量子力学 II 演習 問題 (第 5 回)

樋口 さぶろお*

1999 年 5 月 27 日

[5-Q1] 1 次元での散乱問題

Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0), \\ V_0 > 0 & (x > 0). \end{cases} \tag{1}$$

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.

[5-Q2] 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:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x \le 0 : \text{領域 I}) \\ V_0 > 0 & (0 \le x \le a : \text{領域 II}) \\ 0 & (x \ge a : \text{領域 III}) \end{cases} . \tag{2}$$

エネルギー $E > V_0$ および $0 < E < V_0$ 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.

*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

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 $\psi_{\mathrm{III}}(x) = Ce^{ikx}$ $(k > 0)$ 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
$$j(x,t) = \frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t)^* - \Psi(x,t)^*\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t)\right] \tag{3}$$
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
$$R := \frac{|j_r(x = -\infty)|}{|j_{\mathrm{I}}(x = -\infty)|}, T := \frac{|j_t(x = +\infty)|}{|j_{\mathrm{I}}(x = -\infty)|} \tag{4}$$
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.
5. 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.

[5-Q3] 1 次元での散乱問題

Potential が

$$V(x) = V_0 a\delta(x) \tag{5}$$

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.

[5-Q4] 反射係数, 透過係数の一般論

1 次元の Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (|x| > a > 0), \\ V(x) \not\equiv 0 & (|x| < a). \end{cases} \tag{6}$$

のもとでの散乱を考える. ただし, $V(x)$ は一般の有限なポテンシャルで, 具体的な形は特定せず, 区分的に定数とも限定しない. 領域 $x < -a$ での解を $A\mathrm{e}^{ikx} + B\mathrm{e}^{-ikx}$ 領域 $x > a$ での解を $C\mathrm{e}^{ikx} + D\mathrm{e}^{-ikx}$ と書く ($k \in \mathbb{R}$).

1. 線形関係

$$\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}, S_{ij} \in \mathbb{C} \tag{7}$$

   が成り立つことを納得せよ.

2. 行列 S が unitary であること, すなわち

$$S_{1i}S_{1i}^* + S_{2i}S_{2i}^* = 1 \quad (i = 1, 2), \quad S_{11}S_{21}^* + S_{12}S_{22}^* = 0 \tag{8}$$

   を示せ.

Hint. 確率保存則 (連続の式) の積分形を領域 $[-a, a]$ に使う.

3. このポテンシャルに, $x = -\infty$ から入射した粒子が散乱される場合と, $x = +\infty$ から入射した粒子が散乱される場合とを考える. 2 つの場合で, 反射係数, 透過係数がそれぞれ一致することを示せ.

[5-Q5] 1 次元の波動関数

次の手順にしたがって, 1 次元の Hamiltonian $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ の束縛された固有関数は縮退していないことを示せ.

1. $\psi_1(x), \psi_2(x)$ が, ともに固有値 E の固有関数であるとする. Wronskian $W[\psi_1, \psi_2](x) := \psi_1'(x)\psi_2(x) - \psi_2'(x)\psi_1(x)$ が, x について定数であることを示せ.

2. $\psi_1(x), \psi_2(x)$ が束縛状態であることから, $W[\psi_1, \psi_2](x) \equiv 0$ を示せ.
3. $\psi_1(x), \psi_2(x)$ が定数倍の関係にあることを示せ.

[5-Q6] 1 次元の偶なポテンシャル

1 次元で, ポテンシャル $V(x)$ が偶関数の場合の Hamiltonian $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ の束縛された固有関数 $\psi(x)$ を考える. 関数 $\psi(x)$ は偶関数または奇関数であることを示せ.

[5-Q7] 異なる固有値に属する波動関数の直交性

2 つの波動関数 $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ が Hamiltonian $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ の, 固有値 $E_1 \neq E_2$ の束縛された固有関数であるとき,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1^*(x)\psi_2(x) = 0$$

を示せ. (Hint: 部分積分)

参考文献

[1] ランダウ, リフシッツ 量子力学 1,2 (東京図書)