光量子エレクトロニクス特論

1. 電磁気学の復習
2. 量子力学の復習
3. 状態ベクトルとシュレディンガー方程式
4. 時間依存のシュレディンガー方程式
5. 密度行列法
6. 電子と光の相互作用-古典振動子モデル
7. 電子2準位系とブロッホ方程式
8. 電子2準位系におけるコヒーレント光非線形効果
9. 2原子分子のエネルギー準位
10. 固体のエネルギー準位
11. 光学遷移と次元性
12. 光学遷移におけるクーロン相互作用の効果
13. フラーレンの電子状態と光学遷移
14. ナノチューブの電子状態と光学遷移
15.まとめ

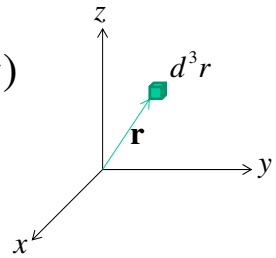
波動関数とシュレディンガー方程式

波動関数: $\psi(\mathbf{r},t)$

確率密度: $\left|\psi(\mathbf{r},t)\right|^2 = \psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)$

位置$\mathbf{r}$ 時刻 t に粒子を見出す確率:

$$\left|\psi(\mathbf{r},t)\right|^2 d^3r$$



どこかに粒子を見出す確率:

$$\int \left|\psi(\mathbf{r},t)\right|^2 d^3r = 1$$

（規格化）

問題1

状態ψ のとき、物理量$\hat{O}$ の期待値 $\left\langle \hat{O} \right\rangle$ はいくらか

問題2

ハミルトニアンを$\hat{H}$とするとき、時間依存のあるシュレディンガー方程式を書け。

運動量演算子: $\hat{\mathbf{p}}$

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$$

ハミルトニアン: $\hat{H}(\mathbf{r},\mathbf{p})$

$$\hat{H}(\mathbf{r},\mathbf{p}) = K(\mathbf{p}) + V(\mathbf{r})$$

$$= \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})$$

自由粒子:

$$\hat{H}(\mathbf{r},\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

定常解: $\psi_n(\mathbf{r},t) = u_n(\mathbf{r})\exp(-i\omega_n t)$

$\hat{H}(\mathbf{r},\mathbf{p})\psi(\mathbf{r},t) = i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t)$ に代入

↓

$\hat{H}(\mathbf{r},\mathbf{p})u_n(\mathbf{r}) = \hbar\omega_n u_n(\mathbf{r})$

（エネルギー）固有値: $\hbar\omega_n$

（固有状態）波動関数: $u_n(\mathbf{r})$

・規格

$$\int |u_n(\mathbf{r})|^2 d^3r = \int u_n^*(\mathbf{r})u_n(\mathbf{r})d^3r = 1$$

・直交

$$\int u_n^*(\mathbf{r})u_m(\mathbf{r})d^3r = 0 \longrightarrow \int u_n^*(\mathbf{r})u_m(\mathbf{r})d^3r = \delta_{n,m}$$

・完全性

$$\sum_n u_n^*(\mathbf{r})u_n(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

→ 任意の関数 $f(\mathbf{r}) = \sum_n d_n u_n(\mathbf{r})$

次回、ベクトルとの対比で、もう少し説明

シュレディンガー方程式の一般解:

$$\psi(\mathbf{r},t) = \sum_n C_n u_n(\mathbf{r})\exp(-i\omega_n t)$$

規格化条件:

$$\int |\psi(\mathbf{r},t)|^2 d^3r = 1 \quad \longleftrightarrow \quad \sum_n |C_n|^2 = 1$$

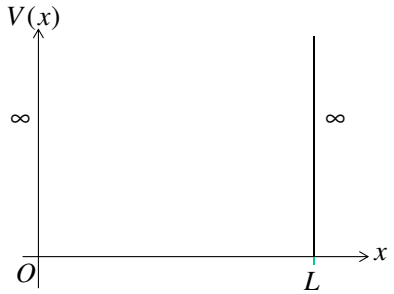
問題3

上の関係を示せ！

$|C_n|^2$ → 系がn番目の状態に見出される確率

・一次元量子井戸

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 \le x \le L) \\ \infty & (x<0, x>L) \end{cases}$$



↓

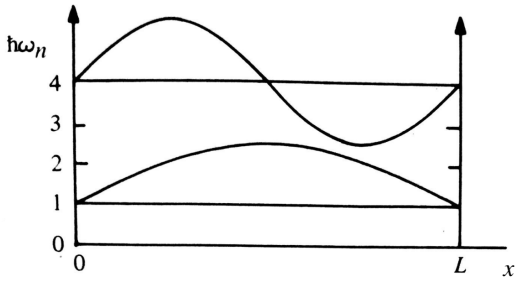
$$\hat{H} = \begin{cases} \dfrac{p^2}{2m} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2} & (0 \le x \le L) \\ \infty & (x<0, x>L) \end{cases}$$

問題4

解け！

・一次元量子井戸

$$V(x)=\begin{cases} 0\ (0\le x\le L) \\ \infty\ (\mathrm{x}<0, x>L) \end{cases}$$



$$u_n(x)=\begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{L}}\sin k_n x\ (0\le x\le L) \\ 0\ (\mathrm{x}<0, x>L) \end{cases} \qquad k_n=\frac{n\pi}{L},\quad n=1,2,\cdots$$

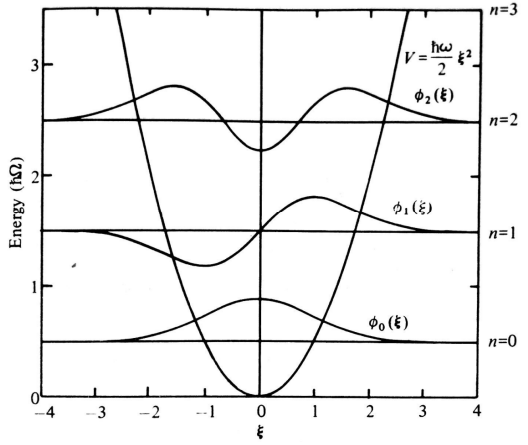
$$E_n=\hbar\omega_n=\frac{\hbar^2 k_n^{\,2}}{2m}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2,\quad n=1,2,\cdots$$

・調和振動子

$$\hat{H}=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}kx^2$$

$$=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\Omega^2x^2$$

$$=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\Omega^2x^2$$



$$\xi=(\Omega/\hbar)^{1/2}x$$

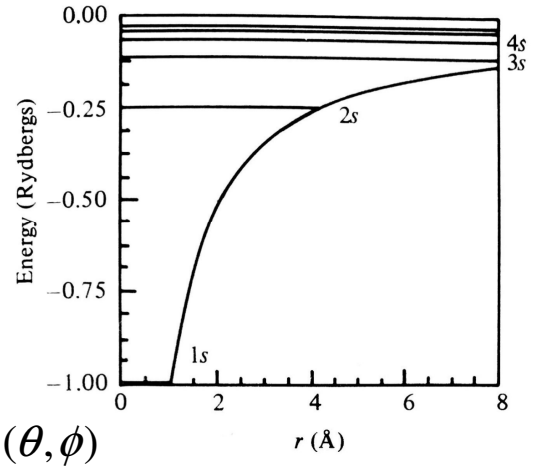
$$u_n(x)=\phi_n(\xi)=\left(\frac{m\Omega}{\hbar\sqrt{\pi}\,2^n n!}\right)^{1/2}H_n(\xi)\exp(-\frac{1}{2}\xi^2)$$

$$E_n=\hbar\omega_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\Omega,\quad n=0,1,2,\cdots$$

・水素原子

$$\hat{H}=\frac{p^2}{2m}-\frac{e^2}{r}$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-\frac{e^2}{r}$$



$$u_{nlm}(r,\theta,\phi)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$$

$$E_{nlm}=\hbar\omega_{nlm}=\hbar\omega_n=-\frac{e^2}{2a_0n^2}=-\frac{R_y}{n^2},\quad a_0=\frac{\hbar^2}{me^2}$$