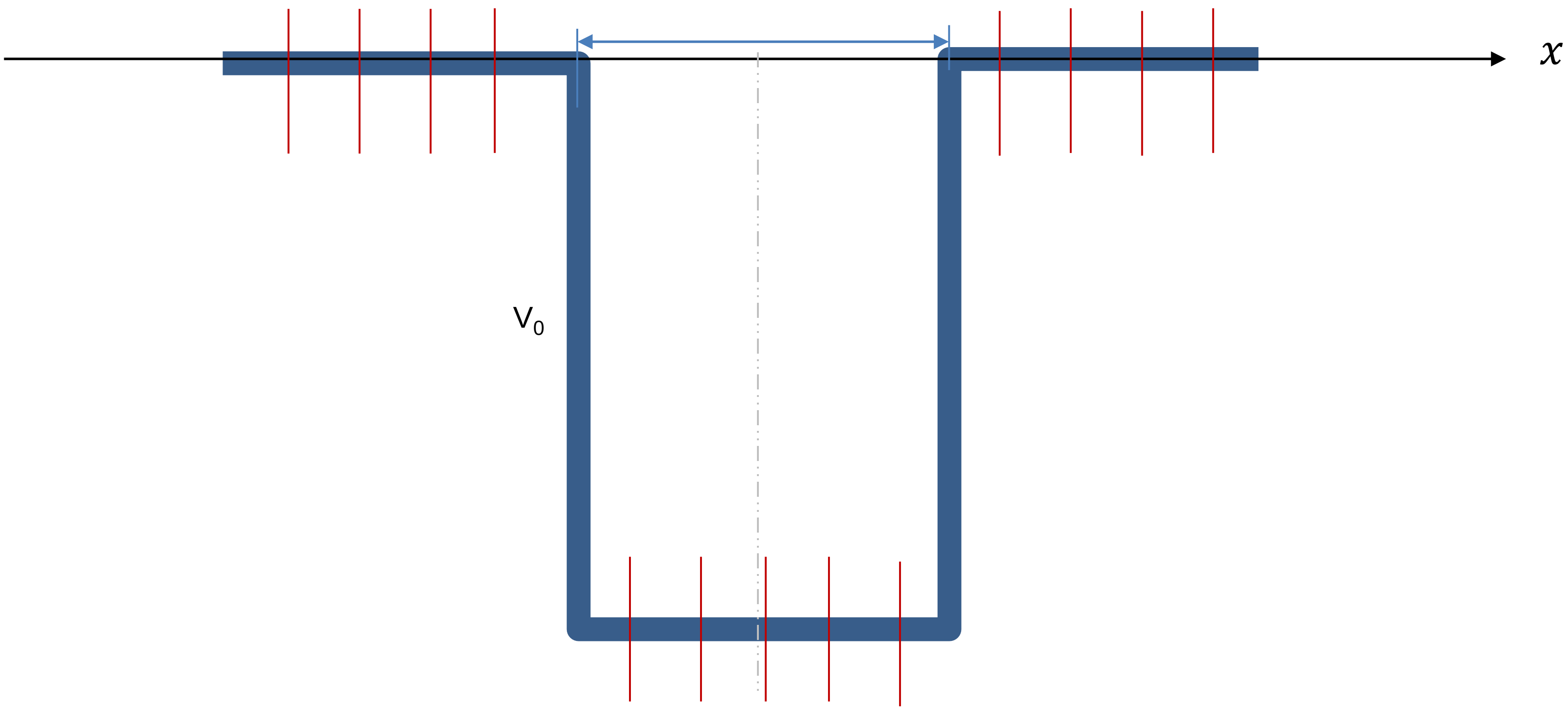
$$\frac{\Psi_{x_5} - 2\Psi_{x_4} + \Psi_{x_3}}{d^2}$$

$$\frac{\Psi_4 - 2\Psi_5}{d^2}$$

$$\begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \\ \Psi_5 \end{bmatrix}$$

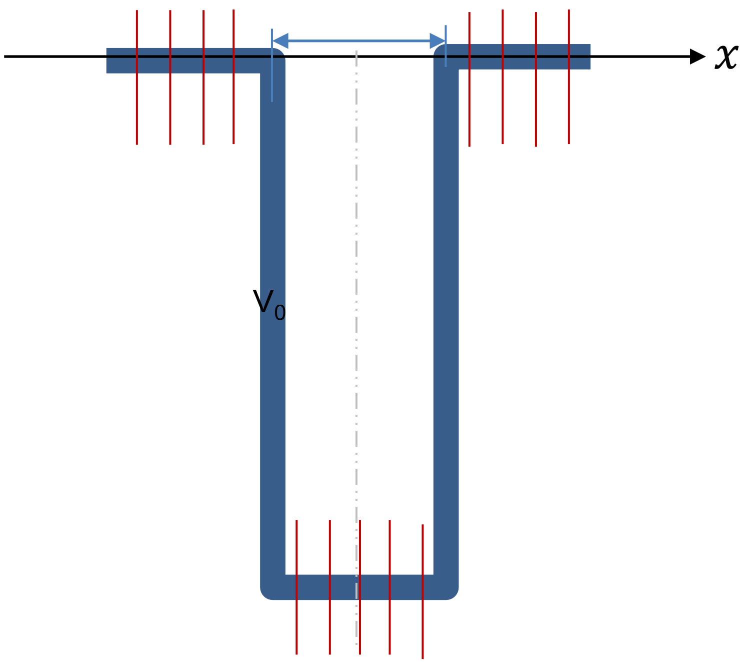
ポテンシャルの離散化

$$V(x_i)$$



ポテンシャルの行列化:

$$V(x_i)$$



例:5等分離散化した場合:

$V(x_1)$	0	0	0	0
0	$V(x_2)$	0	0	0
0	0	$V(x_3)$	0	0
0	0	0	$V(x_4)$	0
0	0	0	0	$V(x_4)$

式に導入する:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x_i)}{\partial x^2}+V(x_i)\Psi(x)=E\Psi(x)$$

$$\left(\begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} V(x_1) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & V(x_2) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V(x_3) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V(x_4) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & V(x_4) \end{bmatrix}\right) \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \\ \Psi_5 \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \\ \Psi_5 \end{bmatrix}$$

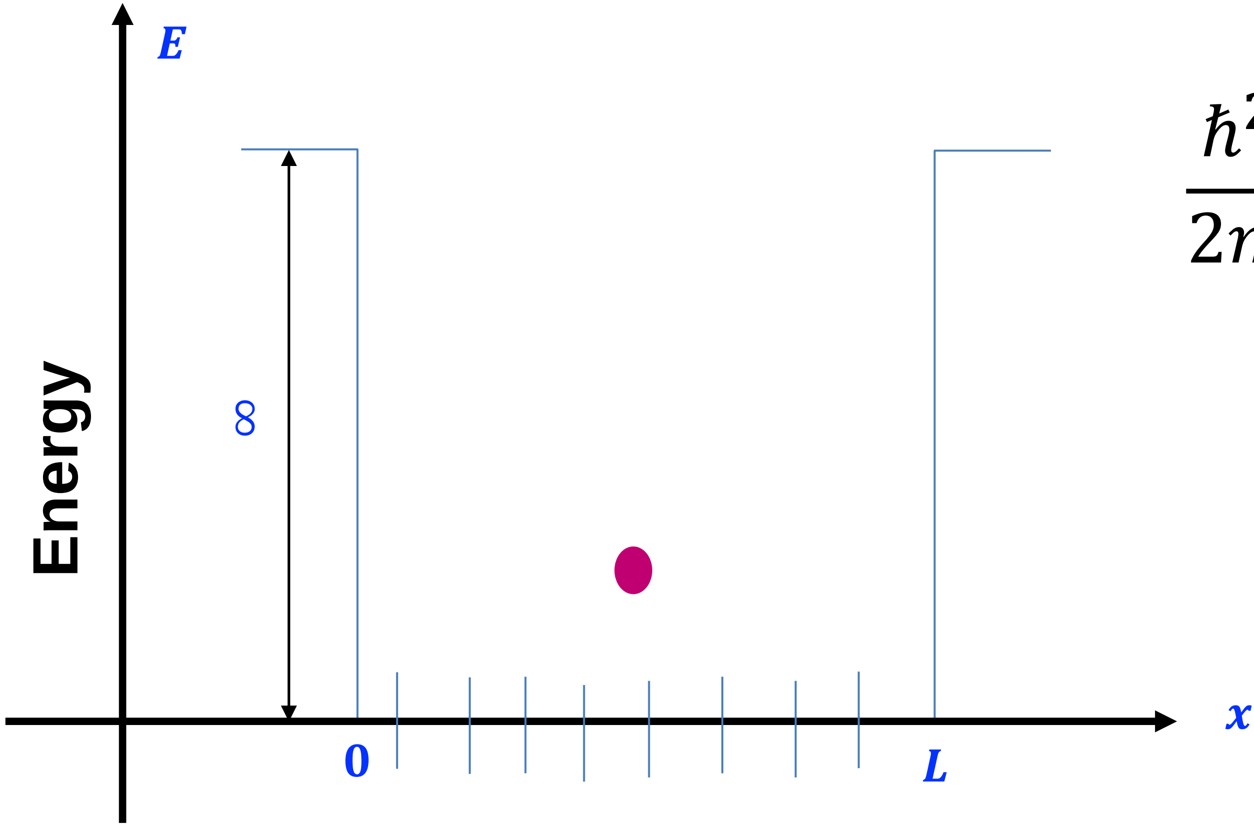
行列の対角化:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x_i)}{\partial x^2}+\boldsymbol{V}(x_i)\Psi(x)=E\Psi(x)$$

$$\left(\begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} V(x_1) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & V(x_2) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V(x_3) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V(x_4) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & V(x_4) \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} E_1 & & & & \\ & E_2 & & & \\ & & E_3 & & \\ & & & E_4 & \\ & & & & E_5 \end{bmatrix}$$

応用例：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x_i)}{\partial x^2}+\boldsymbol{V}(x_i)\Psi(x)=E\Psi(x)$$



$$\frac{\hbar^2}{2m}=C_0$$

１００メッシュで離散化する：　$\boldsymbol{V(x)=0}$

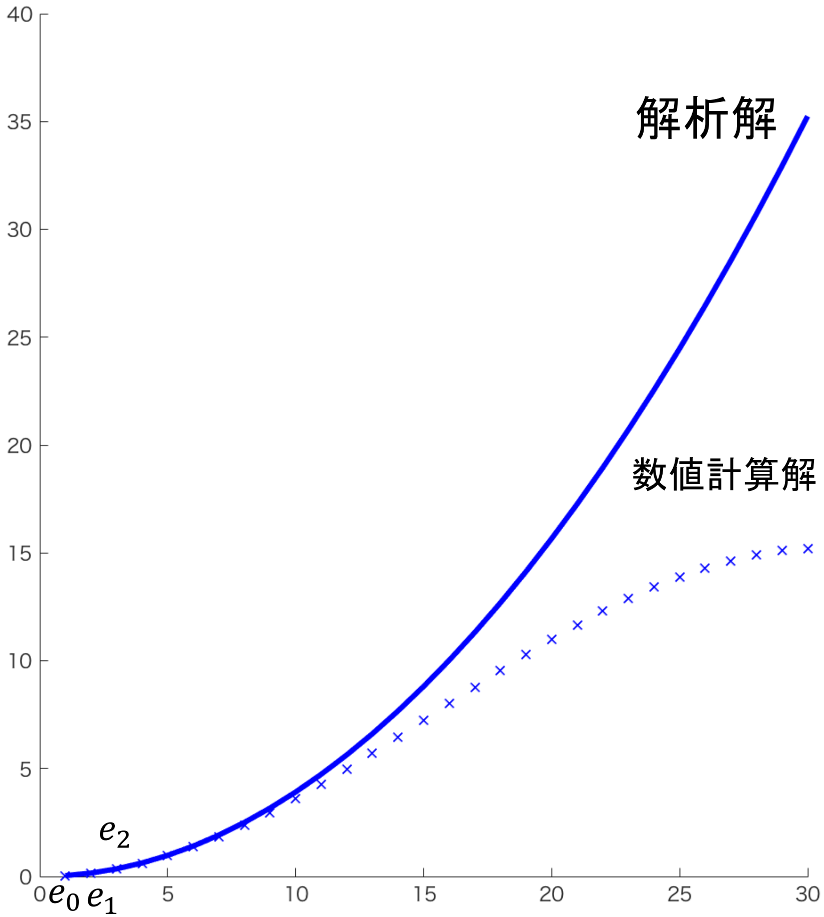
行列を対角化する:

	1	2	…	99	100
1	**-2**	**1**	0	0	0
2	**1**	**-2**	**…**	0	0
…	0	**…**	**…**	**…**	0
99	0	0	**1**	**-2**	**1**
100	0	0	0	**1**	**-2**

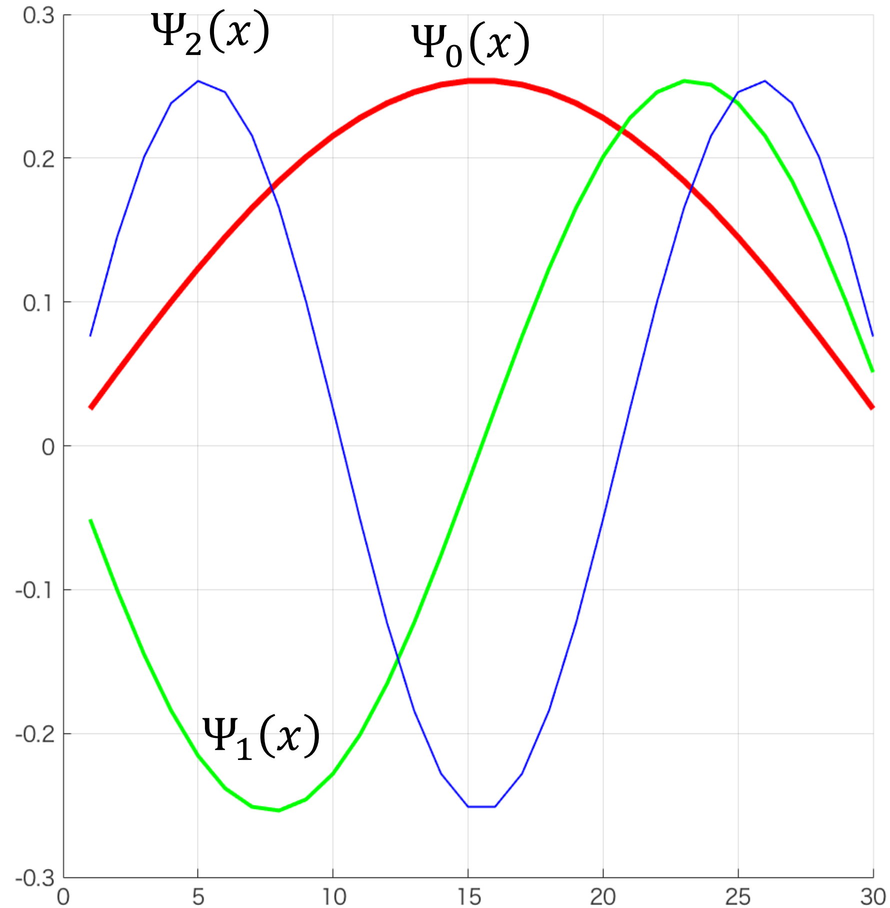
C_0

計算結果 : $N_{mesh} = 30, L = 30 * 2$

$\Psi_0(x) \rightarrow e_0$ $\Psi_1(x) \rightarrow e_1$ $\Psi_2(x) \rightarrow e_2$

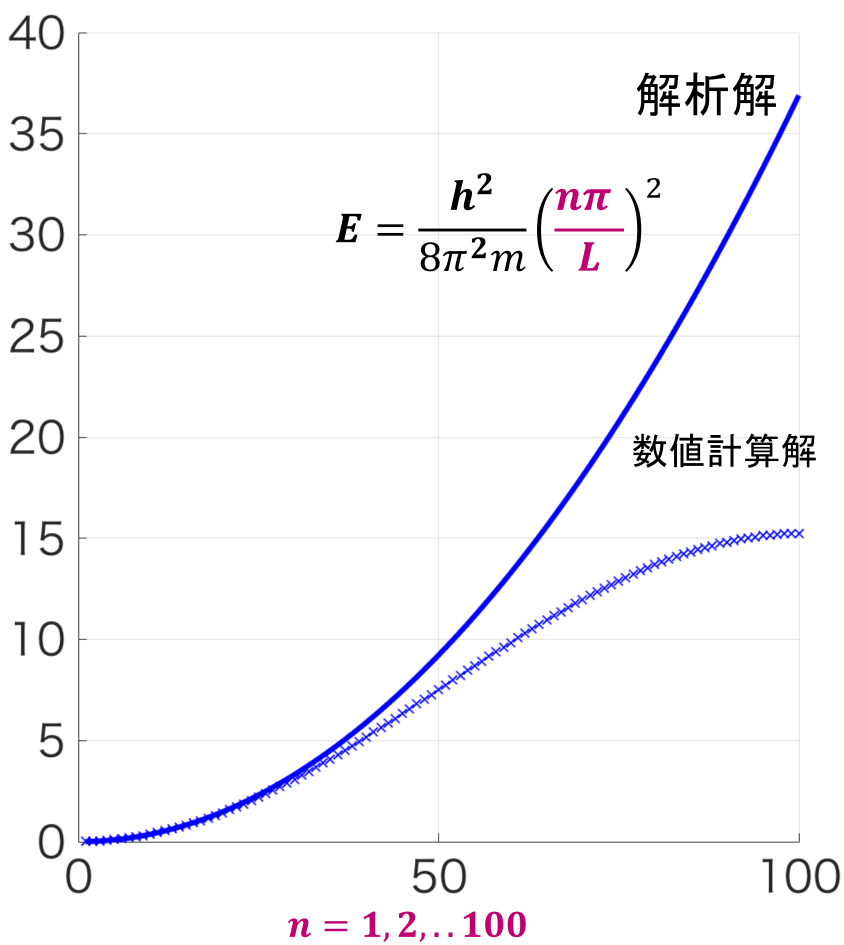


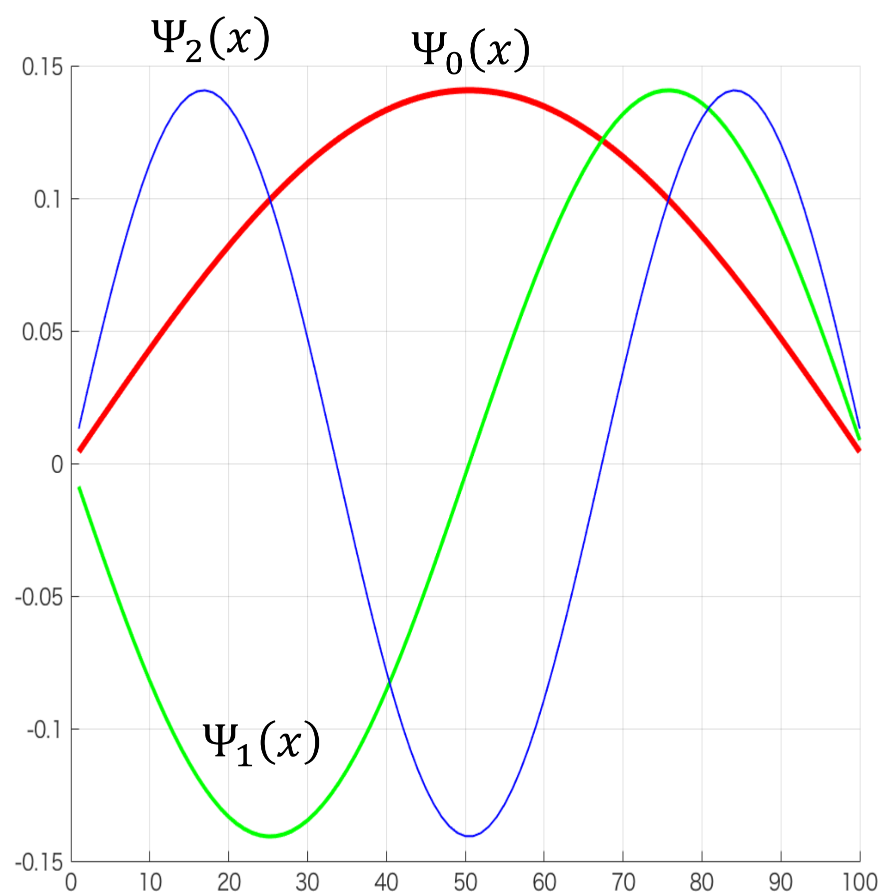
波動関数



計算結果 : $N_{mesh} = 100$, $L = 100 * 2$

$\Psi_0(x) \to e_0$ $\Psi_1(x) \to e_1$ $\Psi_2(x) \to e_2$





エネルギー準位と長さの関係：