量子力学の基礎
北野正雄 (京都大学大学院工学研究科)
kitano@kuee.kyoto-u.ac.jp　2007 年 10 月 16 日

第 10 章
シュレディンガーの波動方程式

シュレディンガーの波動方程式は粒子の運動をよく記述する．古典的な運動方程式から対応原理などを用いて導出される．ここでは, 回路モデルから波動方程式が自然な形で導かれ, 様々な性質に対してよいアナロジが成り立っていることを示す.

10.1　シュレディンガーの波動方程式

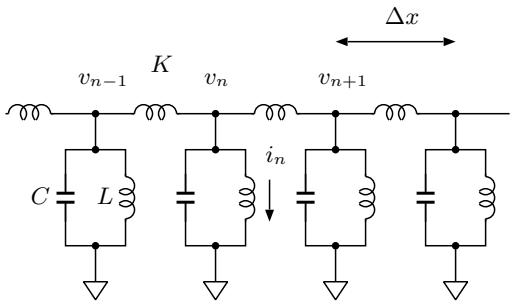
質量をもった粒子の量子力学的な振舞はシュレディンガーの波動方程式でよく表されることが知られている.

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t,\boldsymbol{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(t,\boldsymbol{r}) + V(\boldsymbol{r})\psi(t,\boldsymbol{r}) \tag{10.1}$$

m は粒子の質量, $V(\boldsymbol{r})$ は粒子に対するポテンシャルエネルギーを表す. $\psi(t,\boldsymbol{r})$ は確率振幅とよばれ, $|\psi(t,\boldsymbol{r})|^2\mathrm{d}r^3$ は $\boldsymbol{r}$ 付近の体積 $\mathrm{d}r^3$ に粒子を見出す確率を与えている.

量子力学の開拓者たちの試行錯誤の末, 発見されたこの方程式は, ひとたび与えられてしまえば, これをさまざまな問題に適用して, 解を求めることはそれほど困難なことではない. 実際, 量子力学のテキストの多くの部分は, 異なったポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ に対する解を求めることに割かれている.

一方, 発見の経緯をたどるためには, 解析力学の知識が要求される．実際, 古典的な対応物である, 運動方程式 $m(\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}/\mathrm{d}t^2) = -\boldsymbol{\nabla}V(\boldsymbol{r})$ とシュレディンガー



の波動方程式を関連づけるためには, かなりの手順を要する.

ここでは少し視点を変えて, 古典粒子との対応よりも, 波動を表す方程式としてのシュレディンガー方程式に注目してみる.

10.2 結合共振器列とシュレディンガー方程式

共振器の列に対する回路方程式が粒子の 1 次元運動を表すシュレディンガー方程式に帰着されること示そう. 図 10.2 に示すように, 隣接する並列 LC 共振器がコイル K で結合されているとする. n 番目の共振器の電圧を v_n, (共振器コイルの) 電流を i_n とおく.

$$
\begin{aligned}
&L\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}i_n = v_n \\
&C\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}v_n = -i_n + \frac{1}{K}\int(v_{n-1}-v_n)\mathrm{d}t + \frac{1}{K}\int(v_{n+1}-v_n)\mathrm{d}t
\end{aligned}
\tag{10.2}
$$

K^{-1} を含む項の影響が他の項に比べて十分小さいと仮定する. エネルギー的にも無視できるものとして, 全エネルギーが

$$
U = \frac{1}{2}\sum_n (Cv_n^2 + Li_n^2) = \mathrm{const} \tag{10.3}
$$

とみなせるものとする.

しばらく, K^{-1} を含む項を無視しておく. 複素数の変数

$$
u_n = \sqrt{\frac{C}{2U}}\,v_n + \mathrm{i}\sqrt{\frac{L}{2U}}\,i_n \tag{10.4}
$$

を導入すると, 方程式は

$$
\frac{\mathrm{d}u_n}{\mathrm{d}t} = -\mathrm{i}\omega u_n \tag{10.5}
$$

となる. ただし, $\omega = 1/\sqrt{LC}$. 解は

$$
u_n(t) = u_n(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{10.6}
$$

電流, 電圧に戻すと,

$$v_n(t) = \sqrt{\frac{U}{2C}}(u_n(t) + u_n^*(t)) = \sqrt{\frac{U}{2C}}(u_n(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + \mathrm{c.c.})$$
$$i_n(t) = \mathrm{i}\sqrt{\frac{U}{2L}}(u_n(t) - u_n^*(t)) = \mathrm{i}\sqrt{\frac{U}{2L}}(u_n(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} - \mathrm{c.c.}) \tag{10.7}$$

再び結合項を考慮に入れると, u_n の方程式は

$$\frac{\mathrm{d}u_n}{\mathrm{d}t} = -\mathrm{i}\omega u_n + \frac{1}{\sqrt{2CU}}\frac{L}{K}(i_{n-1} - 2i_n + i_{n+1}) \tag{10.8}$$

$\int v_n \mathrm{d}t \sim Li_n$ を利用した. $i_n(t)$ に含まれる複素数共役項 $u_n^*(t)$ は, 周波数の共鳴条件を満たさないために,

$$i_n(t) = \mathrm{i}\sqrt{\frac{U}{2L}}(u_n(t) - u_n^*(t)) \sim \mathrm{i}\sqrt{\frac{U}{2L}}u_n(t) \tag{10.9}$$

とおいてもよい. よって,

$$\frac{\mathrm{d}u_n}{\mathrm{d}t} = -\mathrm{i}\omega u_n + \frac{\mathrm{i}\omega}{2}\frac{L}{K}(u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}) \tag{10.10}$$

$\sum_n |u_n|^2 = 1$ である.

空間的に連続的な式に置き換えるために, 各共振器が長さ Δx を占めているとしよう. 定数は Δx に関して

$$C = \gamma\Delta x, \quad L = \lambda/\Delta x, \quad K = \kappa\Delta x \tag{10.11}$$

のように, また, 変数は

$$v_n = v_n, \quad i_n = j_n\Delta x, \tag{10.12}$$

のようにスケールしていると考えるのがよい. その結果, $u_n = \psi_n\sqrt{\Delta x}$ とおいて,

$$\frac{\mathrm{d}\psi_n}{\mathrm{d}t} = -\mathrm{i}\omega\psi_n + \frac{\mathrm{i}\omega}{\sqrt{2}}\frac{\kappa}{\gamma(\Delta x)^2}(\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}) \tag{10.13}$$

$\Delta x \to 0$ の極限をとると,

$$\frac{\partial\psi(x)}{\partial t} = -\mathrm{i}\omega\psi(x) + \mathrm{i}\omega\sigma\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} \tag{10.14}$$

$\sigma = (\lambda/\kappa)/2$, $\psi(n\Delta x) = \psi_n$ とおいた.

シュレディンガー方程式と比較するために, $\mathrm{i}\hbar$ をかけると,

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(x)}{\partial t} = -(\hbar\omega\sigma)\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + (\hbar\omega)\psi(x) \tag{10.15}$$

となるので,

$$m = \frac{\hbar}{2\omega\sigma}, \quad V = \hbar\omega \tag{10.16}$$

と考えればよいことが分かる.

回路モデルによって, シュレディンガー方程式と同型の波動方程式を得ることができた. このモデルを念頭におくことで, 波動方程式の解の性質や物理的な解釈がある程度容易になる.

まず, 空間の各点に振動子が配置され, その共振周波数 $\omega = 1/\sqrt{\gamma\lambda}$ がポテンシャル V に相当する. 共振回路の素子の定数を空間的にゆっくりと変化させると, 空間依存のポテンシャル $V(x)$ が実現できる.

振動数の絶対的な値は重要ではなく, 全体の周波数を ϖ だけ, ずらせるためには, $\psi' = \exp(-\mathrm{i}\varpi)\psi$ とおけばよい. $V'(x) = V(x) - \hbar\varpi$ となる. (ただし, 波動方程式を導出する際に用いた近似を考慮すると, 各共振器の周波数はある程度高くなければならない. 一旦, 波動方程式が得られた後は, 周波数の原点, すなわちエネルギーの原点は自由に変更することができる.)

電圧 v, 電流 i が複素振幅 ψ の実部と虚部にそれぞれ対応している. $|\psi|^2$ は長さあたりの振動 (波動) のエネルギーに相当する.

隣接する振動子同士の結合の強さ σ と質量 m が反比例している. これは, 質量が大きい粒子の場合, 振動が隣に伝わりにくいことを意味している.

10.3 連続状態のブラケット表示

この章では状態の数が無限の系を扱っている. 出発点である共振回路は添字が $n = \ldots, -1, 0, 1, \ldots$ と無限個の列になっている. 系の状態は, 各共振回路に対応する基底ケット $|n\rangle$ を導入して

$$|\psi\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} u_n |n\rangle \tag{10.17}$$

と表すことができる. 無限ではあるが, 条件 $\sum_n |u_n|^2 = 1$ が成り立っているので, 各瞬間には実質的にそれほど多くの共振器が寄与しているわけではない.

各共振器が空間的長さ Δx を占めているとする. 各共振器を 2 つに分割することを考えよう. $C \to C/2$, $L \to 2L$ とすれば, 共振周波数は変化しない. 分割された各共振器は空間的に $\Delta x/2$ を占める. このような分割を繰り返すことで, 離散化の粒度 Δx がどんどん小さくなり, ついには空間を連続的に扱えるようになる. すでに見たように, 振幅 u_n については, $x_n = n\Delta x \to x$ $(n \to \infty, \Delta x \to 0)$ に対応して

$$\psi_n = u_n/\sqrt{\Delta x} \quad \to \quad \psi(x) \overset{\mathrm{D}}{\sim} 1/\sqrt{\mathrm{m}} \tag{10.18}$$

のように連続関数 $\psi(x)$ に近づく. 極限をとる過程で, u_n は次第に小さくなるが, $u_n/\sqrt{\Delta x}$ は一定値に近づく[*1]. また, 基底に関しては,

*1) $|u_n|^2$ は共振器あたりのエネルギー, $|u_n|^2/\Delta x$ は長さあたりのエネルギーである.

$$|x_n\rangle = |n\rangle/\sqrt{\Delta x} \quad \to \quad |x\rangle \overset{\mathrm{D}}{\sim} 1/\sqrt{\mathrm{m}} \tag{10.19}$$

のように考えるとよいことが分かる. $|n\rangle$ の大きさは常に 1 なので, $|x_n\rangle$ の大きさは次第に大きくなる (発散する) ことに注意する.

極限において, 任意の状態ケットは

$$|\psi\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} u_n|n\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \psi_n|x_n\rangle\Delta x \quad \to \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)|x\rangle \mathrm{d}x \tag{10.20}$$

のように積分で表される. 基底の完備性も

$$\hat{1} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |n\rangle\langle n| = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |x_n\rangle\langle x_n|\Delta x \quad \to \quad \int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle\langle x|\mathrm{d}x \tag{10.21}$$

と積分で表示される. 基底の直交性は

$$\langle x_{n'}|x_n\rangle = \frac{\langle n'|n\rangle}{\Delta x} = \frac{\delta_{n',n}}{\Delta x} \quad \to \quad \langle x'|x\rangle = \delta(x'-x) \tag{10.22}$$

$\delta_{n',n}$ を連続変数に関する関数とみなすと, $|n'-n| < 1/2$, つまり $|x_{n'} - x_n| < \Delta x/2$ に対して 1, その他に対しては 0 となる. 幅 Δx, 高さ $1/\Delta x$ の矩形関数とみなすことができる. このような面積が 1 の関数は $\Delta x \to 0$ の極限でデルタ関数に近づく. 連続的な引数をもつ基底ケットはクロネッカーのデルタの代わりにディラックのデルタ関数によって正規化されるのである.

状態の大きさ (ノルム) は

$$\begin{aligned}\langle\psi|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x'\mathrm{d}x\langle x'|\psi^*(x')\psi(x)|x\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x'\mathrm{d}x\psi^*(x')\psi(x)\delta(x'-x) = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2\mathrm{d}x\end{aligned} \tag{10.23}$$

と書ける.

10.4 連続状態に対する演算子

演算子

$$\hat{n} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n|n\rangle\langle n| \tag{10.24}$$

は, 各共振器を区別する働きをする. つまり, これを物理量として測定すると, n 番目の共振器が振動していれば, 値 n が測定結果として得られる. これは, 2 状態系 (8 章) では $\hat{\sigma}_3/2$ に相当するものである. $\hat{n}\Delta x$ は位置を表す演算子となるが, 極限をとると,

$$\hat{n}\Delta x = \sum_{n=\infty}^{\infty} (n\Delta x)|x_n\rangle\langle x_n|\Delta x \quad \to \quad \hat{x} = \int_{-\infty}^{\infty} x|x\rangle\langle x|\mathrm{d}x \tag{10.25}$$

となり, 連続的な位置の演算子が得られる.

2 状態系における $\hat{\sigma}_1/2$, $\hat{\sigma}_2/2$ に対応するものは,

$$\hat{k}_1 = \frac{1}{2}\sum_{n=-\infty}^{\infty}(|n+1\rangle\langle n| + |n\rangle\langle n+1|),$$
$$\hat{k}_2 = \frac{1}{2\mathrm{i}}\sum_{n=-\infty}^{\infty}(|n+1\rangle\langle n| - |n\rangle\langle n+1|), \tag{10.26}$$

のような演算子である. これらは隣接する共振器の結合に対応している*2). 後に見るように, $\Delta x \to 0$ の極限で $\hat{k}_1 \to \hat{1}$, $\hat{k}_2/\Delta x \to \mathrm{i}\mathrm{d}/\mathrm{d}x$ となるので, 後者のみが自明でない意味をもつ.

$\hat{k}_2/\Delta x$ の $\Delta x \to 0$ での表式を求めておこう.

$$\begin{aligned}\frac{\hat{k}_2}{\Delta x} &= \frac{\mathrm{i}}{2\Delta x}\sum_{n'=-\infty}^{\infty}\sum_{n=-\infty}^{\infty}|n'\rangle(\delta_{n'+1,n} - \delta_{n',n+1})\langle n| \\ &= \mathrm{i}\sum_{n'=-\infty}^{\infty}\sum_{n=-\infty}^{\infty}|x_{n'}\rangle\frac{\delta_{n'+1,n} - \delta_{n',n+1}}{2(\Delta x)^2}\langle x_n|\Delta x\Delta x \\ &\to \mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x'\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x|x'\rangle\delta'(x'-x)\langle x| = -\hat{K}\end{aligned} \tag{10.27}$$

ここで,

$$\frac{\delta_{n'+1,n}}{\Delta x} \to \delta(x_{n'} - x_n + \Delta x),$$
$$\frac{\delta_{n',n+1}}{\Delta x} \to \delta(x_{n'} - x_n - \Delta x) \tag{10.28}$$

を用いた.

このように連続状態に対するブラケットと, それに作用する基本的な演算子 $\hat{x}$, $\hat{K}$ を導入することにより, 運動方程式 (10.15) は

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle, \quad \hat{H} = \frac{\hbar^2\hat{K}^2}{2m} + V(\hat{x}) \tag{10.29}$$

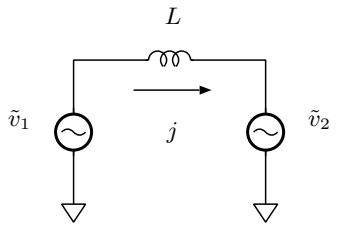
と表すことができる. $\mathrm{i}[\hat{K}, \hat{x}] = \hat{1}$ が成り立っている.

2 状態系においてパウリ演算子 $\{\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3\}$ が基本的な演算子であったが, 連続系では, $\{\hat{x}, \hat{K}, \hat{1}\}$ がその役割を果している.

10.5 確率の流れ

シュレディンガーの波動方程式において, 全確率 $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2\mathrm{d}x$ は保存される. また, 波動方程式は隣接相互作用しか含まないので, 確率の流れという概念が有効である. つまり, ある点における確率密度 $|\psi(x)|^2$ が時間変化するとき, そ

*2) 隣接する共振器間の結合しかないので, 必要な演算子の数は 2 状態系と同じ 3 個である. しかも, そのうちの 1 つは恒等演算子になってしまうので, 実質的には 2 個である



の変化分は隣接する場所から確率が流れ込むことによって生ずると考えてよい. シュレディンガーの波動方程式に対して, 電磁気学におけるエネルギー保存則 (ポインティングの定理) に相当するものを導くことができる. ここでは, まず回路モデルを利用して, 確率の流れに対する式を求めることにする. 回路モデルにおいて確率に対応するものはエネルギーである. 結合素子 K を通して流れる電力 P_n は電圧 v_n と素子を通過する電流 j_n の積である:

$$P_n = v_n j_n = v_n \frac{1}{K}\int (v_{n+1} - v_n)\mathrm{d}t \sim v_n \frac{L}{K}(i_{n+1} - i_n) \tag{10.30}$$

これを全エネルギー U で規格化した量 J_n ($\overset{\mathrm{D}}{\sim}$ 1/s) を u_n で表すと,

$$\begin{aligned} J_n = P_n/U &= \frac{\mathrm{i}}{2\sqrt{LC}}(u_n + u_n^*)\frac{L}{K}[(u_n - u_{n+1}) - (u_n^* - u_{n+1}*)] \\ &\sim \frac{\mathrm{i}\omega}{2}\frac{L}{K}[u_n^*(u_n - u_{n+1}) - u_n(u_n^* - u_{n+1}^*)] \\ &= \frac{\mathrm{i}\omega}{2}\frac{\lambda}{\kappa\Delta x^2}[\psi_n^*(\psi_n - \psi_{n+1}) - \psi_n(\psi_n^* - \psi_{n+1}^*)]\Delta x \end{aligned} \tag{10.31}$$

ここで, $\Delta x \to 0$ とすると

$$J(x) = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\psi\frac{\mathrm{d}\psi^*}{\mathrm{d}x} - \psi^*\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right) \quad \overset{\mathrm{D}}{\sim} \quad 1/\mathrm{s} \tag{10.32}$$

が得られる.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x = J(x_2) - J(x_1) \tag{10.33}$$

であることは簡単に確かめられる.

さらに, $\psi(x) = |\psi(x)|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta(x)}$ とおくと,

$$J(x) = \frac{\hbar}{m}|\psi(x)|^2 \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\theta(x) \tag{10.34}$$

となる. 確率の流れはその点での確率密度と位相の空間変化にそれぞれ比例していることが分かる.

とくに, 波数 k の準平面波の場合, すなわち, $\psi_0(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ において, $\psi_0(x)$ が空間的にゆっくり変化する場合には $J(x) = (\hbar k/m)|\psi_0(x)|^2$ であり, 波数 k, 速度 $v = \hbar k/m$ に比例する. $J(x) = v|\psi_0|^2$ と簡単化できる.

位相の空間変化 $\mathrm{d}\theta/\mathrm{d}x$ が確率の流れの向きを定めていることに注意する.

問題 10.1 x_0 に依存する演算子 $\hat{J}(x_0) = [\delta(\hat{x}-x_0)\hat{p} + \hat{p}\delta(\hat{x}-x_0)]/2$ の期待値を求めよ.

問題 10.2 複素振幅 $\tilde{v}_1$, $\tilde{v}_2$ をもつ電源がコイル L を通して接続されているとき, 電源間でやりとりされる電力を求めよ. 特に, 電源の位相差が電力に与える影響を調べよ.

シュレディンガー方程式から確率の流れの式を導くことは簡単にできる. 3 次元の場合に求めておこう. 式 (10.1) に ψ かけたものから, 式 (10.1) に複素共役に ψ^* をかけたものをひくと,

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 &= -\frac{\hbar^2}{2m}(\psi\nabla^2\psi^* - \psi^*\nabla^2\psi) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}\cdot(\psi\boldsymbol{\nabla}\psi^* - \psi^*\boldsymbol{\nabla}\psi) \end{aligned} \tag{10.35}$$

が得られる.

$$\boldsymbol{J} = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\psi\boldsymbol{\nabla}\psi^* - \psi^*\boldsymbol{\nabla}\psi) \tag{10.36}$$

と定義すると,

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = -\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{J} \tag{10.37}$$

あるいは, これを体積 V にわたって積分して, ガウスの定理を適用すると,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_V |\psi|^2 \mathrm{d}r^3 = -\oint_{\partial V} \boldsymbol{J}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S} \tag{10.38}$$

が得られる.

問題 10.3 1 次元の場合について, 式 (10.35) から (10.38) の議論を繰り返せ.

10.6 波動方程式の解法

10.6.1 時間定常解

ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ が時間を陽に含まない場合は, シュレデンガー方程式は

$$\psi(t,\boldsymbol{r}) = \phi(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{10.39}$$

の形の解を持つ. すなわち, 正弦波定常解である. これを波動方程式に代入すると,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r})\right]\phi(\boldsymbol{r}) = E\phi(\boldsymbol{r}) \tag{10.40}$$

が得られる. ただし, $E = \hbar\omega$. これは空間に関する偏微分方程式である. E (ω)

は未定定数であり, 境界条件によって決定される. 物理的には, E は全エネルギーに対応する.

E の可能な値を E_n とし, 対応する解を $\phi_n(\boldsymbol{r})$ とすれば, 元の波動方程式の一般解は

$$\psi(t,\boldsymbol{r}) = \sum_n c_n \phi_n(\boldsymbol{r}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar} \tag{10.41}$$

と表すことができる.

連続した E の値が許される場合もある. この場合には, 和の代わりに積分になるが, これについては後に詳しく説明する.

10.6.2 空間次元の低下

さらに, $V(\boldsymbol{r})$ が z に依存しない場合には,

$$\phi(\boldsymbol{r}) = \phi(x,y)\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_z z}, \tag{10.42}$$

z にも y にも依存しない場合には,

$$\phi(\boldsymbol{r}) = \phi(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_y y + \mathrm{i}k_z z}, \tag{10.43}$$

という形の解を求めることができる. たとえば, 後者に対しては

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\right]\phi(x) = \left[E - \frac{\hbar^2}{2m}(k_y^2 + k_z^2)\right]\phi(x) \tag{10.44}$$

という式を解けばよいことになって, $E' = E - (\hbar^2/2m)(k_y^2 - k_z^2)$ とおくことによって, 1 次元問題に帰着される.

10.6.3 1 次元一様ポテンシャル

ある区間 I でポテンシャルが一定であるとする: $V(x) = U$ $(x \in I)$. シュレディンガー方程式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x^2}\phi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\phi(x) \tag{10.45}$$

の解は, 全エネルギー $E = \hbar\omega$ とポテンシャル U の大小関係で全く異なってくる.

$E > U$ の場合には

$$\psi(x) = A\cos kx + B\sin kx \tag{10.46}$$

あるいは

$$\psi(x) = A'\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \tag{10.47}$$

の形で与えられる. ただし, $k = \sqrt{2m(E-U)}/\hbar$. とくに後者は前進波, 後進

波を表している.

$E < U$ の場合には,

$$\psi(x) = A'\mathrm{e}^{-\kappa x} + B'\mathrm{e}^{\kappa k x} \tag{10.48}$$

ただし, $\kappa = \sqrt{2m(U-E)}/\hbar$. 指数的に減少, あるいは増大する解になる. 古典的には運動エネルギーが負になることは許されないが, 量子論では限定された区間では上のような解が存在しうる.

10.7 井戸型ポテンシャル

もっとも簡単な場合から始める. 無限に高い壁をもつ井戸型ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} \infty & (x < -L/2) \\ 0 & (-L/2 \le x \le -L/2) \\ \infty & (x > L/2) \end{cases} \tag{10.49}$$

を考える. 境界条件は $\psi(-L/2) = \psi(L/2) = 0$ である. 回路モデルでは, 両端を接地して $v_{-n} = v_n = 0$ とした場合に相当する. 区間 $[-L/2, L/2]$ の外では $\phi(x) = 0$ と考えてよい.

微分方程式

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\phi(x) = -\frac{2m\omega}{\hbar}\phi(x) \tag{10.50}$$

の一般解の形は, A, B を任意定数として,

$$\psi(x) = A\cos kx + B\sin kx, \quad k = \sqrt{2m\omega/\hbar} \tag{10.51}$$

である. 境界条件に代入すると,

$$A\cos\frac{kL}{2} + B\sin\frac{kL}{2} = 0, \quad \text{かつ}, \quad A\cos\frac{kL}{2} - B\sin\frac{kL}{2} = 0 \tag{10.52}$$

となる. これが同時に成り立つためには, $B = 0$ の場合に

$$\cos\frac{kL}{2} = 0, \quad \text{すなわち}, \quad k = (2j+1)\frac{\pi}{L}, \tag{10.53}$$

または, $A = 0$ の場合に,

$$\sin\frac{kL}{2} = 0, \quad \text{すなわち}, \quad k = 2j\frac{\pi}{L}, \tag{10.54}$$

である. ただし, $j = \cdots, -1, 0, 1, 2, \cdots$ である. この段階で, 解の形は

$$\psi(x) = \begin{cases} A\cos\dfrac{(2j+1)\pi x}{L} \\ B\sin\dfrac{2j\pi x}{L}, \quad (j \ne 0) \end{cases} \tag{10.55}$$

となっている. k が (π/L) を単位として整数値をとり, 離散スペクトルになっている. k の符号を変えても高々係数が変わるだけで, 波動関数は本質的には変わらないので, $j = 1, 2, \cdots$ としてもよい.

係数を正規化するために, 2 乗積分すると

$$1 = \int_{-L/2}^{L/2} |A|^2 \cos^2 \frac{(2j+1)\pi x}{L} \mathrm{d}x = (L/2)|A|^2 \tag{10.56}$$

となり, $A = \sqrt{2/L}$ が得られる. 位相因子を実数になるようにとった. 同様にして, $B = \sqrt{2/L}$.

結局, $n = 2j+1$, あるいは $n = 2j$ とおいて,

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{L}} \cos \dfrac{n\pi x}{L} & (n = 1, 3, \ldots) \\ \sqrt{\dfrac{2}{L}} \sin \dfrac{n\pi x}{L} & (n = 2, 4, \ldots) \end{cases} \tag{10.57}$$

のような関数群が得られる. $k = n\pi/L$ であるので, エネルギーは

$$E_n = \frac{(\hbar k)^2}{2m} = \frac{(\hbar n \pi)^2}{2mL^2} \tag{10.58}$$

である.

エネルギーの固有ケットは

$$|n\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x)|x\rangle \mathrm{d}x, \quad (n = 1, 2, \ldots) \tag{10.59}$$

である. $\langle e_i|e_j\rangle = \delta_{ij}$ は簡単に確かめられる. 基底は無限個あるが, ラベルは離散的である. これは運動が空間の有限な領域に限定されていることの反映である.

n が奇数の波動関数は $x \to -x$ に対して, 符号を変えないが, 偶数の波動関数は符号を変える.

任意の状態は

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n |n\rangle = \int_{-L/2}^{L/2} \mathrm{d}x \left(\sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \right) |x\rangle \tag{10.60}$$

であり, その時間発展は

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n(t)|n\rangle, \quad c_n(t) = c_n(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar} \tag{10.61}$$

で与えられる.

問題 10.4 エネルギースペクトルの間隔が次第に大きくなってゆく理由を考えよ. 等間隔に近づけるにはポテンシャルの形をどのようにすればよいか, 定性的に考察せよ.

完全性はやや複雑である．今の場合，

$$\sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle\langle n| \neq \int_{-L/2}^{L/2} |x\rangle\langle x| \mathrm{d}x \tag{10.62}$$

であることが示せる．これは境界条件の制約のため，境界に近い $|x\rangle$ を自由に作ることができないからである．不一致を確認するためには，デルタ関数のフーリエ級数展開

$$\begin{aligned}\delta(x-a) &= \frac{1}{2\pi}\sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}n(x-a)} \\ &= \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty} \cos n(x-a), \quad x, a \in [-\pi, \pi]\end{aligned} \tag{10.63}$$

を使えばよい．

10.8 周期境界条件

井戸型ポテンシャルにおいて $L \to \infty$ とすれば，1 次元の全空間を自由に運動する粒子の状態を表すことができる．ただし，やや手続きがやや繁雑になるので，ここでは別の境界条件から出発する．すなわち，境界条件として，

$$\psi(-L/2) = \psi(L/2), \quad \psi'(-L/2) = \psi'(L/2) \tag{10.64}$$

を考える．ポテンシャルは $-L/2 \leq x \leq L/2$ において，$V(x) = 0$ とする．これは，回路モデルでは両端同士を接続して $v_{-n} = v_n$ としたことに相当する．このようなリング状の系においては，正負の方向の進行波が自然な状態であり，無限の場合にそのまま移行できるので好都合である．

解として，

$$\psi(x) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \tag{10.65}$$

をとり，境界条件に代入すると，$\sin kL/2 = 0$．すなわち，$k = 2j\pi/L$ $(j \in \mathbb{Z})$ が成り立てばよい．規格化は，

$$1 = \int_{-L/2}^{L/2} |A|^2 \mathrm{d}x = L|A|^2 \tag{10.66}$$

となり，$A = \sqrt{1/L}$ が得られる．位相因子を実数になるようにとった．結局，

$$\psi_j(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\pi jx/L} \quad (j = \cdots, -1, 0, 1, 2, \cdots) \tag{10.67}$$

が得られる．エネルギーは $E = (\hbar k)^2/2m = (j\hbar\pi)^2/2mL^2$ で，$j = 0$ 以外は，すべて 2 重に縮退している．

対応するケットは

$$|j\rangle = \int_{-L/2}^{L/2} \psi_j(x)|x\rangle \mathrm{d}x = \int_{-L/2}^{L/2} \frac{\mathrm{e}^{2i\pi jx/L}}{\sqrt{L}}|x\rangle \mathrm{d}x \tag{10.68}$$

である．正規性 $\langle j'|j\rangle = \delta_{j'j}$ $(j', j = \cdots, -1, 0, 1, 2, \cdots)$ は簡単に確かめられる[*3)]．

完全性は

$$\begin{aligned}\sum_{j=-\infty}^{\infty} |j\rangle\langle j| &= \frac{1}{L}\sum_{j=-\infty}^{\infty} \int_{-L/2}^{L/2} \mathrm{d}x' \int_{-L/2}^{L/2} \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi j(x-x')/L}|x\rangle\langle x'| \\ &= \int_{-L/2}^{L/2} \mathrm{d}x' \int_{-L/2}^{L/2} \mathrm{d}x\, \delta(x-x')|x\rangle\langle x'| \\ &= \int_{-L/2}^{L/2} \mathrm{d}x\, |x\rangle\langle x| = \hat{1}\end{aligned} \tag{10.69}$$

となる．デルタ関数の公式 (10.63) を用いた．井戸型ポテンシャルの場合と異なり, 境界の影響がないことに注意する．

状態 $|j\rangle$ は演算子 $\hat{K}$ の固有ケットになっている;

$$\hat{K}|j\rangle = (2\pi j/L)|j\rangle. \tag{10.70}$$

境界条件をみたす任意の状態は

$$|\psi\rangle = \sum_{j=-\infty}^{\infty} c_j|j\rangle = \int_{-L/2}^{L/2} \psi(x)|x\rangle \mathrm{d}x \tag{10.71}$$

と表すことができる．

無限系

自由粒子の状態を求めるために, $L \to \infty$ の極限を考える[*4)]．

$\Delta k = 2\pi/L$ とおくと, 各 k は, $k_j = j\Delta k$ と表すことができる．$L \to \infty$ に伴って $\Delta k \to 0$ となり, 連続的なベクトルに移行する．$k_j = j\Delta k$ とおいて,

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \sum_{j=-\infty}^{\infty} c_j|j\rangle = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \frac{c_j}{\sqrt{\Delta k}}\frac{|j\rangle}{\sqrt{\Delta k}}\Delta k \\ &= \sum_{j=-\infty}^{\infty} \phi(k_j)|k_j\rangle\Delta k \to \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k)|k\rangle \mathrm{d}k \quad (\Delta k \to 0)\end{aligned} \tag{10.72}$$

のような変形を行うことができる．

式 (10.68) に $\Delta k = 2\pi/L$ を代入すると,

$$|j\rangle = \sqrt{\frac{\Delta k}{2\pi}} \int_{-2\pi/\Delta k}^{2\pi/\Delta k} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(j\Delta k)x}|x\rangle \mathrm{d}x \tag{10.73}$$

となる．さらに,

---

*3) 類似の (双対的) な計算はすでに 10.3 節で行っている．

*4) 回路モデルでは, まず $L = \infty$ の状況から始めて, $\Delta x \to 0$ の極限を考えた．ここでは, $\Delta x = 0$ を前提に, $L \to \infty$ の極限を考える．

$$|k_j\rangle = \frac{|j\rangle}{\sqrt{\Delta k}} \quad \to \quad |k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}|x\rangle \mathrm{d}x \tag{10.74}$$

と表せる．これより, 直交性 $\langle k'|k\rangle = \delta(k'-k)$, 完全性 $\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}k|k\rangle\langle k| = \hat{1}$ は簡単に示すことができる．

状態のラベルとして, 波数 k の代わりに運動量 $p\,(=\hbar k)$ を利用する場合を考えよう．区別のために, $\phi_p(\ )$, $|\ \rangle_p$ のように添字をつける:

$$\begin{aligned}\phi_p(p)|p\rangle_p \mathrm{d}p &= \phi_k(k)|k\rangle_k \mathrm{d}k \\ &= \phi_k(p/\hbar)|p/\hbar\rangle_k(\hbar^{-1}\mathrm{d}p) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\hbar}}\phi_k(p/\hbar)\frac{1}{\sqrt{\hbar}}|p/\hbar\rangle_k \mathrm{d}p \end{aligned} \tag{10.75}$$

より,

$$\phi_p(p) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}}\phi_k(p/\hbar), \quad |p\rangle_p = \frac{1}{\sqrt{\hbar}}|p/\hbar\rangle_k \tag{10.76}$$

とおけばよいことが分かる．より具体的には,

$$|p\rangle_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}|x\rangle \mathrm{d}x. \tag{10.77}$$

波数 k の代わりにエネルギー $E\,(=\hbar^2k^2/2m)$ を利用する場合には,

$$\begin{aligned}\phi_E(E)|E\rangle_E \mathrm{d}E &= \phi_k(k)|k\rangle_k \mathrm{d}k \\ &= \phi_k(\sqrt{2mE}/\hbar)|\sqrt{2mE}/\hbar\rangle_k(\hbar^{-1}\sqrt{m/2E})\mathrm{d}E \\ &= \frac{1}{\sqrt{\hbar v}}\phi_k(\sqrt{2mE}/\hbar)\frac{1}{\sqrt{\hbar v}}|\sqrt{2mE}/\hbar\rangle_k \mathrm{d}E \end{aligned} \tag{10.78}$$

であり, $\sqrt{m/2E} = v$ であることを利用すると,

$$\phi_E(E) = \frac{1}{\sqrt{\hbar v}}\phi_k(\sqrt{2mE}/\hbar), \quad |E\rangle_E = \frac{1}{\sqrt{\hbar v}}|\sqrt{2mE}/\hbar\rangle_k \tag{10.79}$$

とおけばよいことが分かる．$v = \hbar k/m$ とおいた．E の固有ケットは

$$|E,\pm\rangle_E = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar v}}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\sqrt{2mE}x/\hbar}|x\rangle \mathrm{d}x \tag{10.80}$$

と表せる．エネルギーで正規化する場合には, 因子 $1/\sqrt{2\pi\hbar v}$ がつくことに注意する．“±” はエネルギー的に縮退した 2 つの状態を区別するためのものである．

連続スペクトルの場合, ラベルとなる変数のとりかたによって, 波動関数や基底ケットの正規化が異なるので注意が必要である．(いずれも変数の次元の平方根の次元を持つ.)

状態密度

極限操作によって, 状態が連続的にパラメータづけされるようになると, 状態の数を把握するために, 状態密度という概念が必要となる場面がある. (特に同じ状況に置かれた多数の粒子を扱う場合などである.) 今の場合, k 空間で隣接する固有値の間隔は $2\pi/L$ なので, 波数当たりの固有ケットの数は $L/2\pi$ である. 系のサイズ L が大きくなるほど, 波数あたりの状態数が大きくなる. 波数あたり, 系のサイズあたり*5) の状態数を状態密度といい, 今の場合は,

$$g_k(k) = 1/2\pi \quad \overset{\mathrm{D}}{\sim} \quad (1/\mathrm{m})^{-1}/\mathrm{m} = 1 \tag{10.81}$$

となる.

エネルギーに関する状態密度 $g_E(E)$ を求めてみよう. $E = \hbar^2 k^2/2m$ なので, エネルギー間隔は $\mathrm{d}E = (\hbar^2 k/m)\mathrm{d}k = \hbar\sqrt{2E/m}\mathrm{d}k$ と表せ,

$$g_E(E)\mathrm{d}E = 2g_k(k)\mathrm{d}k = \frac{1}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{m}{2E}}\mathrm{d}E \tag{10.82}$$

より, $g_E(E) = (1/\pi\hbar)\sqrt{m/2E} \overset{\mathrm{D}}{\sim} \mathrm{J}^{-1}/\mathrm{m}$ となる. 因子 2 は縮退を考慮したものである. エネルギーの尺度で見ると, 状態密度は E の増加に従って減少している.

10.9 階段ポテンシャル

ポテンシャルが空間的に急激に変化する場所では, 波の反射が生じる. 階段状のポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} U_1 & (x < 0) \\ U_2 & (x > 0) \end{cases} \tag{10.83}$$

を考える. 各領域における波動方程式は

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) = -(k^2 - K_i^2)\psi(x). \tag{10.84}$$

ただし, $k^2 = (2m/\hbar^2)E$, $K_i^2 = (2m/\hbar^2)U_i$ $(i = 1, 2)$ である. $U_1 < U_2$ であるとする.

$k > K_1, K_2$ の場合

$k_i = \sqrt{k^2 - K_i^2}$ とおくと, 各領域での解は

$$\begin{aligned} u_1(x) &= A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1 x} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1 x} \quad (x < 0) \\ u_2(x) &= C\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2 x} + D\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_2 x} \quad (x > 0). \end{aligned} \tag{10.85}$$

*5) 今は 1 次元問題なので系のサイズは L であるが, 2 次元の場合は L^2, 3 次元の場合には L^3 になる.

境界において, $u_1(0) = u_2(0)$, $u_1'(0) = u_2'(0)$ が成り立つ必要がある. $A+B = C+D$, $k_1(A-B) = k_2(C-D)$. $A=1$, $D=0$ とおくと,

$$u_+(x) = \begin{cases} \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x} + \dfrac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x} & (x<0) \\ \dfrac{2k_1}{k_1+k_2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2x} & (x>0) \end{cases} \tag{10.86}$$

$A=0$, $D=1$ とおくと,

$$u_-(x) = \begin{cases} \dfrac{2k_2}{k_1+k_2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x} & (x<0) \\ \dfrac{k_2-k_1}{k_1+k_2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2x} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_2x} & (x>0) \end{cases} \tag{10.87}$$

が得られる.

$u_+(x)$ は x の負の方向から入射して, 一部が $x=0$ で反射し, 残りが x の正の方向に透過する波を表す. $u_-(x)$ は逆の波である. これらはエネルギー的には縮退している.

$K_1 < k < K_2$ の場合

$k_1 = \sqrt{k^2-K_1^2}$, $\kappa_2 = \sqrt{K_2^2-k^2}$ とおくと, 各領域での解は

$$\begin{aligned} u_1(x) &= A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x} \quad (x<0) \\ u_2(x) &= C\mathrm{e}^{-\kappa_2x} + D\mathrm{e}^{\kappa_2x} \quad (x>0). \end{aligned} \tag{10.88}$$

まず, $D=0$ でなければならない. それは, x が大きくなると発散するからである.

境界条件から, $A+B=C$, $\mathrm{i}k_1(A-B) = -\kappa_2C$.

$A=1$ とおくと,

$$u_+(x) = \begin{cases} \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x} + \dfrac{\mathrm{i}k_1+\kappa_2}{\mathrm{i}k_1-\kappa_2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x} & (x<0) \\ \dfrac{2\mathrm{i}k_1}{\mathrm{i}k_1-\kappa_2}\mathrm{e}^{-\kappa_2x} & (x>0) \end{cases} \tag{10.89}$$

が得られる. $u_+(x)$ に相当するものだけが存在する.

K_2 が非常に大きい場合, すなわち段が非常に高い場合を考える: $\kappa_2 \sim K_2 \gg k$. 透過波の振幅は $\sim -2\mathrm{i}k_1/K_2$ で非常に小さい. また, 透過深さも $1/\kappa_2 \sim 1/K_2$ と小さくなる. したがって, $x>0$ では $u_2(x)=0$ とおいても差し支えない.

境界条件を確認しておくと, $A+B = C \sim 0$ であり, $A = -B$, すなわち, 境界条件を $u_1(0) = 0$ と書き換えてもよい. もう一方の条件は $\mathrm{i}k_1(A-B) = -\kappa_2C \sim K_2(2\mathrm{i}k_1/K_2)A = 2\mathrm{i}k_1A$ であり, $A=-B$ と一貫性がある. 10.7 節で用いた境界条件が正しいことが確認された.

$K_1, K_2 > k$ の場合

この場合には $\kappa_1 = \sqrt{K_1^2 - k^2}$, $\kappa_2 = \sqrt{K_2^2 - k^2}$ とおくと, 各領域での解は

$$\begin{aligned} u_1(x) &= A\mathrm{e}^{-\kappa_1 x} + B\mathrm{e}^{\kappa_1 x} \quad (x < 0) \\ u_2(x) &= C\mathrm{e}^{-\kappa_2 x} + D\mathrm{e}^{\kappa_2 x} \quad (x > 0). \end{aligned} \tag{10.90}$$

であるが, $A = D = 0$ でなければならない. それは, $|x|$ が大きくなると発散するからである. 境界条件は $B = C$, $\kappa_1 B = -\kappa_2 C$ であるが, これより, $B = C = 0$ でなければならないことが分かる. 結局, この場合には解は存在しない.

規格化

まだ, u_{k+}, u_{k-} の規格化を行っていないので, 確認しておく. また, 直交性も確認する. $\delta(k - k')$ の係数を定めるだけなので, $k \sim k'$ であるとする. k_1, k_2 は k の関数であるとみなし, さらに, $r(k) = (k_1 - k_2)/(k_1 + k_2)$, $t(k) = 2k_1/(k_1 + k_2)$ も k の関数とする. $u_{k'+}$ と u_{k+} の内積は

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} u_{k'+}^*(x) u_{k+}(x) \mathrm{d}x \\ &= \int_{-\infty}^{0} (\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1' x} + r(k')\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1' x})(\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1 x} + r(k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1 x})\mathrm{d}x + \int_0^{\infty} t(k')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_2' x} t(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2 x}\mathrm{d}x \\ &= 2\pi \left[\delta_+(k_1 - k_1') + r^2(k)\delta_+(k_1' - k_1) + t^2(k)\delta_-(k_2 - k_2')\right] \\ &= 2\pi \left[\frac{k_1}{k}\delta_+(k - k') + \frac{k_1}{k} r^2(k)\delta_-(k - k') + \frac{k_2}{k} t^2(k)\delta_-(k - k')\right] \\ &= 2\pi \frac{k_1}{k}\delta(k - k') \end{aligned} \tag{10.91}$$

$k_1 r^2(k) + k_2 t^2(k) = k_1$ を用いた.

これより, 正規化された波動関数は

$$\phi_{k+}(x) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\sqrt{\frac{k}{k_1}} u_{k+}(x), \quad \phi_{k-}(x) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\sqrt{\frac{k}{k_2}} u_{k-}(x) \tag{10.92}$$

であることが分かる. さらに, E をパラメータにとると,

$$\phi_{E+}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar v_1}} u_{k+}(x), \quad \phi_{E-}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar v_2}} u_{k-}(x) \tag{10.93}$$

が得られる[*6)].

問題 10.5 $u_{k+}(x)$ と $u_{k-}(x)$ の直交性を示せ.

*6) 次元を確認しておこう. $\langle x|k\rangle \overset{\mathrm{D}}{\sim} \frac{1}{\sqrt{\mathrm{m}}}\sqrt{\mathrm{m}} = 1$, $\langle x|E\rangle \overset{\mathrm{D}}{\sim} \frac{1}{\sqrt{\mathrm{m}}}\frac{1}{\sqrt{\mathrm{J}}} = \frac{1}{\sqrt{(\mathrm{J\,s})(\mathrm{m/s})}}$

10.10 空間的にゆっくり変化するポテンシャル

ポテンシャル $V(x)$ が十分ゆっくり変化する状況を考える.

$$V(x) = \begin{cases} U_1 & (-\infty < x \le x_1) \\ U(x) & (x_1 < x < x_2) \\ U_2 & (x_2 \le x < \infty) \end{cases} \tag{10.94}$$

x の負の方向からエネルギー E で入射する波の伝搬を考える. $k(x) = \sqrt{2m(E-V(x))}/\hbar$, $k_1 = \sqrt{2m(E-V_1)}/\hbar$, $k_2 = \sqrt{2m(E-V_2)}/\hbar$ とおく. 波長のスケールでポテンシャルが目にみえて変化しなければ*7), 波の反射は無視できて, 波は一方向に進んでゆく. 微分方程式は

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\phi(x) = -k^2(x)\phi(x) \tag{10.95}$$

の解として, 一様ポテンシャルの場合を参考にして

$$\phi(x) = \phi_0(x)\exp \mathrm{i}\int_{x_1}^{x} k(x')\mathrm{d}x' \tag{10.96}$$

を仮定する. 入射波として, $\phi(x) = \phi_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1(x-x_1)}$, $\phi_1 = \phi(x_1)$ を考えていることになる. 微分方程式に代入すると,

$$\phi_0'' + 2\mathrm{i}k(x)\phi_0' + (-k^2 + \mathrm{i}k')\phi_0 = -k^2\phi_0 \tag{10.97}$$

となるが, 左辺第 1 項を第 2 項に比べて小さいとして, $\phi_0'' \sim 0$ とおく.

$$2\phi_0' k = -\phi_0 k' \tag{10.98}$$

これを解くと, $2\ln\phi_0 = -\ln k + \ln C$ を経て, $\phi_0^2 = C/k$ が得られる. C は任意定数である. $\phi_0(k_1) = \phi_1$ とおくと, 解は

$$\phi_0(x) = \phi_1\sqrt{\frac{k_1}{k}}\exp \mathrm{i}\int_{x_1}^{x} k(x')\mathrm{d}x' \tag{10.99}$$

で与えられる. さらに, $x > x_2$ では,

$$\phi_0(x) = \phi_1\sqrt{\frac{k_1}{k_2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_2 x + \varphi)} \tag{10.100}$$

と表すことができる. $\varphi - k_2 x_2$ は $x = x_2$ における位相である.

因子 $\sqrt{k_1/k_2} = \sqrt{v_1/v_2}$ はポテンシャルの変化によって確率の流れの速さが変化することに伴って, 流束が保存するように, 確率密度が調節されていることを意味している*8).

---

*7) 条件を式でかけば, $|U^{-1}\mathrm{d}U/\mathrm{d}x|(2\pi/k) \ll 1$.

*8) 高速道路において, 車の密度 (平均車間距離の逆数) と速度の積が一定であることと同じである.