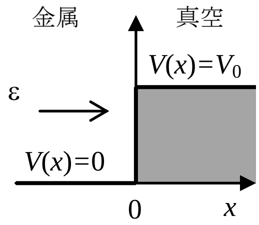
量子力学 I 演習　平成 26 年 7 月 16 日　　　　　　主専攻　　　　　　学籍番号　　　　　　氏名

I. 図のように階段型ポテンシャル壁$(V_0 > \varepsilon)$にエネルギーε、質量mの粒子が衝突する 1 次元運動を考える（真空に接した金属表面での自由電子の挙動に対するモデル)。この場合、単位時間当たり一定数の粒子が次々と壁に向かってきていて、時間に依存しない定常的運動状態が実現されているとみなせる。



(1)　時間を含まないシュレディンガー方程式の＊具体的な形＊を答えよ。

$x<0$の領域に対して：$-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}\varphi = \varepsilon\varphi$　　$x>0$の領域に対して：$-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}\varphi + V_0\varphi = \varepsilon\varphi$

(2)　上で求めた方程式に対して物理的に意味のある一般解の形を答えよ。

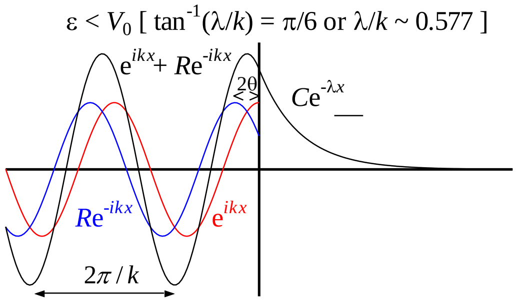
$x<0$の領域：シュレディンガー方程式$-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}\varphi = \varepsilon\varphi$に対して$k=\sqrt{\dfrac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}$（$k>0$）と置くと、$\dfrac{d^2}{dx^2}\varphi = -k^2\varphi$。この微分方程式の一般解は$I, R$を任意定数として$\varphi(x) = I\cdot e^{ikx} + R\cdot e^{-ikx}$ と表わせる。ここで、e^{ikx}の項は正の方向に進む粒子の運動を表す入射波に対応し、他方e^{-ikx}は負の方向に進む粒子の運動を表す反射波に対応する（注：量子力学的に$X(x)=Ae^{ikx}$は運動量$\hbar k$の自由粒子に対する固有関数)。$x>0$の領域：シュレディンガー方程式$-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}\varphi + V_0\varphi = \varepsilon\varphi$を$-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}\varphi + (V_0-\varepsilon)\varphi = 0$と変形し、さらに$\lambda = \sqrt{\dfrac{2m(V_0-\varepsilon)}{\hbar^2}}$（$\lambda>0$、$V_0>\varepsilon$であることに注意）と置くと、この方程式の数学的な一般解は$\varphi(x) = C'e^{\lambda x} + C\cdot e^{-\lambda x}$となる。しかしながら、$x\to+\infty$のとき$e^{\lambda x}\to+\infty$と発散するので$e^{\lambda x}$の項は解として物理的に不適である（波動関数の大きさの 2 乗が粒子の存在確率に対応するので、波動関数は有限でないといけない)。従って、物理的にふさわしい解の形としては$\varphi(x) = Ce^{-\lambda x}$である。

(3)　入射波の振幅に対する反射波及び透過波の振幅比を求めよ。（簡単のために入射波の振幅を 1 とせよ）

簡単のため入射波の振幅Iを 1 とすると、$x<0$での解は$\varphi(x) = e^{ikx} + R\cdot e^{-ikx}$、$x>0$では$\varphi(x) = Ce^{-\lambda x}$となる。時間に依存しないシュレディンガー方程式は位置に対する 2 階微分方程式となっているので、波動関数はいたるところで 1 回微分可能*でなければならない（注：ポテンシャル変化が無限大になる位置ではこの限りではない）。よって、$x=0$で値が連続との条件から、$e^{ik0} + R\cdot e^{-ik0} = Ce^{-\lambda 0}$。$\therefore 1+R=C$。$x=0$で$\varphi(x) = e^{ikx} + R\cdot e^{-ikx}$の左微分係数と$\varphi(x) = Ce^{-\lambda x}$の右微分係数が一致するとの条件から、$ike^{ik0} - ikR\cdot e^{-ik0} = -\lambda Ce^{-\lambda 0}$。$\therefore ik - ikR = -\lambda C$。

これらC, Rの連立方程式を解くことにより、$C = \dfrac{2ik}{ik-\lambda} = \dfrac{2k}{k+i\lambda}$、$R = C-1 = \dfrac{2k}{k+i\lambda} - 1 = \dfrac{k-i\lambda}{k+i\lambda}$

*ある点で 1 回微分可能　⇔　その点で値が連続かつ左微分係数と右微分係数が一致

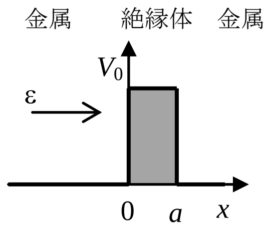


(4)　$V_0\to\infty$のとき、$x<0$や$x>0$の領域で波動関数はどのような形になるか説明せよ。

複素数$k+i\lambda$は偏角$\theta = \tan^{-1}(\lambda/k)$を用いて$k+i\lambda = \sqrt{k^2+\lambda^2}e^{i\theta}$、また$k-i\lambda = \sqrt{k^2+\lambda^2}e^{-i\theta}$となるので、$R = \dfrac{k-i\lambda}{k+i\lambda} = \dfrac{\sqrt{k^2+\lambda^2}e^{-i\theta}}{\sqrt{k^2+\lambda^2}e^{i\theta}} = e^{-2i\theta}$。一方、

$\cos\theta = \dfrac{k}{\sqrt{k^2+\lambda^2}}$であるから、$C = \dfrac{2k}{k+i\lambda} = \dfrac{2k}{\sqrt{k^2+\lambda^2}e^{i\theta}} = 2\cos\theta\cdot e^{-i\theta}$ と表される。$V_0\to\infty$のときには$\lambda/k = \sqrt{(V_0-\varepsilon)/\varepsilon}\to\infty$ゆえ$\theta\to\pi/2$。従って、入射波に対して反射波は振幅の大きさが等しく位相が完全に反転した状態となり、これらの重ね合わせで$x=0$では節となる定在波が形成される。また、$C\to 0$となって$\varphi(x)=0$、すなわち$x>0$の領域には粒子は侵入できなくなり、$x<0$の領域内に完全に閉じ込められるようになる。（無限に深い井戸に閉じ込められた場合の井戸の壁での状態に対応）。

II. 有限厚さのポテンシャル壁$V(x) = \begin{cases} 0 & (x<0, x>a) \\ V_0 & (0<x<a) \end{cases}$に質量$m$、エネルギー$\varepsilon < V_0$の粒子が負の方向から定常的に衝突する場合を表す波動関数$\varphi(x)$を求めよう。これは金属の自由電子が薄い絶縁層をトンネル効果で透過するモデルに相当する。



（１）時間に依存しないシュレディンガー方程式の＊具体的な形＊を答えよ。

$x<0, x>a$の領域：$-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}\varphi = \varepsilon\varphi$。$0<x<a$の領域：$-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}\varphi + V_0\varphi = \varepsilon\varphi$。

（２）上で求めた方程式の物理的に意味のある一般解の形は、$x<0$ では $\varphi(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$、$0<x<a$ では $\varphi(x)=Fe^{\lambda x}+Ge^{-\lambda x}$、$a<x$ では $\varphi(x)=Ce^{ikx}$ である。何故、$a<x$ では $\varphi(x)=Ce^{ikx}$ の形となるべきか理由を述べよ。但し、$k=\sqrt{2m\varepsilon/\hbar^2}$、$\lambda=\sqrt{2m(V_0-\varepsilon)/\hbar^2}$、$A,B,C,F,G$ は任意定数である。

$x>a$ ではポテンシャル壁を通り抜けた正の方向に進む透過波のみが存在するはずなので、物理的に意味のある波動関数は任意定数 C を用いて $\varphi(x)=Ce^{ikx}$ と表される。注：問題 I では $x>0$ の領域で $e^{\lambda x}$ の項を除外したが、ここでは壁の厚さが有限なため $e^{\lambda x}$ の項も有限に留まるため、除外する根拠は全くない。

（３）境界条件を考えることから、定数 B,C,F,G を定めるための連立方程式を答えよ。なお、簡単のために $A=1$ とせよ。

$x=0$ で値が連続という条件から、$e^{ik0}+Be^{-ik0}=Fe^{\lambda 0}+Ge^{-\lambda 0}$。よって　$1+B=F+G$　①。

$x=0$ で左右微係数が一致という条件から、$ike^{ik0}-ikBe^{-ik0}=\lambda Fe^{\lambda 0}-\lambda Ge^{-\lambda 0}$。よって、$ik-ikB=\lambda F-\lambda G$　②。

$x=a$ で値が連続という条件から、$Fe^{\lambda a}+Ge^{-\lambda a}=Ce^{ika}$　③。

$x=a$ で左右微係数が一致という条件から、$\lambda Fe^{\lambda a}-\lambda Ge^{-\lambda a}=ikCe^{ika}$　④。

（４）$B=\dfrac{(k^2+\lambda^2)\sinh(\lambda a)}{(k^2-\lambda^2)\sinh(\lambda a)+2ik\lambda\cosh(\lambda a)}$ となることを、実際に計算して示せ。

③、④より C を消去して $e^{\lambda a}(ik-\lambda)F=-e^{-\lambda a}(ik+\lambda)G$。この両辺に 2λ を掛け、①、②より F,G を B で表わした式 $2\lambda F=[(\lambda+ik)+(\lambda-ik)B]$、$2\lambda G=[(\lambda-ik)+(\lambda+ik)B]$ を代入して計算すると $B=\dfrac{(k^2+\lambda^2)(e^{\lambda a}-e^{-\lambda a})}{(\lambda+ik)^2e^{-\lambda a}-(\lambda-ik)^2e^{\lambda a}}=\dfrac{(k^2+\lambda^2)\sinh(\lambda a)}{(k^2-\lambda^2)\sinh(\lambda a)+2ik\lambda\cosh(\lambda a)}$。（ここでは計算の方針の一例のみを示したが、一度は各人できちんと計算して見ること！）

ちなみに、$|B|^2=\left|\dfrac{(k^2+\lambda^2)\sinh(\lambda a)}{(k^2-\lambda^2)\sinh(\lambda a)+2ik\lambda\cosh(\lambda a)}\right|^2=\dfrac{(k^2+\lambda^2)^2\sinh^2(\lambda a)}{(k^2+\lambda^2)^2\sinh^2(\lambda a)+4k^2\lambda^2}=\left[1+\dfrac{4k^2\lambda^2}{(k^2+\lambda^2)^2\sinh^2(\lambda a)}\right]^{-1}$

（５）$C=\dfrac{2ik\lambda e^{-ika}}{(k^2-\lambda^2)\sinh(\lambda a)+2ik\lambda\cosh(\lambda a)}$ となる（求めなくてもよい）。$|B|^2+|C|^2=1$ を示せ（入射波振幅が 1 なので $|B|^2$ は反射率、$|C|^2$ は透過率に対応）。

$$|C|^2=\left|\frac{2ik\lambda e^{-ika}}{(k^2-\lambda^2)\sinh(\lambda a)+2ik\lambda\cosh(\lambda a)}\right|^2=\frac{4k^2\lambda^2}{(k^2-\lambda^2)^2\sinh^2(\lambda a)+4k^2\lambda^2\cosh^2(\lambda a)}$$
$$=\frac{4k^2\lambda^2}{(k^2-\lambda^2)^2\sinh^2(\lambda a)+4k^2\lambda^2\left(1+\sinh^2(\lambda a)\right)}=\frac{4k^2\lambda^2}{(k^2+\lambda^2)^2\sinh^2(\lambda a)+4k^2\lambda^2}=\left[1+\frac{(k^2+\lambda^2)^2\sinh^2(\lambda a)}{4k^2\lambda^2}\right]^{-1}$$

$|B|^2=\dfrac{(k^2+\lambda^2)^2\sinh^2(\lambda a)}{(k^2+\lambda^2)^2\sinh^2(\lambda a)+4k^2\lambda^2}=\left[1+\dfrac{4k^2\lambda^2}{(k^2+\lambda^2)^2\sinh^2(\lambda a)}\right]^{-1}$ であるから、$|B|^2+|C|^2=1$、すなわち反射率と透過率の和は 1 となっていることが分かる。

（６）$\lambda a>>1$ のとき（例えば粒子のエネルギーεがポテンシャル V_0 に比べて十分小さい）、透過率が $\dfrac{16\varepsilon(V_0-\varepsilon)}{V_0{}^2}e^{-2\lambda a}$ と近似できることを示せ。

$\lambda a>>1$ のとき、$\sinh^2(\lambda a)>>1$ である。さらに、$k^2+\lambda^2=2mV_0/\hbar^2>2m\sqrt{\varepsilon(V_0-\varepsilon)}/\hbar^2=2k\lambda$ ゆえ、$(k^2+\lambda^2)^2\sinh^2(\lambda a)>>4k^2\lambda^2$。これらに加えて、$\sinh^2(\lambda a)\approx e^{2\lambda a}/4$ なる近似をすると、$|C|^2=\dfrac{4k^2\lambda^2}{(k^2+\lambda^2)^2\sinh^2(\lambda a)+4k^2\lambda^2}\approx\dfrac{4k^2\lambda^2}{(k^2+\lambda^2)^2\sinh^2(\lambda a)}\approx\dfrac{16k^2\lambda^2}{(k^2+\lambda^2)^2}e^{-2\lambda a}=\dfrac{16\varepsilon(V_0-\varepsilon)}{V_0{}^2}e^{-2\lambda a}$