量子物理学特論

第5回

1次元の量子系

- シュレディンガー方程式が厳密に解けるような１次元の簡単な系を調べる

- １次元の量子系を解くことで，量子力学的効果のエッセンスを学ぶ

  - 反射・共鳴・トンネル効果

  - 束縛エネルギーの量子化

  - などなど

１次元シュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t)$$

変数分離して，固有値方程式に注目 $\psi(x,t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}\phi(x)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + V(x)\phi(x) = E\phi(x)$$

微分方程式の分類としては，Sturm-Liouville型

$$\frac{d}{dx}p(x)\frac{dy(x)}{dx} + q(x)y(x) = \lambda w(x)y(x)$$

と呼ばれる形の方程式。　固有値

$p(x)$,$q(x)$,$w(x)$の具体的な形によって，

ルジャンドル方程式，エルミート方程式，ベッセル方程式，

ラゲール方程式，チェビシェフ方程式，…

一般的性質

その１．離散スペクトルの現れるエネルギー準位は縮退しない

縮退とは？

２つの独立な固有関数に対し，エネルギー固有値が等しくなること

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi_1(x)}{dx^2}+V(x)\phi_1(x)=\boxed{E}\phi_1(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi_2(x)}{dx^2}+V(x)\phi_2(x)=\boxed{E}\phi_2(x)$$

同じ値

縮退

$$A=\begin{pmatrix}3&0&-1\\0&2&0\\-1&0&3\end{pmatrix}\qquad A\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}=2\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}\qquad A\begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix}=2\begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix}$$

一般的性質

その１. 離散スペクトルの現れるエネルギー準位は縮退しない

$$\frac{1}{\phi_1(x)}\frac{d^2\phi_1(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V-E) = \frac{1}{\phi_2(x)}\frac{d^2\phi_2(x)}{dx^2}$$

$$\phi_2(x)\frac{d^2\phi_1(x)}{dx^2} - \phi_1(x)\frac{d^2\phi_2(x)}{dx^2} = 0$$

$$\downarrow$$

$$\frac{d}{dx}\left[\phi_2(x)\frac{d\phi_1(x)}{dx} - \phi_1(x)\frac{d\phi_2(x)}{dx}\right] = 0$$

両辺を積分すると，

$$\phi_2(x)\frac{d\phi_1(x)}{dx} - \phi_1(x)\frac{d\phi_2(x)}{dx} = (\text{定数})$$

一般的性質

その１．離散スペクトルの現れるエネルギー準位は縮退しない

$$\phi_2(x)\frac{d\phi_1(x)}{dx} - \phi_1(x)\frac{d\phi_2(x)}{dx} = (\text{定数})$$

無限遠のふるまいから，この定数は０

$$\frac{1}{\phi_1(x)}\frac{d\phi_1(x)}{dx} = \frac{1}{\phi_2(x)}\frac{d\phi_2(x)}{dx}$$

置換積分を利用しつつ，両辺をもう１回積分する

$$\log\phi_1(x) = \log\phi_2(x) + C$$

つまり， $\phi_1(x) = C'\phi_2(x)$ であり，これら２つの波動関数は本質的に同一のものであることがわかる。（縮退はない）

一般的性質

その２. $V(x)$=$V(-x)$の場合，定常な束縛状態の波動関数は
φ(x)=φ($-x$)もしくはφ(x)=-φ($-x$)のどちらかである。

xを$-x$でおきかえる。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(-x)}{dx^2}+V(x)\phi(-x)=E\phi(-x)$$

φ(x)が固有値Eに属する解であれば，φ($-x$)も同じ固有値に属する解である。前述の性質により，

$\phi(-x)=C\phi(x)$ xを$-x$と書くと， $\phi(x)=C\phi(-x)$

よって， $\phi(-x)=C^2\phi(-x)$ なので $C^2=1$ $C=\pm 1$

$\phi(x)=\phi(-x)$ もしくは $\phi(x)=-\phi(-x)$

一定のポテンシャル

簡単な例として，ポテンシャルが定数の場合を考える。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2}+V_0\phi(x)=E\phi(x)$$

$$\downarrow$$

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)\phi(x)=0$$

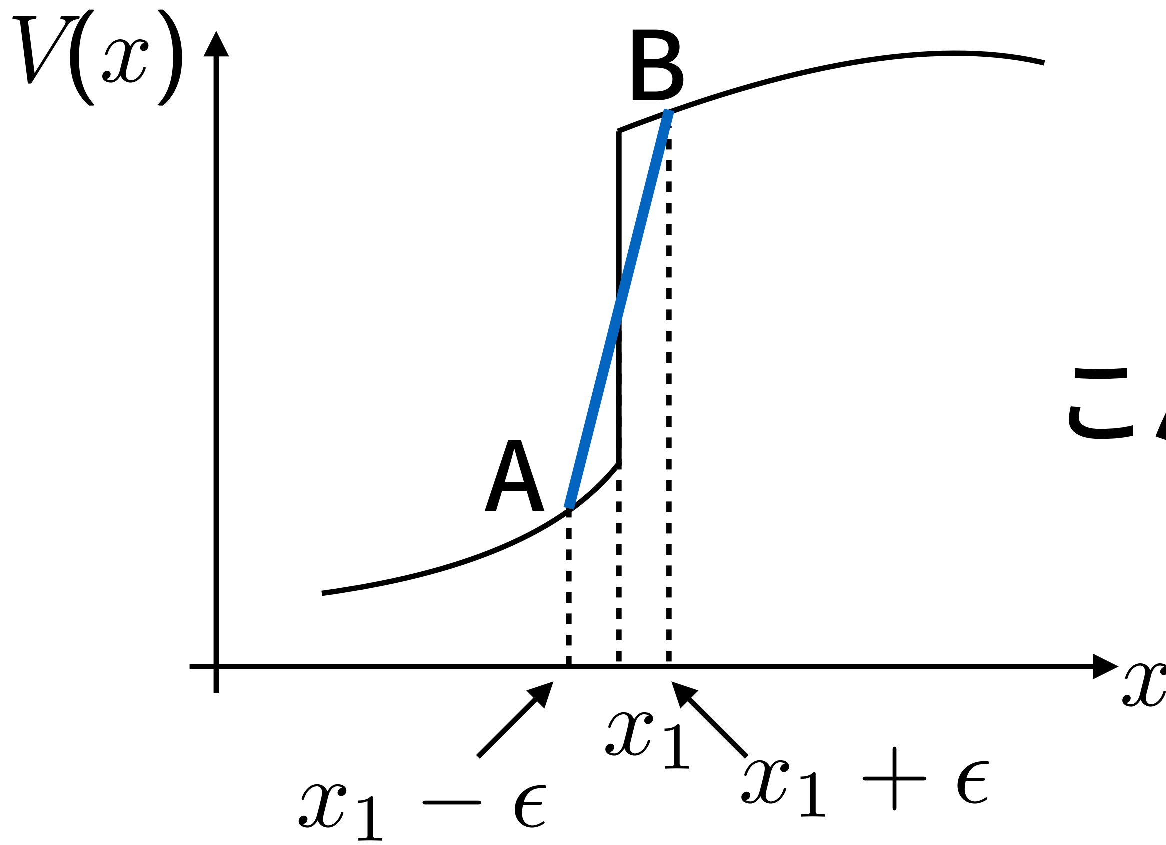
$E>V_0$の場合 $E-V_0=\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}$ なるkを導入すると，

$$\phi(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$$

$E<V_0$の場合 $V_0-E=\dfrac{\hbar^2\rho^2}{2m}$ として

$$\phi(x)=Ce^{\rho x}+De^{-\rho x}$$

ポテンシャルが有限のとびをもつとき



こんな場合を考える

AとBの間を青線のように変更したもの $V_\epsilon(x)$ を考える。

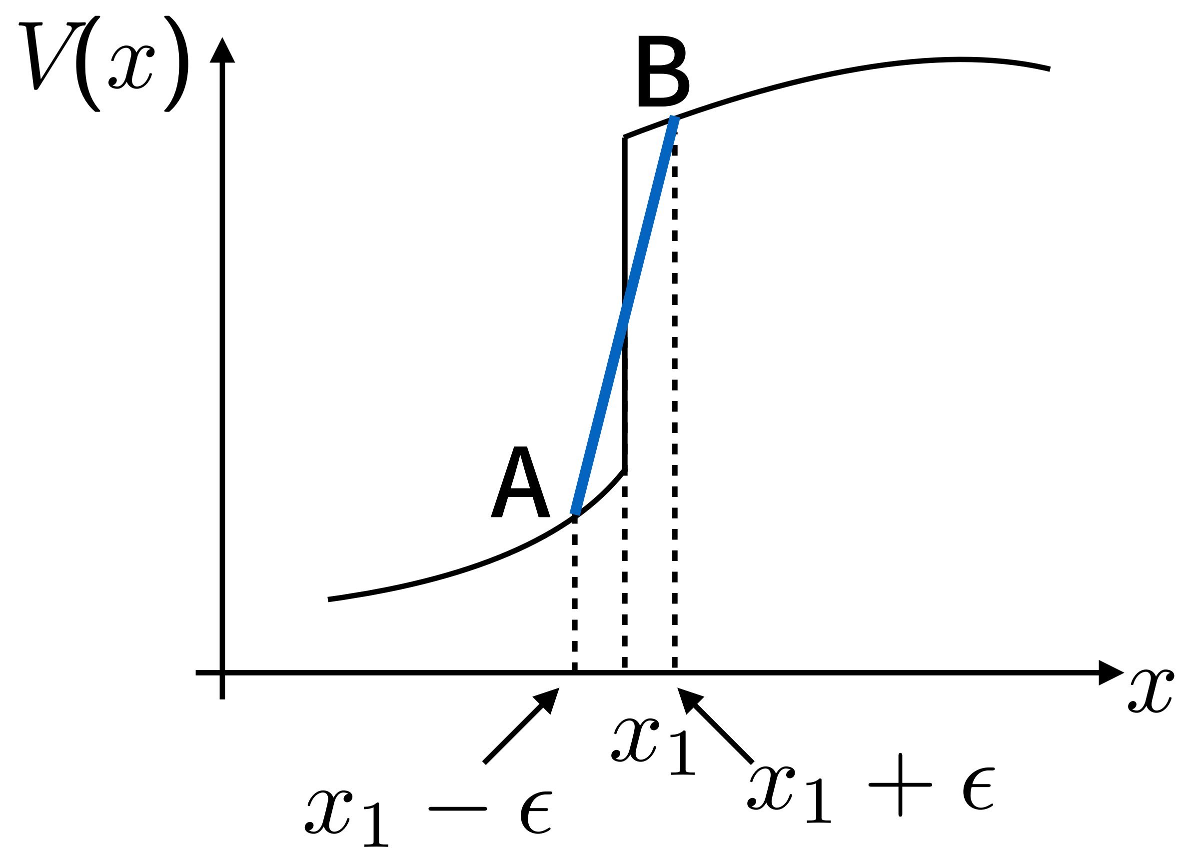
$$\lim_{\epsilon \to 0} V_\epsilon(x) = V(x)$$

$$\frac{d^2\phi_\epsilon(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_\epsilon(x))\phi_\epsilon(x) = 0$$

を　$x_1 - \delta < x < x_1 + \delta$ で積分して，

$$\int_{x_1-\delta}^{x_1+\delta} \frac{d^2\phi_\epsilon(x)}{dx^2}dx = \frac{d\phi_\epsilon(x_1+\delta)}{dx} - \frac{d\phi_\epsilon(x_1-\delta)}{dx} = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{x_1-\delta}^{x_1+\delta}(V_\epsilon(x) - E)\phi_\epsilon(x)dx$$

ポテンシャルが有限のとびをもつとき



確率密度は有限→ $\phi_\epsilon(x)$ は有界， $\lim_{\epsilon\to 0}\phi_\epsilon(x)=\phi(x)$

$$\int_{x_1-\delta}^{x_1+\delta}\frac{d^2\phi_\epsilon(x)}{dx^2}dx=\frac{d\phi_\epsilon(x_1+\delta)}{dx}-\frac{d\phi_\epsilon(x_1-\delta)}{dx}=\boxed{\frac{2m}{\hbar^2}\int_{x_1-\delta}^{x_1+\delta}(V_\epsilon(x)-E)\phi_\epsilon(x)dx}$$

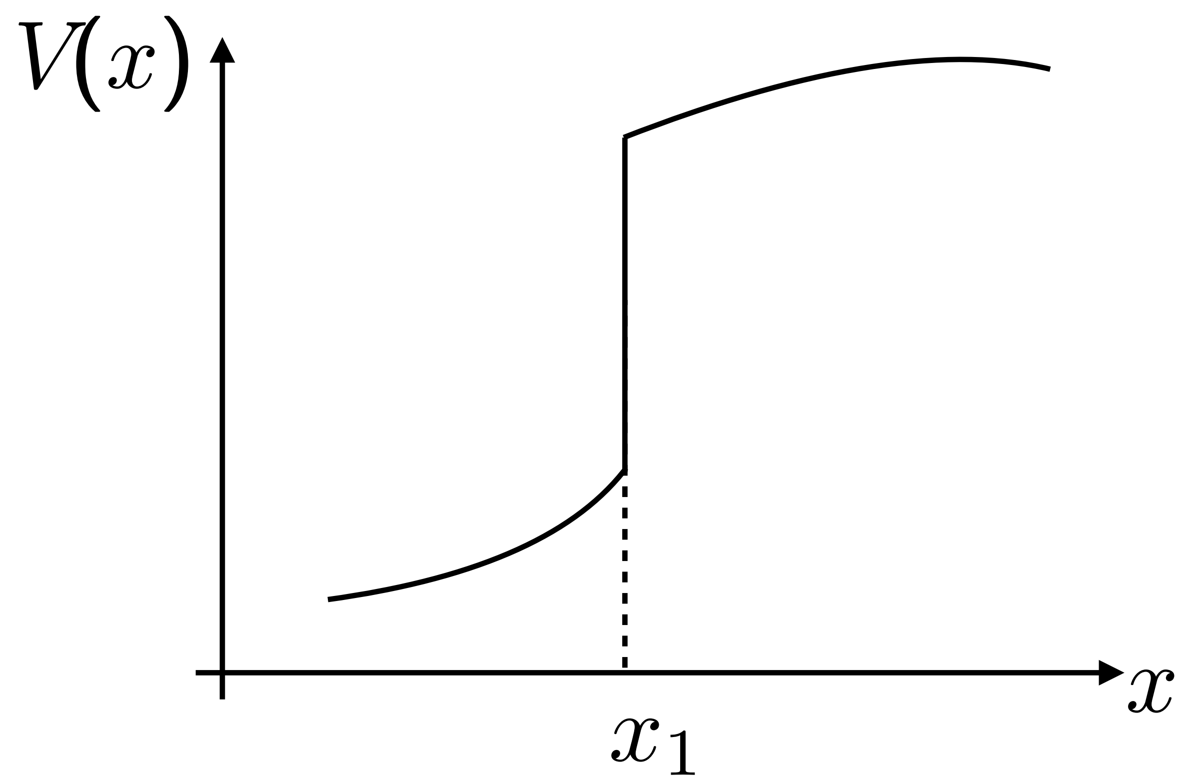
$\epsilon\to 0$ のとき

→0

$$\lim_{\delta\to 0}\frac{d\phi(x_1+\delta)}{dx}=\lim_{\delta\to 0}\frac{d\phi(x_1-\delta)}{dx}$$

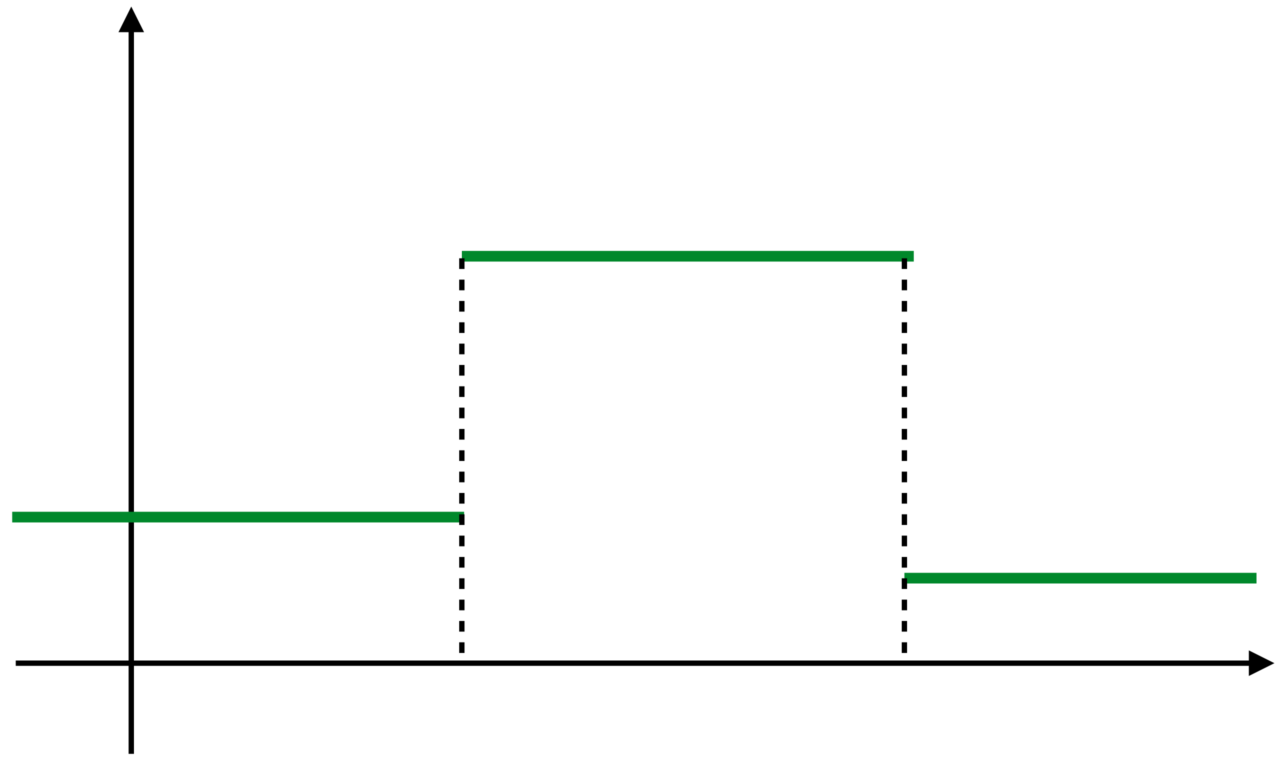
x=x_1で連続！

ポテンシャルが有限のとびをもつとき



このような場合でも，波動関数の１階微分 $\dfrac{d\phi(x)}{dx}$ や
波動関数 $\phi(x)$ は x=x_1 で連続である。

階段型ポテンシャルの定常状態



階段型ポテンシャルの定常状態は次で求められる

1. Vが一定のそれぞれの領域で解を求めておく

2. ポテンシャルが不連続になる点で，波動関数の１階微分と波動関数が連続であることを要求する。

デルタ関数ポテンシャルの場合

$V(x) = V_0\delta(x - x_1)$ の場合

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0\delta(x - x_1))\phi(x) = 0$$

$x_1 - \delta < x < x_1 + \delta$ で積分して，

$$\frac{d\phi(x_1 + \delta)}{dx} - \frac{d\phi(x_1 - \delta)}{dx} = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{x_1-\delta}^{x_1+\delta}(V_0\delta(x - x_1) - E)\phi(x)dx$$

$\delta \to 0$ では，

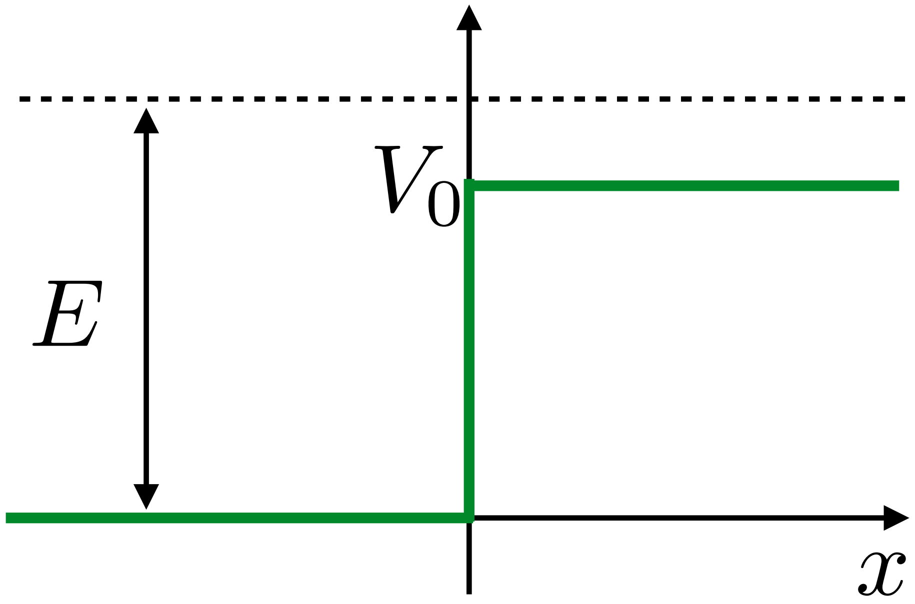
$$\frac{d\phi(x_1+)}{dx} - \frac{d\phi(x_1-)}{dx} = \frac{2m}{\hbar^2}V_0\phi(x_1)$$

この場合，波動関数の１階微分は不連続だが，波動関数は連続

階段型ポテンシャルの例

$E > V_0$ のとき

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\phi(x) = 0$$



$x<0$では

$$\phi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$x>0$では

$$\phi(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}$$

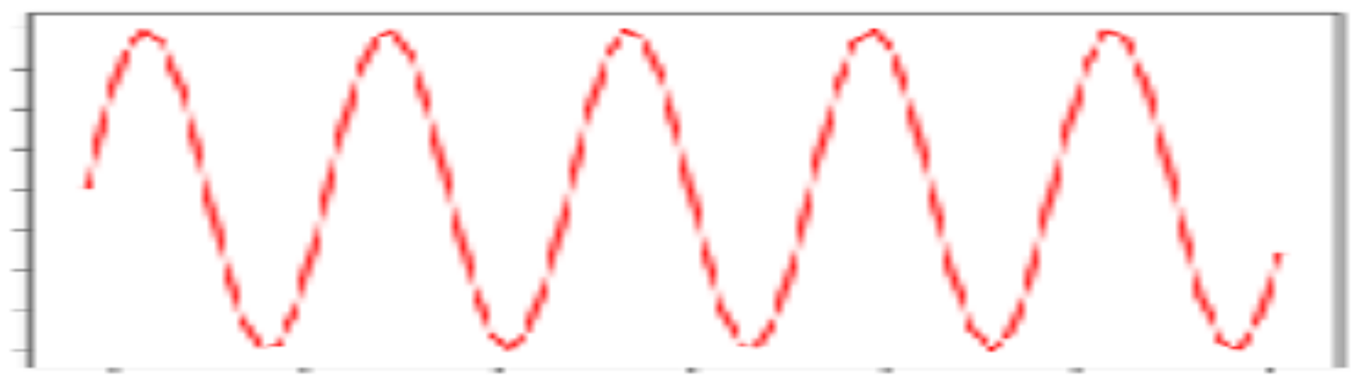
$$k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$$

波の進行方向のおさらい

$$\psi(x,t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}\phi(x) \qquad \phi(x) = e^{\pm ikx} \qquad k > 0$$

$$\phi(x) = e^{ikx}$$

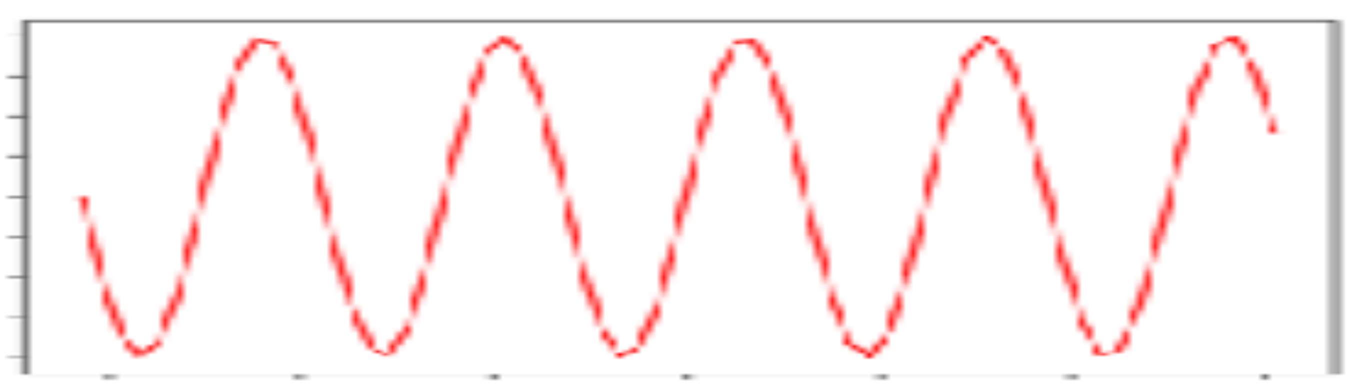
$$e^{-\frac{iEt}{\hbar}+ikx} = \cos(\frac{Et}{\hbar} - kx) - i\sin(\frac{Et}{\hbar} - kx)$$



右進行波

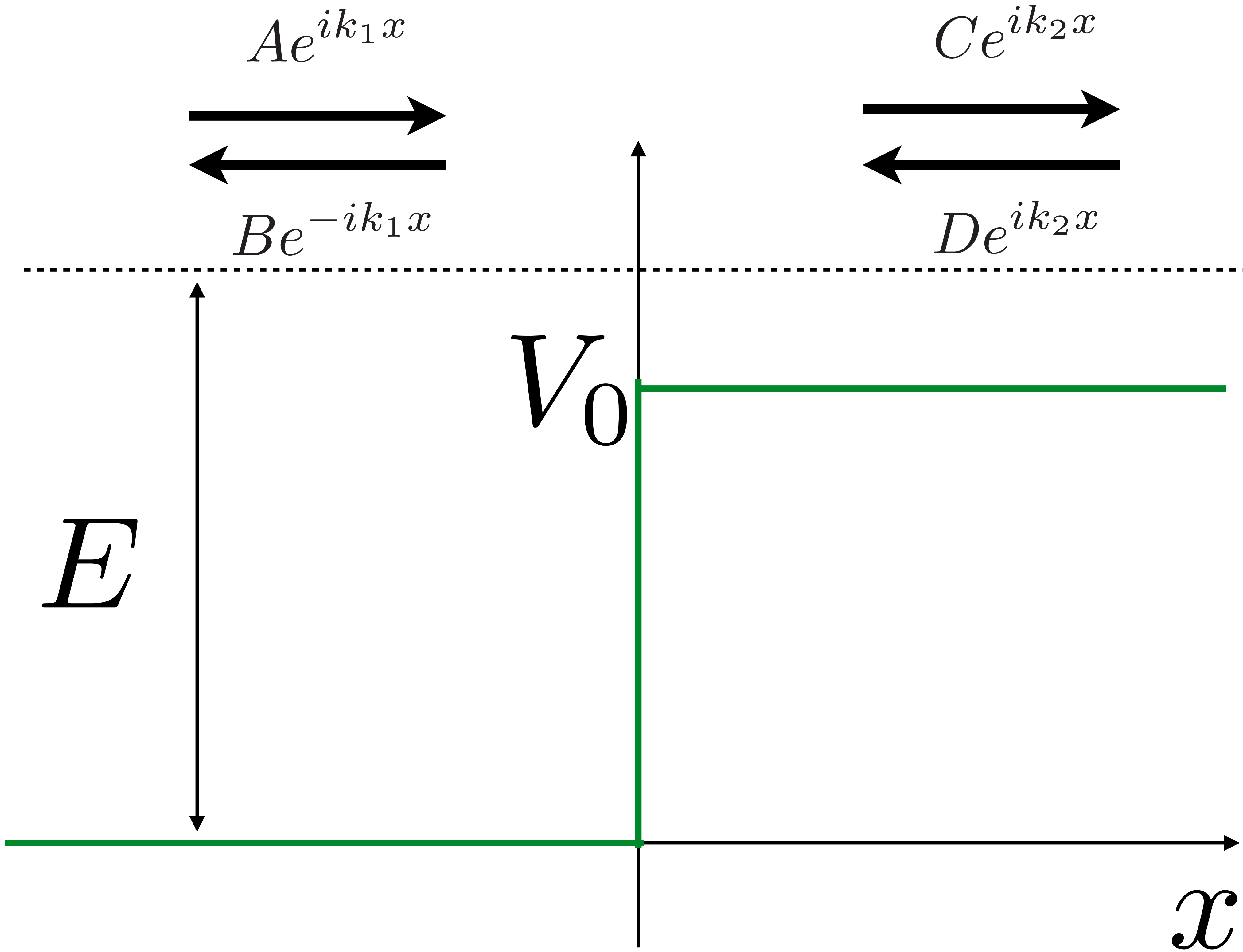
$$\phi(x) = e^{-ikx}$$

$$e^{-\frac{iEt}{\hbar}-ikx} = \cos(\frac{Et}{\hbar} + kx) - i\sin(\frac{Et}{\hbar} + kx)$$



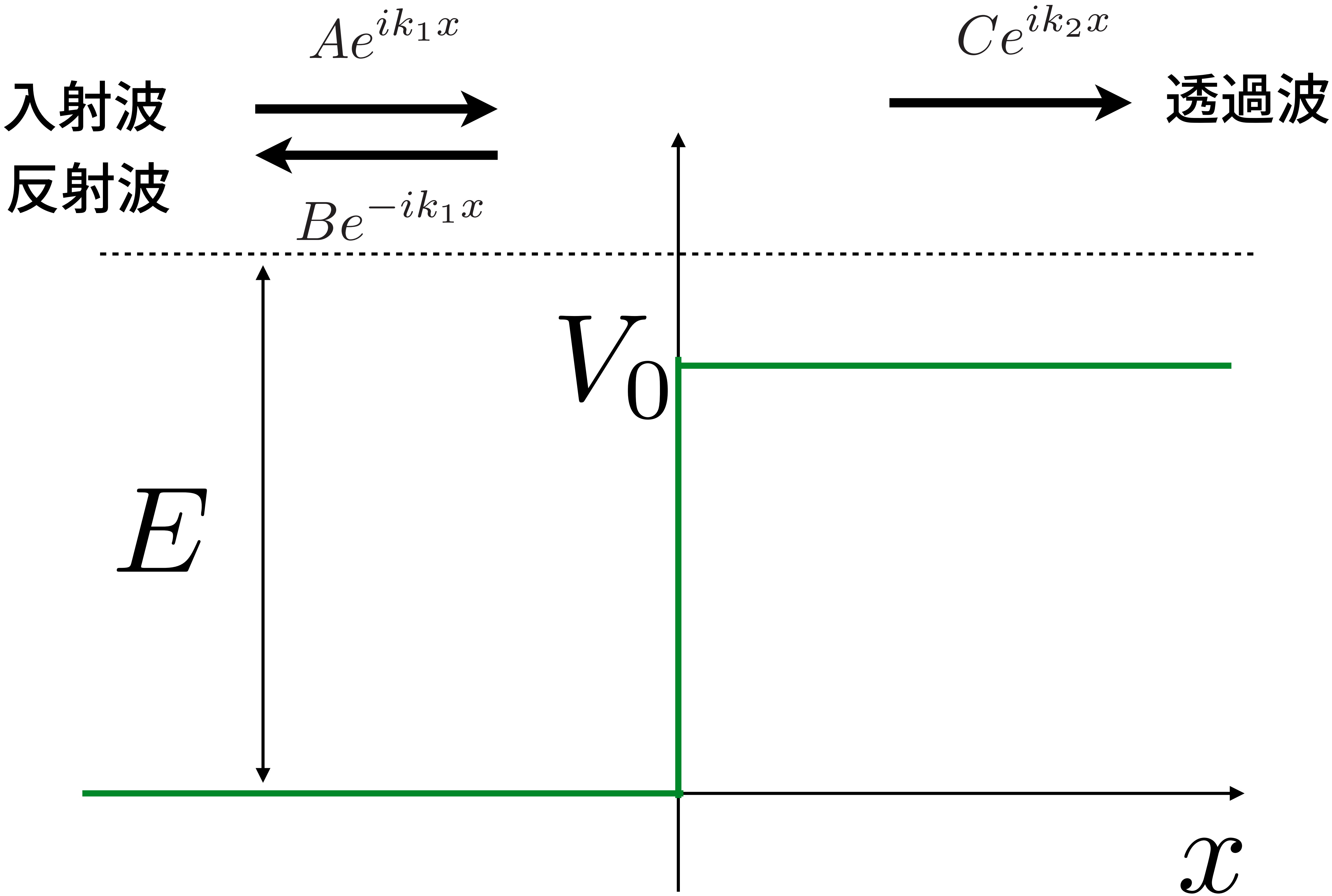
左進行波

階段型ポテンシャルの例



階段型ポテンシャルの例

入射波がx=-∞から右に進む場合



階段型ポテンシャルの例

x=0で2つの解をなめらかにつなぐ

$$\phi_1(0) = \phi_2(0) \qquad A + B = C$$

$$\frac{d\phi_1(0)}{dx} = \frac{d\phi_2(0)}{dx} \qquad k_1 A - k_1 B = k_2 C$$

よって，$$\frac{B}{A} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \qquad \frac{C}{A} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$$

確率の流れの密度を計算してみる

$$x < 0 \qquad j = \frac{\hbar}{2im}\left(\phi_1^* \frac{d\phi_1}{dx} - \frac{d\phi_1^*}{dx}\phi_1\right) = \frac{\hbar k_1}{m}\left(|A|^2 - |B|^2\right)$$

$$x > 0 \qquad j = \frac{\hbar}{2im}\left(\phi_2^* \frac{d\phi_2}{dx} - \frac{d\phi_2^*}{dx}\phi_2\right) = \frac{\hbar k_2}{m}|C|^2$$

反射と透過

$$x < 0 \qquad j = \frac{\hbar}{2im}\left(\phi_1^* \frac{d\phi_1}{dx} - \frac{d\phi_1^*}{dx}\phi_1\right) = \frac{\hbar k_1}{m}\left(\underbrace{|A|^2}_{j_{\text{入射}}} - \underbrace{|B|^2}_{j_{\text{反射}}}\right)$$

$$x > 0 \qquad j = \frac{\hbar}{2im}\left(\phi_2^* \frac{d\phi_2}{dx} - \frac{d\phi_2^*}{dx}\phi_2\right) = \underbrace{\frac{\hbar k_2}{m}|C|^2}_{j_{\text{透過}}}$$

反射率 $\quad R = \dfrac{j_{\text{反射}}}{j_{\text{入射}}} = \left(\dfrac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 = 1 - \dfrac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$

透過率 $\quad T = \dfrac{j_{\text{透過}}}{j_{\text{入射}}} = \dfrac{|C|^2}{|A|^2} = \dfrac{k_2}{k_1}\dfrac{4k_1^2}{(k_1 + k_2)^2} = \dfrac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$

$$T + R = 1$$

反射と透過

$$R = 1 - \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2} \qquad T = \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}$$

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad k_2 = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$$

- $E>V_0$のときでも粒子が一部反射される
(古典力学では速度が遅くなるだけで反射されない)

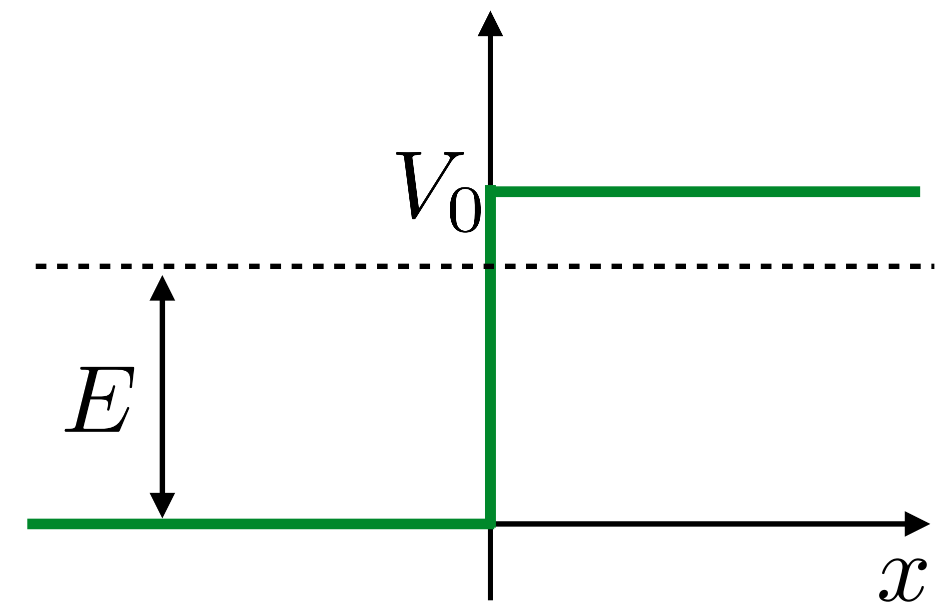
- $E>>V_0$のとき，k_2がk_1に近づく。つまり$R\rightarrow 0$であり，反射されなくなる。

- 練習問題：$E=V_0$のときはどうなるか？

階段型ポテンシャルの例

$E < V_0$ のとき

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\phi(x) = 0$$



$x<$**0では**

$$\phi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \qquad k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$x>$**0では**

$$\phi_2(x) = Ce^{-\rho x} \qquad \rho = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

階段型ポテンシャルの例

x=0で2つの解をなめらかにつなぐ

$$\phi_1(0) = \phi_2(0) \qquad A + B = C$$

$$\frac{d\phi_1(0)}{dx} = \frac{d\phi_2(0)}{dx} \qquad k_1 A - k_1 B = i\rho C$$

$$\frac{B}{A} = \frac{k_1 - i\rho}{k_1 + i\rho} \qquad \frac{C}{A} = \frac{2k_1}{k_1 + i\rho}$$

反射率と透過率は？

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = 1$$

$$j_{透過} = \frac{\hbar}{2im}\left(\phi_2^* \frac{d\phi_2}{dx} - \frac{d\phi_2^*}{dx}\phi_2\right) = \frac{|C|^2}{m}\mathrm{Re}\left(i\hbar\rho e^{-2\rho x}\right) = 0$$

反射と透過

$$\phi_1(x) = A\left(e^{ik_1x} + \frac{k_1 - i\rho}{k_1 + i\rho}e^{-ik_1x}\right) \quad \phi_2(x) = A\frac{2k_1}{k_1 + i\rho}e^{-\rho x}$$

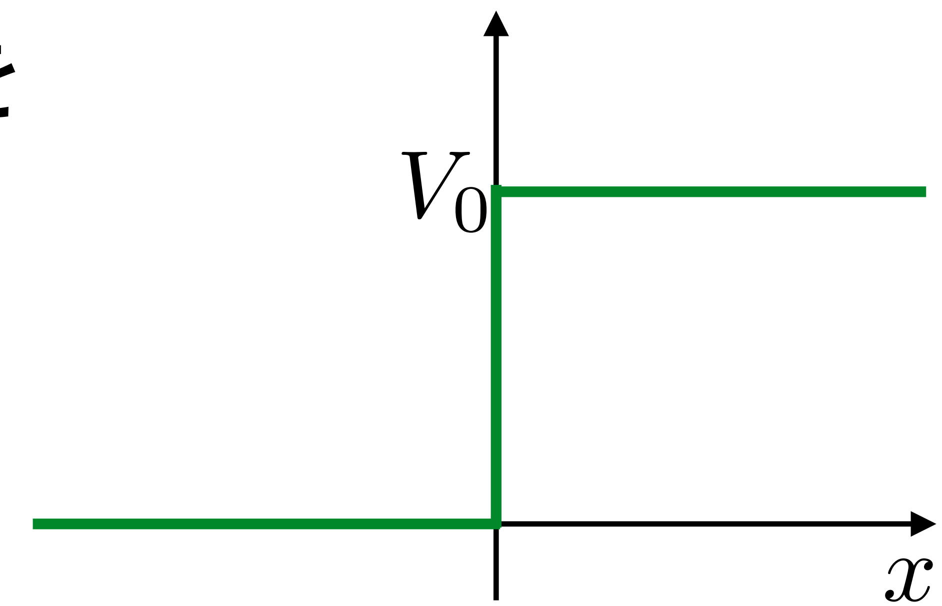
$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = 1$$

- R=0,T=1なので，全ての粒子は完全に反射され，透過波は存在しない。

- ただし，$x>$0にも波動関数が染み出す（粒子の存在確率が0ではない）染み出しは，壁の奥に行くと，expで急速に減衰する。

練習問題

E<V_0の電子が左から入射する場合を考える。



1. 古典的な禁止領域x>0に粒子が存在する確率が，x=0のときの存在確率に比べて1/eに減る距離Δxをもとめよ。

2. V_0=10eV，E=6eVのとき，Δxはどれくらいになるか？

参考： $\hbar c = 197\ \mathrm{MeV}\cdot\mathrm{fm}$ $\qquad mc^2 = 0.51\ \mathrm{MeV}$

練習問題

1 $$\phi_2(x) = A\frac{2k_1}{k_1 + i\rho}e^{-\rho x}$$ だから

$$\frac{|\phi(\Delta x)|^2}{|\phi(0)|^2} = e^{-2\rho\Delta x} = e^{-1}$$ を解いて

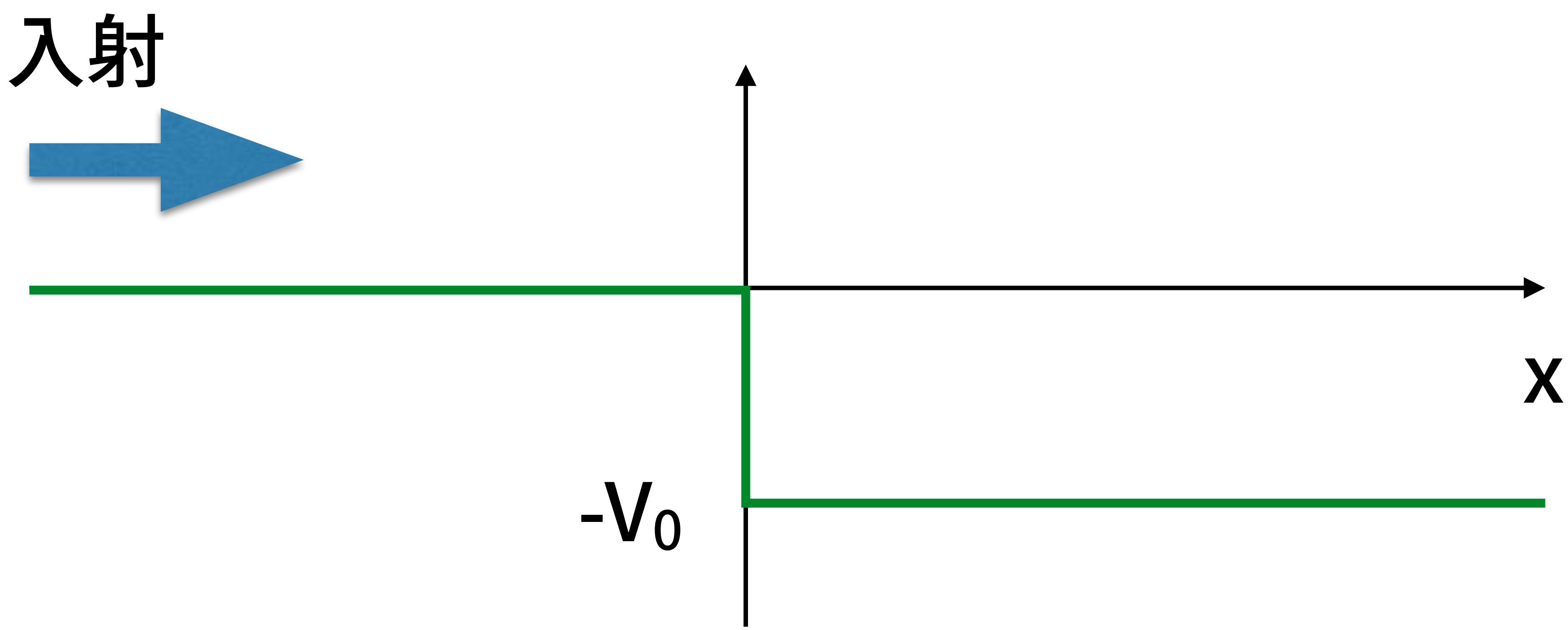
$$\Delta x = \frac{1}{2\rho} = \frac{1}{2}\frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

2

$$\Delta x = \frac{1}{2}\frac{197\mathrm{MeV}\cdot\mathrm{fm}}{\sqrt{2\times 0.51\mathrm{MeV}\times 4\mathrm{eV}}} \simeq 4.88\times 10^{-11}\mathrm{m} = 0.488\text{Å}$$

練習問題

運動エネルギーEの中性子が，x<0のときにV(x)=0, x>0のときにV=-V_0で与えられる1次元の原子核ポテンシャル模型にx=-∞から入射する。この中性子が原子核の表面で反射される確率を，E=5MeV，V_0=60 MeVの場合に計算せよ。



練習問題

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E + V_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E + V_0}}\right)^2 = \left(\frac{\sqrt{5} - \sqrt{65}}{\sqrt{5} + \sqrt{65}}\right)^2 \simeq 0.32$$