量子力学 II 演習 問題 (第 4回)

樋口 さぶろお*

1999年5月20日

[4-Q1] 確率の流れ

1次元の波動関数 $\Psi(x,t)$ を考えたとき, 関数

$$\rho(x,t) := |\Psi(x,t)|^2 \tag{1}$$

は確率密度と解釈される. 確率流れ密度 $j(x,t)$ を

$$j(x,t) = \frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t)^* - \Psi(x,t)^*\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t)\right]$$

と定義する.

1. Hamiltonian $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ に対する Schrödinger 方程式を満たす波動関数 $\Psi(x,t)$ について, 局所的な確率保存則 (連続の式)
$$\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}j(x,t) = 0 \tag{2}$$
が成立することを示せ.
2. 次の波動関数について, 確率密度, 確率流れ密度を求めよ ($k, \omega, a, k_0 \in \mathbb{R}, A \in \mathbb{C}$).
$$\Psi(x,t) = A\exp(ikx - i\omega t),$$
$$\Psi(x,t) = A\exp(-x/a - i\omega t),$$
$$\Psi(x,t=0) = Aa\int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathrm{e}^{-a^2(k-k_0)^2/2}\mathrm{e}^{ikx}.$$

*hig@rice.c.u-tokyo.ac.jp, URL: http://rice.c.u-tokyo.ac.jp/~hig/, へや: 駒場 16 号館 809B, でんわ: (03)5454.6735

Remark. 確率流れ密度は, 3 次元では vector となり,

$$\mathbf{j}(\mathbf{x},t) = \frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi(\mathbf{x},t)\nabla\Psi(\mathbf{x},t)^* - \Psi(\mathbf{x},t)^*\nabla\Psi(\mathbf{x},t)\right] \tag{3}$$

と書かれる.

[4-Q2] 1次元での散乱問題

Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0), \\ V_0 > 0 & (x > 0). \end{cases} \tag{4}$$

に, $x = -\infty$ からエネルギー E の粒子が入射する散乱問題を考える.

1. エネルギーが $V_0 < E$ のとき, 透過係数, 反射係数を求めよ.

Hint. 透過係数, 反射係数の定義をよく思い出す.

2. エネルギーが $0 < E < V_0$ のとき, 透過係数, 反射係数を求めよ.

[4-Q3] 1 次元での散乱問題

1次元の potential のもとで, $x = -\infty$ の側から正の向きに入射する質量 m の粒子の散乱を考える:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x \le 0 : \text{領域 I}) \\ V_0 > 0 & (0 \le x \le a : \text{領域 II}) \\ 0 & (x \ge a : \text{領域 III}) \end{cases} . \tag{5}$$

エネルギー $0E > 0$ の粒子の透過係数, 反射係数を求めよ. 入射波がすべて反射されたり, すべて透過したりするようなエネルギー E はあるか.

方針が思い浮かばない人は, 以下の方針にしたがってもよい.

散乱されている粒子を表す波動関数 $\psi(x)$ は, 次を満たすと考えられる.

- Hamiltonian の固有関数である.
- $x \to -\infty$ での漸近形が, ある波数 $k > 0$ で$\psi(x) \sim A\exp[ikx] + B\exp[-ikx]$ である (ここで, $A\exp[ikx]$ が入射波, $B\exp[-ikx]$ が反射波を表す).
- $x \to +\infty$ での漸近形が, ある波数 $k > 0$ で$\psi(x) \sim C\exp[ikx]$ である (これは散乱波を表す. 粒子は負の方向から入射しているので, $D\exp[-ikx]$ のような成分はない).

1. Hamiltonian $H = p^2/2m + V(x)$ の固有値 E の固有関数を求めよ (領域 I, II, III にわけて考えよ).

Hint. 境界条件がないので, この段階では積分定数は決まらない.

2. 以下, $0 < E < V_0$ の場合を考える. 領域 III で x の正の方向に進む解 $\psi_{\mathrm{III}}(x) = C\mathrm{e}^{ikx}$ $(k > 0)$ を考えたとき, それに接続する領域 II での解を求めよ.

Hint. $x = a$ で, 波動関数とその微分の連続性が接続の条件.

3. 上で求めた領域 II での解を接続して領域 I の解を求めよ.
4. 確率流れ密度は

$$j(x,t) = \frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t)^* - \Psi(x,t)^*\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t)\right] \tag{6}$$

で定義されるのだった. 無限遠 $x \to \pm\infty$ での, 入射波, 反射波, 散乱波 (透過波) の確率流れ密度 $j_{\mathrm{I}}(x=-\infty), j_r(x=-\infty), j_t(x=+\infty)$ を用いて, 反射係数 R, 透過係数 T を

$$R := \frac{|j_r(x=-\infty)|}{|j_{\mathrm{I}}(x=-\infty)|}, T := \frac{|j_t(x=+\infty)|}{|j_{\mathrm{I}}(x=-\infty)|} \tag{7}$$

と定義する. これらを求めよ. 確率の保存 $R + T = 1$ は成り立っているか. E はあるか.

[4-Q4] 1次元での散乱問題

Potential が

$$V(x) = V_0 a\delta(x) \tag{8}$$

である場合に, 透過係数, 反射係数を求めよ.

Hint. $x = 0$ で波動関数は, 0 階微分は連続だが, 1 階微分は不連続. その跳びの大きさは, Schrödinger 方程式の両辺を, $(-\epsilon, +\epsilon)$ で積分して求める.

参考文献

[1] ランダウ, リフシッツ 量子力学 1,2 (東京図書)