

第9章 1次元散乱理論

9.1 漸近的な振舞い

(この節は主な内容の抜粋である). 時間依存するシュレディンガー方程式解の最初の段階として, 定常状態のシュレディンガー方程式を調べよう:

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(E, x) \quad (9.5)$$

エネルギー E の分布を記述する適切な関数 $g(E)$ に対して, 波束は次式で定義される:

$$\psi(x, t) = \int \psi(E, x) e^{-iEt} g(E) dE \quad (9.6)$$

今後のために次の関数を定義する:

$$k(E) = \begin{cases} \sqrt{2E}, & \text{for } E \geq 0, \\ i\sqrt{-2E}, & \text{for } E < 0. \end{cases} \quad (9.7)$$

$E \geq 0$ の場合, これはちょうどエネルギー E の自由粒子の運動量になっている.

さらに $E \neq 0$ の場合, 次の関数を定義する:

$$\underline{\omega}(E, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi k(E)}} \exp(ik(E)x), \quad (9.8)$$

$$\overline{\omega}(E, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi k(E)}} \exp(-ik(E)x), \quad (9.9)$$

これらは定常的なシュレディンガー方程式の解である.

定数ポテンシャル $V(x) = V_0$ の場合, 定常的なシュレディンガー方程式の一般解は, V_0 だけシフトしたエネルギーを持つ平面波の線型結合である:

$$\psi(E, x) = a \underline{\omega}(E - V_0, x) + b \overline{\omega}(E - V_0, x) \quad (9.10)$$

9.2 例: 階段ポテンシャル

9.2.1 連続条件

ここでは, 上記の考察を簡単な厳密に解ける例— 階段ポテンシャル —で説明する.

$$V(x) = \begin{cases} V_-, & x < 0, \\ V_+, & x \geq 0, \end{cases} \quad \text{ただし } V_- < V_+. \quad (9.15)$$

任意のエネルギー E に対する定常シュレディンガー方程式の解は, 次の前提条件から得られる:

$$\psi(E, x) = \begin{cases} a \underline{\omega}(E - V_-, x) + b \overline{\omega}(E - V_-, x), & x < 0, \\ c \underline{\omega}(E - V_+, x) + d \overline{\omega}(E - V_+, x), & x \geq 0. \end{cases} \quad (9.16)$$

任意の係数 a, b, c, d に対して, この関数の各部分はそれぞれ定数ポテンシャル V_+ , V_- における定常シュレーディンガー方程式の解となっている. すべての x について解を得るためには, $x = 0$ でそれぞれの部分をうまくつなぎ合わせられるよう係数を選ばなければならない. シュレーディンガー方程式は2階微分方程式であるため, 解 ψ は(広義の意味で)2回微分可能でなければならない. したがって, $x > 0$ と $x < 0$ の部分は $x = 0$ において微分可能な形でつながれる必要がある. そこで, ψ と ψ' が $x = 0$ で連続であることを要求する. この条件から, 係数 a, b, c, d に関する連立線形方程式が得られる. 略記

$$k_{\pm} = k(E - V_{\pm}) \quad (9.17)$$

を用いると, 連立方程式は

$$\sqrt{k_+}(a + b) = \sqrt{k_-}(c + d) \quad (\psi \text{ の連続性}) \quad (9.18)$$

$$\sqrt{k_-}(a - b) = \sqrt{k_+}(c - d) \quad (\psi' \text{ の連続性}) \quad (9.19)$$

となり, 入射波の係数 a , d から出射波の係数 b , c を求めることができる.

9.2.2 階段の高さより大きいエネルギー

エネルギー $E > V_+$ の場合, 解 $\psi(E, x)$ は階段の両側で平面波の線形結合となる. まず粒子が左側から障壁に近づく状況を考える. したがって解 $\psi(E, x)$ は $x > 0$ の領域に入射成分を持たないはずである. $a = 1$, $d = 0$ と選び, 解を次の形に書く:

$$\psi(E, x) = \begin{cases} \underline{\omega}(E - V_-, x) + \underline{R}(E) \underline{\omega}(E - V_-, x), & x < 0, \\ \underline{T}(E) \underline{\omega}(E - V_+, x), & x \geq 0. \end{cases} \quad (9.20)$$

連立方程式 (9.18), (9.19) を解くと, 係数 $b = \underline{R}(E)$, $c = \underline{T}(E)$ が得られ,

$$\underline{R}(E) = \frac{k_- - k_+}{k_- + k_+}, \quad \underline{T}(E) = \frac{2\sqrt{k_+k_-}}{k_- + k_+}. \quad (9.21)$$

$\underline{R}(E)$ は, 左からの散乱でエネルギー E のときの**反射係数**, $\underline{T}(E)$ は**透過係数**と呼ばれる. $|\underline{R}(E)|^2$ はエネルギー E における「反射確率」, $|\underline{T}(E)|^2$ は「透過確率」と解釈される. 次の関係が成り立つ:

$$|\underline{R}(E)|^2 + |\underline{T}(E)|^2 = 1, \quad E \geq V_+ > 0. \quad (9.22)$$

9.2.3 全反射 (Total Reflection)

前提条件 (9.20) は $V_- < E \leq V_+$ のエネルギーにも適用できる. $x \geq 0$ の解は指数的に減衰する成分のみとなる. このとき $k_+ = k(E - V_+) = i\sqrt{2(V_+ - E)}$ は純虚数となるため $\underline{R}(E)$ は絶対値1の複素数となり,

$$|\underline{R}(E)|^2 = \frac{k_-^2 + |k_+|^2}{k_-^2 + |k_+|^2} = 1. \quad (9.23)$$

すなわち粒子は確率1で反射される (**全反射**).

全エネルギーが $x \geq 0$ 領域のポテンシャルエネルギーより小さいにもかかわらず, その領域で粒子を見出す確率はゼロではないことに注意する. この確率は階段からの距離とともに指数的に減衰する. その領域に伝播する粒子は存在しない.

V_+ を無限大にすると $k_+ \rightarrow \infty$ となるため $\overrightarrow{T}(E) \overrightarrow{\omega}(E - V_+, x) \rightarrow 0$, すなわち $x > 0$ 領域の解はゼロになる. この極限で

$$\overleftarrow{R}(E) \rightarrow -1, \quad \text{for } V_+ \rightarrow \infty, \quad (9.24)$$

となり, 解は

$$\psi(E, x) = \begin{cases} \overrightarrow{\omega}(E - V_-, x) - \overleftarrow{\omega}(E - V_-, x), & x < 0, \\ 0, & x \geq 0. \end{cases} \quad (9.25)$$

これは $x = 0$ にディリクレ境界条件を課したシュレーディンガー方程式の解であり, 無限大の階段はディリクレ壁になる. $E < 0$ の場合, $x \geq 0$ で指数的に減衰する解が $x < 0$ で指数的に増大する部分を持つため, 有界な解は存在しない.

9.2.4 右からの散乱

$E > V_+$ では, 別の型の解も存在する:

$$\psi(E, x) = \begin{cases} \overleftarrow{T}(E) \overleftarrow{\omega}(E - V_-, x), & x < 0, \\ \overleftarrow{\omega}(E - V_+, x) + \overrightarrow{R}(E) \overrightarrow{\omega}(E - V_+, x), & x \geq 0. \end{cases} \quad (9.26)$$

$x \geq 0$ の領域では, 運動量 $-k_+$ の平面波 (入射波) と運動量 $+k_+$ の出射平面波 (反射波) が存在する. $x < 0$ の領域には運動量 $-k_-$ の透過平面波のみが存在する. 階段は下り方向であるにもかかわらず, やはり反射が生じる.

$x = 0$ での ψ, ψ' の連続性から ($E > V_+$ の場合),

$$\overrightarrow{R}(E) = \frac{k_+ - k_-}{k_+ + k_-} = -\overleftarrow{R}(E), \quad (9.27)$$

$$\overleftarrow{T}(E) = \frac{2\sqrt{k_+ k_-}}{k_+ + k_-} = \overrightarrow{T}(E). \quad (9.28)$$

9.3 波束と固有関数展開

$E > V_-$ のとき, 解 $\psi(E, x)$ はエネルギーが鋭いが, 二乗可積分ではない. 固有の量子力学的解釈を持つ解を得るためには波束を構成する必要がある. これは自由粒子の場合と同様, 鋭いエネルギーを持つ解の連続的な重ね合わせによって行われる.

9.3.1 定数ポテンシャル中の波束のエネルギー表示

定数ポテンシャル中の波束については, § 3.8 の議論をわずかな修正で適用できる. 式 (3.88) で位置空間の波動関数 $\psi_+(x, t)$ は「右に進む波束」, 波動関数 $\psi_-(x, t)$ は「左に進む波束」であったが, それらの初期時刻 $t = 0$ の場合を考えると,

$$\begin{aligned} \psi(x, 0) &= \psi_+(x, 0) + \psi_-(x, 0) \\ &= \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{2\pi k(E)}} e^{ik(E)x} g_+(E) dE + \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{2\pi k(E)}} e^{-ik(E)x} g_-(E) dE \\ &= \int_0^\infty \left\{ \overrightarrow{\omega}(E, x) g_+(E) + \overleftarrow{\omega}(E, x) g_-(E) \right\} dE \end{aligned}$$

この類推から、波束 $\psi(x)$ は平面波の積分として書けると言える：

$$\psi(x) = \int_{V_-}^{\infty} \left(\omega_{\rightarrow}(E - V_-, x) \underline{g}_{\rightarrow}(E) + \omega_{\leftarrow}(E - V_-, x) \underline{g}_{\leftarrow}(E) \right) dE. \quad (9.29)$$

ここで $\underline{g}_{\rightarrow}$, $\underline{g}_{\leftarrow}$ はエネルギー空間で二乗可積分な適当な関数である。 $\omega_{\rightarrow}$ の項は右向きに進む波束の部分を、 $\omega_{\leftarrow}$ の項は左向きに進む部分を表す。定数ポテンシャル V_- では $E \geq V_-$ のエネルギーのみが許されるため、二乗可積分条件は

$$\|\psi\|^2 = \int_{V_-}^{\infty} \left(|\underline{g}_{\rightarrow}(E)|^2 + |\underline{g}_{\leftarrow}(E)|^2 \right) dE. \quad (9.30)$$

波束のエネルギー表示は、エネルギー空間における2成分波動関数として表される：

$$g(E) = \begin{pmatrix} \underline{g}_{\rightarrow}(E) \\ \underline{g}_{\leftarrow}(E) \end{pmatrix}, \quad E > V_-. \quad (9.31)$$

$t = 0$ において右向きに進む波束の部分は

$$\psi_{\rightarrow}(x) = \int_{V_-}^{\infty} \omega_{\rightarrow}(E - V_-, x) \underline{g}_{\rightarrow}(E) dE = \int_0^{\infty} \omega_{\rightarrow}(E, x) \underline{g}_{\rightarrow}(E + V_-) dE. \quad (9.32)$$

変数変換 $E = p^2/2m = k^2/2$ ($\hbar = m = 1$) を行い、また右向き波束の運動量は正なので $k > 0$ を仮定する。 $\omega_{\rightarrow}$ の定義式 (9.8) を代入すると¹,

$$\psi_{\rightarrow}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} e^{ikx} \sqrt{k} \underline{g}_{\rightarrow} \left(\frac{k^2}{2} + V_- \right) dk. \quad (9.33)$$

$k < 0$ で被積分関数をゼロと定めることで $-\infty$ から $+\infty$ への積分に拡張できる。したがって波束 $\psi_{\rightarrow}(x)$ のフーリエ変換は

$$\hat{\psi}_{\rightarrow}(k) = \begin{cases} \sqrt{k} \underline{g}_{\rightarrow} \left(\frac{k^2}{2} + V_- \right), & k \geq 0, \\ 0, & k < 0. \end{cases} \quad (9.34)$$

左向きに進む部分についても同様に、

$$\psi_{\leftarrow}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^0 e^{ikx} \sqrt{-k} \underline{g}_{\leftarrow} \left(\frac{k^2}{2} + V_- \right) dk, \quad (9.35)$$

したがってフーリエ変換は

$$\hat{\psi}_{\leftarrow}(k) = \begin{cases} 0, & k \geq 0, \\ \sqrt{-k} \underline{g}_{\leftarrow} \left(\frac{k^2}{2} + V_- \right), & k < 0. \end{cases} \quad (9.36)$$

¹[訳註] 原書では式 (9.33) 以降の被積分関数中の因子 $\sqrt{k}$ が $1/\sqrt{k}$ となっているが、これは明らかにプリントミスと思われるので修正した。なぜなら $E = k^2/2$ の両辺を微分すると $dE = k dk$ となるからである。

9.3.2 ポテンシャル階段中の波束

次に、ポテンシャル階段中の解 $\psi(E, x)$ から波束を構成する． $E > V_-$ の領域に土台 (support) を持つエネルギー分布 $g(E)$ をとり、

$$\psi(x) = \int_{V_-}^{\infty} \psi(E, x) g(E) dE \quad (9.37)$$

と定義する．式 (9.20) の $\psi(E, x)$ に対して、この波束はいくつかの部分から構成される：

$$\psi_{\rightarrow}^{\text{in}}(x) = \int_{V_-}^{\infty} \omega_{\rightarrow}(E - V_-, x) g(E) dE, \quad x < 0, \quad (9.38)$$

$$\psi_{\leftarrow}^{\text{r}}(x) = \int_{V_-}^{\infty} \omega_{\leftarrow}(E - V_-, x) \underline{R}(E) g(E) dE, \quad x < 0, \quad (9.39)$$

$$\psi_{\rightarrow}^{\text{t}}(x) = \int_{V_-}^{\infty} \omega_{\rightarrow}(E - V_+, x) \underline{T}(E) g(E) dE, \quad x \geq 0. \quad (9.40)$$

これらを用いると、波束全体は

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_{\rightarrow}^{\text{in}}(x) + \psi_{\leftarrow}^{\text{r}}(x), & x < 0, \\ \psi_{\rightarrow}^{\text{t}}(x), & x \geq 0. \end{cases} \quad (9.41)$$

時間依存シュレーディンガー方程式のポテンシャル階段中の解は

$$\psi(x, t) = \int_{V_-}^{\infty} \psi(E, x) e^{-iEt} g(E) dE \quad (9.42)$$

で与えられる．矢印が示すように、 $\psi_{\rightarrow}^{\text{in}}$ と $\psi_{\rightarrow}^{\text{t}}$ は右向きに、 $\psi_{\leftarrow}^{\text{r}}$ は左向きに進む．これにより、ポテンシャル階段に向かって進み、反射部分と透過部分に分裂する波束を記述することができる．

9.4 ポテンシャル段差：漸近運動量分布

ポテンシャル段差における波束 (9.42) の時間発展について、簡単のため $V_- = 0$ と仮定して論じよう．図 9.1 はエネルギーが V_+ より大きい波束の典型的な振る舞いを示している．この図はポテンシャル段差での散乱の前・最中・後に於ける位置分布と運動量分布を示す．入射波束は段差に向かって進み、平均位置のまわりになかなか広い分布を持つ．したがって、運動量（ひいてはエネルギー）の分布は比較的鋭く、入射波束に寄与する全エネルギーは V_+ を十分上回っている（図にはポテンシャル段差の大きさに対するエネルギー $E = k_0^2/2$ が示されている）．波束が段差に達するまでは運動量分布は定常であるが、波束がポテンシャルの跳びを感じ始めると変化し始める． k_0 におけるピークは、ポテンシャルの跳びを越えるために必要なエネルギーを補う分だけ、より低い平均運動量へとシフトする． $-k_0$ に反射部分に対応する小さなピークが現れる．位置確率密度にはいくつかのリップル（細かな振動）が現れるが、これは入射波束と反射波束の干渉によるものである．散乱後、波束は大きな透過部分と小さな反射部分に分かれ、両者は段差から遠ざかる方向に進む．一定ポテンシャル中の伝播は自由運動と物理的に区別がつかないため、以後、運動量分布は定常となる．以下では、この散乱過程をやや定量的に記述する．最初の仕事は入射波束を準備することである．簡単のためガウス関数を用いる． $t = 0$ において、段差の領域で無視できるほど小さくなるよう、十分に左に位置するとする．「入射」とは、ガウス波束の平均運動量が右向き、すなわち段差に向いていることを意味する．したがって入射波束は次のような形となる：

$$\psi_{\rightarrow}^{\text{in}}(x) = \left(\frac{a}{\pi}\right)^{1/4} e^{ik_0 x} \exp\left(-\frac{a(x-x_0)^2}{2}\right) \quad (9.43)$$

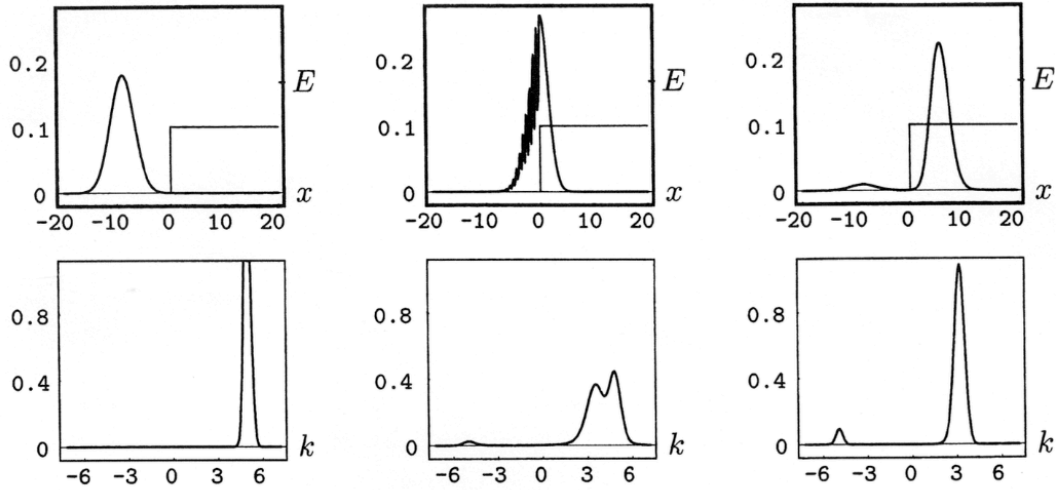


図 9.1: 位置確率密度 $|\psi(x)|^2$ (最初の行) と, 階段ポテンシャルで散乱される時の運動量の確率密度 $|\psi(k)|^2$ (2 段目の行). 段差に当たる前・相互作用中・散乱後の波束の様子が見られる. エネルギーは段差の大きさより厳密に大きい, 反射部分が存在するのは純粋に量子力学的な現象である.

ここで $x_0 \ll -1/\sqrt{a} < 0$ (a は位置分布の幅を表す). この波束の運動量表示は

$$\hat{\psi}_{\rightarrow}^{\text{in}}(k) = \left(\frac{1}{a\pi}\right)^{1/4} e^{-ikx_0} \exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{2a}\right). \quad (9.44)$$

これは運動量空間で k_0 を中心としたガウス関数である. ガウス関数の急激な減衰により, 負の k でこの関数がゼロであると仮定しても大きな誤差が生じないことから, $k_0 \gg \sqrt{a}$ と選ぶのが賢明である (すなわち波束は左向きの成分を持たない). 入射波束のエネルギー表示 (第 3.8 節参照) は¹,

$$g^{\text{in}}(E) = \begin{pmatrix} g(E) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad g(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi k(E)}} \hat{\psi}_{\rightarrow}^{\text{in}}(k(E)), \quad k(E) = \sqrt{2E}. \quad (9.45)$$

これにより, 反射・透過波束のエネルギー空間表示が直ちに得られる:

$$g^{\text{r}}(E) = \begin{pmatrix} 0 \\ \underline{R}(E) g(E) \end{pmatrix}, \quad g^{\text{t}}(E) = \begin{pmatrix} \underline{T}_{\rightarrow}(E) g(E) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (9.46)$$

これらの波束は位置空間でどのような形をしているであろうか? もし反射係数 R が E によらない定数であれば, 反射波束 (9.39) は入射波束 (9.38) において $\underline{\omega}$ を $\underline{\omega}$ に置き換えたものとなる. これは原点での反射, すなわち $x \rightarrow -x$ の置換に相当し, $\underline{\omega}$ を $\underline{\omega}$ に変える. そのため波束 $\underline{\psi}^{\text{r}}$ は平均位置 $-x_0$ (すなわち右方向に遠く離れた場所) を中心とし, 平均運動量 $-k_0$ で左向きに進むガウス波束となる. ガウス波束のノルムは R^2 (1 未満) だけ減少する. 実際には R は E に依存するため, 反射波束は歪む (図 9.1 の場合, 反射係数は対象となるエネルギー範囲でほとんど変化しないため, 反射波束は依然としてほぼガウス的に見える).

同様に, 関数 $\underline{\psi}^{\text{t}}$ はわずかに歪んだガウスの波束である. その全エネルギーは入射ガウス波束のエネルギーとほぼ同じであるが, 透過波束はポテンシャル V_+ の中を進むため, 運動量分布は k_0

¹[訳註] 原文では $\frac{1}{\sqrt{k(E)}} \hat{\psi}_{\rightarrow}^{\text{in}}(k(E))$ となっているが, §3.8 に合わせて $\frac{1}{\sqrt{k(E)}} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi k(E)}}$ に修正しておく.

から

$$k'_0 = \sqrt{k_0^2 - 2V_+} \quad (9.47)$$

へとシフトする.

(9.42) の波束 $\psi(x, t)$ は、初期状態 ($t = 0$) では入射部分のみからなる. 反射部分は $x < 0$ の領域に、透過部分は $x > 0$ の領域に位置するからである² :

$$\psi(x, t=0) \approx \begin{cases} \psi^{\text{in}}(x), & x < 0, \\ 0, & x \geq 0. \end{cases} \quad (9.48)$$

入射部分と反射部分は互いに逆方向に進むため、散乱過程でその位置を交換する. 入射波と反射波が重なり合う間、 $x < 0$ の領域に干渉縞が現れる ($x > 0$ の領域には干渉縞は現れない). また、透過部分 $\psi^{\text{in}}(x, t)$ はいずれ $x > 0$ の領域に入り込む. 十分時間が経ち、波束の各部分が段差付近を離れた後には次のような状況となる :

$$\psi(x, t) \approx \begin{cases} \psi^{\text{r}}(x), & x < 0, \\ \psi^{\text{t}}(x), & x \geq 0, \end{cases} \approx \psi^{\text{r}}(x) + \psi^{\text{t}}(x). \quad (9.49)$$

この波束は出射波束である. 全ての部分がポテンシャル段差から遠ざかる方向に進んでいる. エネルギー表示では、出射波束は単純に

$$g^{\text{out}}(E) = \left(\frac{T(E) g(E)}{R(E) g(E)} \right) \quad (9.50)$$

で与えられる. エネルギー表示での時間発展は $\exp(-iEt)$ の乗算に過ぎず、エネルギー分布は定常となる.

エネルギー分布が定常になると同時に、波束 $\psi(x, t)$ が相互作用領域から十分遠ざかって全ての部分が自由に進むようになると、運動量分布も定常となる. 出射波束の運動量分布は、第 9.3.1 節で示したようにエネルギー表示から容易に計算できる. 透過部分は一定ポテンシャル V_+ 中を、反射部分は自由に進むため次式を得る :

$$|\hat{\psi}^{\text{out}}(k)|^2 = |k| \begin{cases} \left| \frac{T}{R} \left(\frac{k^2}{2} + V_+ \right) g \left(\frac{k^2}{2} + V_+ \right) \right|^2, & k \geq 0, \\ \left| \frac{R}{T} \left(\frac{k^2}{2} \right) g \left(\frac{k^2}{2} \right) \right|^2, & k < 0. \end{cases} \quad (9.51)$$

この分布は $-k_0$ に反射波束に由来するピーク、および k'_0 に透過波束に由来するピークを示す. この漸近運動量分布から、第 3.6 節と同様にして、散乱波束の漸近位置確率密度を導くことができる.

²[訳註] 原文では次となっている : The wave packet $\psi(x, t)$ in (9.42) initially consists only of the incoming part because the reflected part is located in the region $x > 0$, and the transmitted part in the region $x < 0$. しかしながら、式 (9.41) から、

$$\psi(x, t=0) = \psi(x) = \begin{cases} \psi^{\text{in}}(x) + \psi^{\text{r}}(x), & x < 0, \\ \psi^{\text{t}}(x), & x \geq 0. \end{cases}$$

となるが、初期状態では当然ながら反射波と透過波は存在しない. よって、記号 $>$ と $<$ が逆と思われるので修正した.