

[格子場内の一電子波動函数 (I)] への補足

広 田 徹 (芝浦工大)

(1 2 月 2 日 受 理)

§ 1 序

今年の物性研究 6 月号に発表した「表題の論文¹⁾」の後半に於て、一次元格子場内の一電子波動函数を、Fredholm 型積分方程式の interaction 級数を用いて論じたが、周期格子の取扱いに少々無理があつたように思われる。そこで、この論文補足に於て有限区間内の Fredholm 型積分方程式の interaction を一次元の周期格子に限つて厳密に取扱い、級数を完全に sum up する。その結果 volterra 型積分方程式の場合と同様な process で Bloch wave が生ずることがわかる。又 sum up の process は平面波が格子ポテンシヤルにより多重散乱を受け、その結果として Bloch mode という一つの新しい状態が生み出されることを示すものである。

§ 2 iteration 級数及び summing プロセス

一次元ポテンシヤル $V(x)$ の場内に於ける一電子波動函数に対する Fredholm の積分方程式は

$$\psi(x) = \psi_0(x) + \int_0^L \frac{1}{2k} \sin k|x-\xi| V(\xi) \psi(\xi) d\xi \quad (1)$$

と書ける。 $\psi_0(x)$ は $V=0$ の時の解であり

$$\psi_0(x) = A \cos kx + B \sin kx \quad (2)$$

を表わす。 $\frac{1}{2k} \sin k|x-\xi|$ は定常波を作るグリーン函数²⁾である。

interaction により

$$\begin{aligned} \psi(x) = \psi_0(x) + \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^L \cdots \int_0^L d\xi_1 \cdots d\xi_n \frac{1}{2k} \sin k|x-\xi_1| V(\xi_1) \frac{1}{2k} \sin k|\xi_1-\xi_2| \\ \times V(\xi_2) \cdots \frac{1}{2k} \sin k|\xi_{n-1}-\xi_n| V(\xi_n) \psi_0(\xi_n) \end{aligned} \quad (3)$$

広田 徹

ここで絶対値を次のように処理する。

$$\begin{aligned}
 & \int_0^L \int_0^L \sin k |\xi_{i-1} - \xi_i| V(\xi_i) \sin k |\xi_i - \xi_{i+1}| V(\xi_{i+1}) d\xi_i d\xi_{i+1} \\
 &= \left(\int_0^{\xi_{i-1}} - \int_{\xi_{i-1}}^L \right) d\xi_i \sin k (\xi_{i-1} - \xi_i) V(\xi_i) \left(\int_0^{\xi_i} - \int_{\xi_i}^L \right) d\xi_{i+1} \sin k (\xi_i - \xi_{i+1}) V(\xi_{i+1}) \\
 &= (2 \int_0^{\xi_{i-1}} - \int_0^L) d\xi_i \sin k (\xi_{i-1} - \xi_i) V(\xi_i) (2 \int_0^{\xi_i} - \int_0^L) d\xi_{i+1} \sin k (\xi_i - \xi_{i+1}) V(\xi_{i+1})
 \end{aligned} \tag{4}$$

記号的に

$$2 \int_0^{\xi_{i-1}} d\xi_i = P, \quad - \int_0^L d\xi_i = Q \tag{5}$$

と書くと iteration の n 次の項は

$$\begin{aligned}
 (P+Q)^n &= PP \dots P + PP \dots Q \dots P + \dots \\
 &\dots + QQ \dots PQ + QQ \dots Q
 \end{aligned} \tag{6}$$

の形になる。Pは次の座標が入っているから chain (積分) を作るがQは0からL迄の積分であるから chain を切ることになる。nは ∞ 迄走るのであるから(6)の形の級数を直接計算しなくても次のようにして iteration 級数を取扱える。

先ずQの個数を決め、その間にPが入るすべての可能性を考える。

... PP Q PP Q PPP Q P Q P Q Q ...

Fig. 1

すると各Qの区間に入るPの個数は0から ∞ 迄とることができる。故に積分乃至和はQを境として各区間に分けることができる。次いで

$$\int_0^L \sin k (\xi_i - \xi_{i-1}) V(\xi_{i-1}) d\xi_{i-1} \sin \dots$$

$$= \sin k \xi_1 \int_0^L \cos k \xi_{i-1} V(\xi_{i-1}) d\xi_{i-1} \sin k(\xi_{i-1} - \xi_{i-2}) \dots \quad (7)$$

$$- \cos k \xi_1 \int_0^L \sin k \xi_{i-1} V(\xi_{i-1}) d\xi_{i-1} \sin k(\xi_{i-1} - \xi_{i-2}) \dots$$

に注意すると iteration の級数は次のマトリックス及びベクトルにより

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \bar{I}(x, 0) M^n \underline{I} \quad (8)$$

と書ける。(n は Q の個数を示すことに注意する)

$$\text{但} \quad M = \begin{pmatrix} M_{CS}, M_{CC} \\ M_{SS}, M_{SC} \end{pmatrix} \quad \bar{I} = (I_S, I_C) \quad \underline{I} = \begin{pmatrix} B \\ A \end{pmatrix} \quad (9)$$

$$M_{CS} = \sum_{n=1}^{\infty} 2^{n-1} \int_0^L d\xi_1 \cos k \xi_1 V(\xi_1) \frac{1}{2k} \sin k(\xi_1 - \xi_2) \int_0^{\xi_1} d\xi_2 \frac{1}{2k} \sin k \dots \\ \dots \int_0^{\xi_{n-1}} d\xi_n \frac{1}{2k} \sin k(\xi_{n-1} - \xi_n) \sin k \xi_n \quad (10)$$

$$M_{CC} = \sum_{n=1}^{\infty} 2^{n-1} \int_0^L d\xi_1 \cos k \xi_1 V(\xi_1) \frac{1}{2k} \sin k(\xi_1 - \xi_2) \int_0^{\xi_1} d\xi_2 \frac{1}{2k} \sin k \dots \\ \dots \int_0^{\xi_{n-1}} d\xi_n \frac{1}{2k} \sin k(\xi_{n-1} - \xi_n) \cos k \xi_n$$

M_{SS}, M_{SC} も同様に定義される。但し前に負の符号がつく。又

$$I_S = \sum_{n=0}^{\infty} 2^n \int_0^x d\xi_1 \frac{1}{2k} \sin k(x - \xi_1) V(\xi_1) \int_0^{\xi_1} d\xi_2 \frac{1}{2k} \sin k(\xi_1 - \xi_2) V(\xi_2) \\ \dots \int_0^{\xi_{n-1}} d\xi_n \frac{1}{2k} \sin k(\xi_{n-1} - \xi_n) \sin k \xi_n \quad (11)$$

$$I_C = \sum_{n=0}^{\infty} 2^n \int_0^x d\xi_1 \frac{1}{2k} \sin k(x - \xi_1) V(\xi_1) \int_0^{\xi_1} \frac{1}{2k} \sin k(\xi_1 - \xi_2) V(\xi_2) \\ \dots \int_0^{\xi_{n-1}} d\xi_n \frac{1}{2k} \sin k(\xi_{n-1} - \xi_n) \cos k \xi_n$$

広田 徹

によつて与えられる。 I_S I_C は論文(I)で求めたように波動函数の B , A の係数である。(Volterra の積分方程式の解)

従つて、周期格子 (δ 函数ポテンシャル) に対し

$$\begin{aligned} I_S &= \frac{\sin N\alpha a}{\sin \alpha a} \sin k a \\ I_C &= \left(\frac{\sin (N+1)\alpha a}{\sin \alpha a} - \frac{\sin N\alpha a}{\sin \alpha a} \cos k a \right) \end{aligned} \quad (12)$$

α は Bloch wave の波数で

$$\cos \alpha a = \cos k a + \frac{\kappa_0}{2k} \sin k a, \quad V(x) = \sum_i \kappa_0 \delta(x - x_i) \quad (13)$$

によつて与えられる。又 $Na = x$ である。

すると

$$\begin{aligned} M_{CS} &= \frac{\kappa_0}{2k} \sum_{N=0}^{N_0} \cos N' k a I_S(N') & \text{但 } N_0 a = L \\ M_{SC} &= -\frac{\kappa_0}{2k} \sum_{N=0}^{N_0} \sin N' k a I_C(N') \\ M_{CC} &= \frac{\kappa_0}{2k} \sum_{N=0}^{N_0} \cos N' k a I_C(N') \\ M_{SS} &= -\frac{\kappa_0}{2k} \sum_{N=0}^{N_0} \sin N' k a I_S(N') \end{aligned} \quad (14)$$

の関係があることがすぐわかる。 $\bar{I}$ は x 即ち Na に依るけれどもマトリックス M 及びベクトル $\underline{I}$ は N には依らないことに注意する。 $M, \underline{I}$ は $\bar{I}$ の中の $\sin N\alpha a$, $\cos N\alpha a$ の係数を決める定数であり、系の大きさ (積分範囲), 境界条件に依存する。

M を対角化することにより級数(8)を sum up 出来る。¹⁾ 結果のみを記そう。
マトリックス M の固有値を λ_1, λ_2 とすると

$$\psi(Na) = \frac{1}{\lambda_2 - \lambda_1} \left[\frac{1}{1 + \lambda_1} \left(I_3 + \frac{\lambda_1 - M_{CS}}{M_{CC}} I_C \right) \{ (\lambda_2 - M_{CS}) B - M_{CS} A \} \right]$$

$$+ \frac{1}{1+\lambda_2} (I_S + \frac{\lambda_2 - M_{CS}}{M_{CC}} I_C) \{ -(\lambda_1 - M_{CS})B + M_{CC}A \}]$$

$$\text{但 } |\lambda_1|, |\lambda_2| < 1$$

$$= \frac{I_S \{ M_{CC}A + (1 - M_{SC})B \} + I_C \{ (1 - M_{CS})A + M_{SS}B \}}{1 + (M_{CS} + M_{SC}) + M_{CS}M_{SC} - M_{CC}M_{SS}} \quad (15)$$

但し $M_{CS}, M_{SC}, M_{CC}, M_{SS}$ は夫々(14)により計算し求めると、Kronig Penny relation (13)の助けをかりて

$$M_{CS} = -\frac{1}{2} + \frac{\kappa_0}{8k} \frac{\sin ka}{\sin \alpha a} \left(\frac{\cos(N_0 + \frac{1}{2})(k - \alpha)a}{\sin \frac{k - \alpha}{2}a} - \frac{\cos(N_0 + \frac{1}{2})(k + \alpha)a}{\sin \frac{k + \alpha}{2}a} \right)$$

$$M_{SC} = -\frac{1}{2} + \frac{\kappa_0}{8k} \left(\frac{\cos(N_0 + \frac{1}{2})(k - \alpha)a}{\sin \frac{k - \alpha}{2}a} + \frac{\cos(N_0 + \frac{1}{2})(k + \alpha)a}{\sin \frac{k + \alpha}{2}a} \right) \quad (16)$$

$$- \frac{\sin ka}{4 \sin \alpha a} \left(\frac{\kappa_0}{2k} \right)^2 \left(\frac{\sin(N_0 + \frac{1}{2})(k - \alpha)a}{\sin \frac{k - \alpha}{2}a} - \frac{\sin(N_0 + \frac{1}{2})(k + \alpha)a}{\sin \frac{k + \alpha}{2}a} \right)$$

$$M_{CC} = \frac{\kappa_0}{8k} \left(\frac{\sin(N_0 + \frac{1}{2})(k - \alpha)a}{\sin \frac{k - \alpha}{2}a} + \frac{\sin(N_0 + \frac{1}{2})(k + \alpha)a}{\sin \frac{k + \alpha}{2}a} \right)$$

$$+ \frac{\sin ka}{4 \sin \alpha a} \left(\frac{\kappa_0}{2k} \right)^2 \left(\frac{\cos(N_0 + \frac{1}{2})(k - \alpha)a}{\sin \frac{k - \alpha}{2}a} - \frac{\cos(N_0 + \frac{1}{2})(k + \alpha)a}{\sin \frac{k + \alpha}{2}a} \right)$$

$$M_{SS} = -\frac{\kappa_0}{8k} \frac{\sin ka}{\sin \alpha a} \left(\frac{\sin(N_0 + \frac{1}{2})(k - \alpha)a}{\sin \frac{k - \alpha}{2}a} - \frac{\sin(N_0 + \frac{1}{2})(k + \alpha)a}{\sin \frac{k + \alpha}{2}a} \right)$$

となる。これらは定数である。A, Bのとり方により (15)は Bloch waveを表わすことは明らかであろう。

δ 函数ポテンシャルの場合の結果を出したが square well 及び一般ポテンシャルの場合も論文(II)³⁾の方法に従えば、同様に求めることが出来る。結果は複雑になるだけであるから省略しよう。又この iteration の各項が多

広田 徹

重散乱のプロセスを表わしていることも明らかである。

文 献

- 1) T. Hirota Bussei Kenkyu 2 3 (1964) 119
(private communication)
- 2) P. Morse, H. Feshbach, Method of Theoretical Physics
p.810, 811
- 3) T. Hirota to be published on "the Bussei Kenkyu"
(private communication)