一次元タイトバインディング模型の反射問題

永井佑紀

平成 20 年 9 月 20 日

1D tight-binding model の反射と透過の問題を考える。考える系は、原点の左側と右側でホッピングパラメータが異なる無限にのびる一次元鎖である。

1 ハミルトニアンと固有状態

考えるハミルトニアンは、最近接ホッピングのみ存在する一次元タイトバインディング模型：

$$H = \sum_i t_i c_{i+1}^\dagger c_i + t_i c_{i-1}^\dagger c_i + h.c. \tag{1}$$

である。また、$i = -N, -N+1, \cdots, -1, 0, 1, \cdots, N-1, N (N \to \infty)$ である。 このときの x 座標は $x = i$ と書くことにする。そして $x < 0$ からのホッピングを t_1、$x > 0$ からのホッピングを t_2 とする。これはつまり、ホッピングパラメータが異なる無限に伸びる一次元鎖を原点で接続した系を考えることに対応する。このハミルトニアンによるシュレーディンガー方程式の解がどのようになるのか、考えてみよう。

まず、このハミルトニアンを行列表示してシュレーディンガー方程式を書くと、

$$\hat{H}\mathbf{\Psi} = \epsilon \mathbf{\Psi} \tag{2}$$

$$\begin{pmatrix}
\ddots & \ddots & & & & & & & \cdots & 0 \\
\ddots & 0 & \ddots & & & & & & \cdots & \cdots \\
\ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & & & \cdots & \cdots \\
 & 0 & t_1 & 0 & t_1 & 0 & & & & \cdots \\
 & & 0 & t_1 & 0 & t_2 & 0 & & & \cdots \\
 & & & 0 & t_2 & 0 & t_2 & 0 & & \cdots \\
 & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \cdots \\
 & & & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & & & & & & \ddots & \ddots & \ddots \\
 & & & & & & & & \ddots & \ddots
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
\Psi_{-N} \\ \vdots \\ \\ \\ \Psi_{-1} \\ \Psi_0 \\ \Psi_1 \\ \\ \\ \vdots \\ \Psi_N
\end{pmatrix}
= \epsilon
\begin{pmatrix}
\Psi_{-N} \\ \vdots \\ \\ \\ \Psi_{-1} \\ \Psi_0 \\ \Psi_1 \\ \\ \\ \vdots \\ \Psi_N
\end{pmatrix} \tag{3}$$

と書ける。

このシュレーディンガー方程式は、

$$t_1 \Psi_{i-1} + t_1 \Psi_{i+1} = \epsilon \Psi_i \quad i < 0 \tag{4}$$

$$t_1 \Psi_{-1} + t_2 \Psi_{+1} = \epsilon \Psi_0 \tag{5}$$

$$t_2 \Psi_{i-1} + t_2 \Psi_{i+1} = \epsilon \Psi_i \quad i > 0 \tag{6}$$

の三種類に分類することができる。$i<0$ のとき、

$$\begin{aligned}\sum_k t_1\left[e^{ikx_{i-1}}\Psi(k)+e^{ikx_{i+1}}\Psi(k)\right] &= \sum_k \epsilon e^{ikx_i}\Psi(k) &(7)\\ \sum_k 2t_1\cos(ka)e^{ikx_i}\Psi(k) &= \sum_k \epsilon e^{ikx_i}\Psi(k) &(8)\end{aligned}$$

と書けるので[1]、平面波 $e^{\pm ikx_i}$ が解となっており、その固有値は $\epsilon_1(k)=2t_1\cos(ka)$ である。同様に、$i>0$ では、平面波 $e^{\pm ikx_i}$ が解となっており、その固有値は $\epsilon_2(k)=2t_2\cos(ka)$ である。したがって、エネルギー ϵ を固定したとき、$i<0$ の解 $\Psi^L(x_i)$ と $i>0$ の解 $\Psi^R(x_i)$ は

$$\begin{aligned}\Psi^L(x_i) &= Ae^{ik_1x_i}+Be^{-ik_1x_i} &(9)\\ \epsilon &= 2t_1\cos(k_1a) &(10)\\ \Psi^L(x_i) &= Ce^{ik_2x_i}+De^{-ik_2x_i} &(11)\\ \epsilon &= 2t_2\cos(k_2a) &(12)\end{aligned}$$

と書ける。ここで、k_1、k_2 はそれぞれの領域であるエネルギー ϵ が得られる波数である。

2　境界条件

式 (9)、(11) は、量子力学の教科書でよく扱われるポテンシャルによる散乱問題での波動関数と形式的によく似ている。量子力学の教科書での散乱問題では、接続する場所での境界条件として、「波動関数が連続」と「波動関数の一階微分が連続」を用いた。タイトバインディング模型の場合、「波動関数が連続」という条件は用いることができるが、離散系であるために「波動関数の一階微分が連続」という条件は微分が定義できないため使えない。しかしながら、何らかの条件式は存在しているはずである。その条件を考えてみよう。

まず、通常の量子力学でのシュレーディンガー方程式から「波動関数の一階微分が連続」という条件がどのように出てくるのか、おさらいすることにする。一次元シュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x)=\epsilon\Psi(x) \tag{13}$$

と書ける。ある場所 x_0 の近傍で積分をすると

$$\begin{aligned}-\lim_{\delta\to 0}\frac{\hbar^2}{2m}\int_{x_0-\delta}^{x_0+\delta}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x)dx &= \epsilon\lim_{\delta\to 0}\int_{x_0-\delta}^{x_0+\delta}\Psi(x)dx &(14)\\ -\frac{\hbar^2}{2m}\lim_{\delta\to 0}\left[\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x)\right]_{x_0-\delta}^{x_0+\delta} &= 0 &(15)\\ \frac{\partial}{\partial x}\Psi(x)\Big|_{+x_0} &= \frac{\partial}{\partial x}\Psi(x)\Big|_{-x_0} &(16)\end{aligned}$$

となり、「波動関数の一階微分が連続」が導かれる[2]。

一次元の自由電子一つのシュレーディンガー方程式のある点 x_0 での境界条件は、x_0 の両側の情報を含んでいる。したがって、タイトバインディング模型でのあるサイト i の境界条件も、両側の情報を含むような境界条件であるはずである。また、「連続系のシュレーディンガー方程式の解を求めた」という意味は、「あらゆる x でシュレーディンガー方程式が満たされている」ことを意味している。連続系のシュレーディンガー方程式には微分演算子が含まれており、ある点 x_0 で微分が連続である保証はないため、微分が連続でよく定義されている領域 $x_0-\delta<x<x_0$ と $x_0<x<x_0+\delta$ にわたって積分をして $\delta\to 0$ の極限を取ることによって、「x_0 でシュレーディンガー方程式を満たす波動関数の条件」が得られる。

[1]サイト間の距離を a とした。
[2]ただしデルタ関数がある場合はそこで不連続になる。

一方、「タイトバインディング模型でのシュレーディンガー方程式の解を求めた」という意味は、「あらゆる i でシュレーディンガー方程式が満たされている」ことを意味しており、これは行列形式のハミルトニアンで考えると、「すべての i に関する連立方程式の解を求める」ことを意味している。タイトバインディング模型のシュレーディンガー方程式には微分演算子は含まれていないので、わざわざ「$x_0-\delta<x<x_0$ と $x_0<x<x_0+\delta$ にわたって積分して $\delta\to 0$ の極限を取る」必要がない。よって、「x_0 でシュレーディンガー方程式を満たす波動関数の条件」を求める必要はなく、ただ「x_0 でのシュレーディンガー方程式」が「x_0 での境界条件」となっている。

長々と書いたが、結局、式（5）が x_0 での境界条件となっているのである。

3 透過係数と反射係数

エネルギー ϵ を持ち、$+x$ 方向に入射する平面波 $e^{ik_1x_i}$ の反射と透過の問題を考える。左側と右側でエネルギーが保存されているので、右側では平面波 $e^{ik_2x_i}$ が進む。左側と右側の波動関数 $\Psi^{L(R)}(x_i)$ は式 (9) と (11) で与えられる。ただし、右側の領域では $-x$ 方向に進む平面波はないので、$D=0$ である[3]。境界条件は、x_0 で波動関数が連続であるという条件と、x_0 でのシュレーディンガー方程式が満たされるという条件 (5)：

$$
\begin{aligned}
Ae^{ik_1x_0}+Be^{-ik_1x_0} &= Ce^{ik_2x_0} &(17)\\
t_1(Ae^{ik_1x_1}+Be^{-ik_1x_1})+t_2Ce^{ik_2x_1} &= \epsilon Ce^{ik_2x_0} &(18)
\end{aligned}
$$

である。この連立方程式から C を消去して整理すると、反射率 $R=|B|^2/|A|^2$ は

$$
R=\frac{|B|^2}{|A|^2}=t_2^2\frac{\epsilon^2\left(\frac{1}{2t_1}-\frac{1}{2t_2}\right)^2+\left(-\frac{1}{t_2}\sqrt{t_2^2-\left(\frac{\epsilon}{2}\right)^2}+\frac{1}{t_1}\sqrt{t_1^2-\left(\frac{\epsilon}{2}\right)^2}\right)^2}{\epsilon^2+\left(\sqrt{t_1^2-\left(\frac{\epsilon}{2}\right)^2}+\sqrt{t_2^2-\left(\frac{\epsilon}{2}\right)^2}\right)^2} \tag{19}
$$

と書くことができる。また、透過率 T は $T=1-R$ から得られる。

得られた透過率 T を横軸 $-2t_1<\epsilon<2t_1$、縦軸 $0<t_2<2t_1$ とした図を図.1 に示す。これを見ると、$t_2=t_1$ のときは完全透過（両側が等価であるため）、$\epsilon=0$ のときも完全透過（波数が等しいため）になることがわかる。また、$\epsilon>2t_2$ の領域では完全反射（$\epsilon=2t_2\cos(k_2a)$ なので $\epsilon>2t_2$ では右側に状態が存在しないため）になることがわかる。

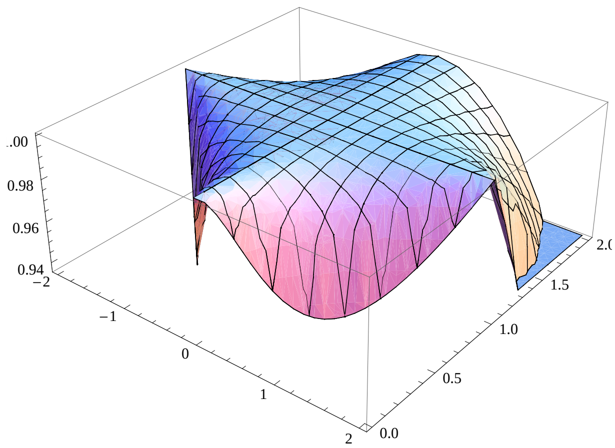

図 1: 一次元鎖のタイトバインディング模型の透過率。横軸 $-2t_1<\epsilon<2t_1$、縦軸 $0<t_2<2t_1$。

[3] 量子力学の教科書の問題と同じ。

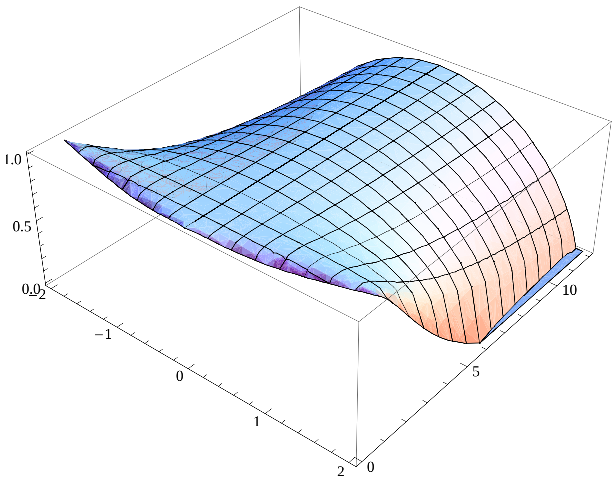

図 2: 一次元鎖のタイトバインディング模型の透過率。横軸 $-2t_1 < \epsilon < 2t_1$、縦軸 $0 < t_2 < 12t_1$。

4 まとめ

タイトバインディング模型の一次元鎖でも反射と透過の問題を扱えることがわかった。このときの境界条件は境界となっているサイト上でのシュレーディンガー方程式そのものであることがわかった。次は二次元境界面での反射の問題を考えてみたい。