第9章　1次元散乱理論

§ 9.1 から § 9.4 までは別の文章にまとめてある．

9.5　散乱行列

散乱理論では, 入射波と出射波との間の関係を決定したい．V_+ よりも大きなエネルギーを持った一般的な波束は次式で記述される：

$$\psi^{\mathrm{in}}(x) = \int_{V_+}^{\infty} \left(\underrightarrow{\omega}(E - V_-, x) g_1(E) + \underleftarrow{\omega}(E - V_+, x) g_2(E) \right) dE \tag{9.52}$$

これは, 一定ポテンシャル V_- 中を右向きに動く波束を描写する部分と, ポテンシャル V_+ 中を左向きに動く部分とから成っている．ψ^{in} の時間発展は, 初期に (はるか昔に) 左端及び右端に位置した 2 つの入射波束を描写する．ポテンシャルとの相互作用は, 入射波束を次の形の出射波束に変換する：

$$\psi^{\mathrm{out}}(x) = \int_{V_+}^{\infty} \left(\underleftarrow{\omega}(E - V_-, x) h_1(E) + \underrightarrow{\omega}(E - V_+, x) h_2(E) \right) dE \tag{9.53}$$

出射部分の係数と入射部分の係数との関係は, 次の「**散乱行列**」(*scattering matrix*)：

$$S(E) = \begin{pmatrix} \underleftarrow{T}(E) & \underrightarrow{R}(E) \\ \underleftarrow{R}(E) & \underrightarrow{T}(E) \end{pmatrix} \tag{9.54}$$

で与えら, 次の関係式が成り立つ：

$$\begin{pmatrix} h_1(E) \\ h_2(E) \end{pmatrix} = S(E) \begin{pmatrix} g_1(E) \\ g_2(E) \end{pmatrix} \tag{9.55}$$

出射波束は, 入射波束に対して線形に依存する：

$$\psi^{\mathrm{out}} = S \psi^{\mathrm{in}} \tag{9.56}$$

線形演算子 S は「**散乱演算子**」(*scattering operator*) と呼ばれる．散乱行列 $S(E)$ はユニタリーであって,$\mathbf{1}_2$ を 2×2 単位行列として, $S(E)S(E)^\dagger = \mathbf{1}_2$ が成り立つ．特にそれは, 次式の成立を意味する：

$$|h_1(E)|^2 + |h_2(E)|^2 = |g_1(E)|^2 + |g_2(E)|^2$$

すなわち,

$$\begin{aligned} \|\psi^{\mathrm{out}}\|^2 &= \int_{V_+}^{\infty} \left(|h_1(E)|^2 + |h_2(E)|^2 \right) dE \\ &= \int_{V_+}^{\infty} \left(|g_1(E)|^2 + |g_2(E)|^2 \right) dE = \|\psi^{\mathrm{in}}\|^2 \end{aligned}$$

従って, 散乱演算子 S はユニタリーである．

9.6　遷移行列 (Transition Matrix)

9.6.1　階段ポテンシャル

ポテンシャルが $x = s$ で段差 (step) を持つならば, やはり次の前提条件を用いることが出来る：

$$\psi(E,x) = \begin{cases} a\,\underset{\rightarrow}{\omega}(E-V_-,x) + b\,\underset{\leftarrow}{\omega}(E-V_-,x), & x < s \\ c\,\underset{\rightarrow}{\omega}(E-V_+,x) + d\,\underset{\leftarrow}{\omega}(E-V_+,x), & x \geq s \end{cases} \tag{9.57}$$

$x = s$ に於ける ψ 及び ψ' の連続性から, 次の線形方程式系が導かれる：

$$\sqrt{k_+}(a\,e^{ik_-s} + b\,e^{-ik_-s}) = \sqrt{k_-}(c\,e^{ik_+s} + d\,e^{-ik_+s}), \tag{9.58}$$

$$\sqrt{k_-}(a\,e^{ik_-s} - b\,e^{-ik_-s}) = \sqrt{k_+}(c\,e^{ik_+s} - d\,e^{-ik_+s}), \tag{9.59}$$

これを c と d について解くことが出来て,

$$\begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = T\begin{pmatrix} V_-, & V_+, & s \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \tag{9.60}$$

ただし,

$$T(V_-,V_+,s) = \frac{1}{2\sqrt{k_+k_-}}\begin{pmatrix} (k_- + k_+)e^{i(k_- - k_+)s} & -(k_- - k_+)e^{-i(k_- + k_+)s} \\ -(k_- - k_+)e^{i(k_- + k_+)s} & (k_- + k_+)e^{-i(k_- - k_+)s} \end{pmatrix} \tag{9.61}$$

は $x = s$ に於いて V_- から V_+ へのポテンシャル段差での散乱に対する遷移行列である．いつものように $k_\pm$ は, ポテンシャル $V_\pm$ に関するエネルギー E での運動量であり, すなわち $E > V_\pm$ の場合には,

$$k_\pm = k(E - V_\pm) = \sqrt{2(E - V_\pm)} \tag{9.62}$$

遷移行列は, 段差の右側解の係数 c 及び d を, 左側解の係数 a 及び b に結び付ける．それは, 段差が幾つか有る場合でこの関係を計算したい時に特に有用である.

9.6.2　２つのポテンシャル段差

一例として, 次の形をしたポテンシャル V を考えよう：

$$V(x) = \begin{cases} V_-, & \text{for } x < -r, \\ V_0, & \text{for } -r \leq x < R, \\ V_+, & \text{for } R \leq x. \end{cases} \tag{9.63}$$

漸近領域 $x < -r$ と $x \geq R$ に於ける解同士の関連性は容易に見出せる．中間領域 $-r \leq x < R$ に於けるエネルギー E のシュレディンガー方程式の定常解は, 次式のような $\underset{\leftarrow}{\omega}$ と $\underset{\rightarrow}{\omega}$ の線型結合で与えられる：

$$\psi(E,x) = c_1\,\underset{\rightarrow}{\omega}(E-V_0,x) + c_2\,\underset{\leftarrow}{\omega}(E-V_0,x), \qquad \text{in } -r \leq x < R.$$

係数 c_1 と c_2 は左側の漸近解の係数 a と b から, それに対応する遷移行列の助けを借りて決定することが出来る：

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = T(V_-,V_0,-r)\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \tag{9.64}$$

同様に, 領域 $x \geq R$ の解は c_1, c_2 で次のように決定される：

$$\begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = T(V_0, V_+, R) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \tag{9.65}$$

従って, 次の結果となる：

$$\begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = T(V_0, V_+, R)T(V_-, V_0, -r) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \tag{9.66}$$

左からの散乱の場合には, 前のように仮定 $a = 1, d = 0$ を用い $b = \underset{\leftarrow}{R}(E)$, $c = \underset{\rightarrow}{T}(E)$ と書く．すると線形方程式

$$\begin{pmatrix} \underset{\rightarrow}{T}(E) \\ 0 \end{pmatrix} = T(V_0, V_+, R)T(V_-, V_0, -r) \begin{pmatrix} 1 \\ \underset{\leftarrow}{R}(E) \end{pmatrix} \tag{9.67}$$

は, 反射係数 $\underset{\leftarrow}{R}(E)$ と透過係数 $\underset{\rightarrow}{T}(E)$ について解くことが出来る：

$$\underset{\leftarrow}{R}(E) = \frac{k_0(k_- - k_+)\cos k_0 L + i(k_0^2 - k_- k_+)\sin k_0 L}{k_0(k_- + k_+)\cos k_0 L - i(k_0^2 + k_- k_+)\sin k_0 L} \exp(-2ik_r), \tag{9.68}$$

$$\underset{\rightarrow}{T}(E) = \frac{2k_0\sqrt{k_- k_+}\exp(-i(k_r + k_+ R))}{k_0(k_- + k_+)\cos k_0 L - i(k_0^2 + k_- k_+)\sin k_0 L}, \tag{9.69}$$

ただし, 明らかな略語 $k_\pm = k(E - V_\pm)$,$k_0 = K(E - V_0)$,$L = r + R(= 2\text{ つの段差の距離})$ を用いている．

9.6.3 ポテンシャル障壁

前節の結果を，ポテンシャル障壁における散乱に応用しよう．ポテンシャル障壁とは，$V_\pm = 0$, $V_0 > 0$ である二段ステップポテンシャルであり，

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & |x| < R, \\ 0, & |x| \geq R, \end{cases} \qquad V_0 > 0 \tag{9.70}$$

で与えられる．

ここでは，エネルギーが障壁の高さ V_0 より大きい場合の散乱過程を考える．左からの散乱に対する散乱係数 $\underset{\leftarrow}{R}$ および $\underset{\rightarrow}{T}$ は，式 (9.68) および (9.69) から求めることができる．これらはエネルギー E のみならず，障壁の高さ V_0 および幅 R にも依存する.【カラープレート 23】にその例を示す．これは $E = 18$，$R = 1$ を固定したときの，パラメータ V_0 の関数としての散乱係数を示したものである．

【カラープレート 23】を見ると，たとえば $V_0 \approx 16.8$ のような特定の V_0 の値において反射係数がゼロになることがわかる．反射係数がゼロになるということは，反射波がまったく存在しないことを意味する．これはどういうことだろうか？単一ステップポテンシャルではこのようなことは起こらない．しかし二段ステップポテンシャルの場合，反射波を二つの部分の重ね合わせとして解釈できる．各部分は，それぞれのステップで反射されることによって生じる．この二つの反射成分は同じエネルギー (波長) を持ち，$x < -R$ の領域で互いに干渉する．反射係数がゼロになるということは，明らかにこの二成分が打ち消し合う (破壊的干渉) ことを意味する．これが起こりうるのは，両者の振幅が等しく，かつ位相差が π である (一方が他方の負である) 場合に限られる．

【カラープレート 23】の例では，たとえば $V_0 \approx 15$ において反射確率が局所的な極大を持つ．この場合，二つの反射波はほぼ同位相であり，建設的干渉が起こる.【カラープレート 24】は,

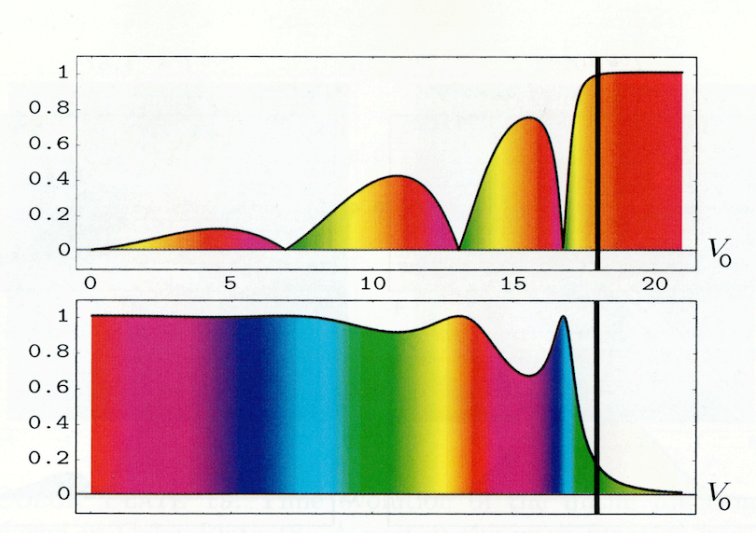


図 9.1: 【COLOR PLATE 23】ポテンシャル障壁に於ける散乱の反射係数および透過係数.

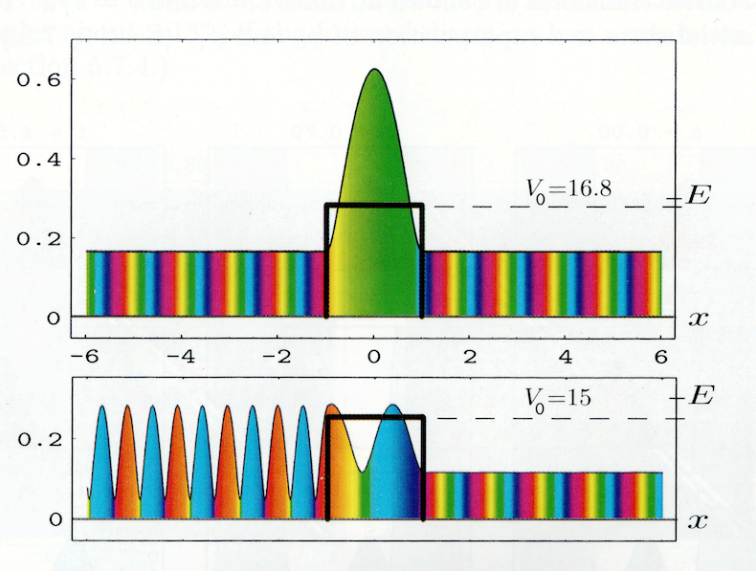


図 9.2: 【COLOR PLATE 24】ポテンシャル障壁に於けるエネルギー $E = 18$ の平面波の散乱．上図は $V_0 = 16.8$ での解を示している．この高さの場合,【カラープレート 23】から分かるが, 反射係数はゼロである．下図は $V_0 = 15$ の場合で, 解の左側部分は入射波と反射波の干渉を示している.

$E = 18$ のエネルギーに対するシュレーディンガー方程式の解を，二つの状況について示している．$V_0 = 16.8$ の解には反射成分がなく，これは左辺の入射波の振幅が右辺の透過波の振幅と等しいことによる．障壁の内部では，波動関数は顕著な共鳴現象を示しており，これは V_0 が小さい場合には現れない．$V_0 = 15$ の解は大きな反射成分を持ち，入射波と強く干渉して障壁の左側に干渉縞を形成する．

反射係数と透過係数の知識は，波束の振る舞いを説明するうえで役立つ.【カラープレート 25】は，エネルギー表示においてガウス関数で与えられる入射波束を示している．これはエネルギー空間で $E = 18$ を中心としており (運動量分布の最大値は $k = 6$)，入射波束の左進み成分がほぼゼロであるため，エネルギー表示は一成分しか持たない．本例では，エネルギー分布が非常に狭

いため，波束に含まれるエネルギーはいずれの状況においても実質的にすべて V_0 より大きい．したがって古典力学的には反射はまったく期待されない．しかし量子力学では，波束のかなりの部分が障壁で反射される．【カラープレート 25】には散乱係数も示されており，関連するエネルギー空間においてエネルギーの関数としてプロットされている．波束のエネルギー空間上のサポートが，$V_0 = 16.8$ の場合の反射係数のゼロ点付近，$V_0 = 15$ の場合の反射係数の極大付近にそれぞれ位置していることがわかる．

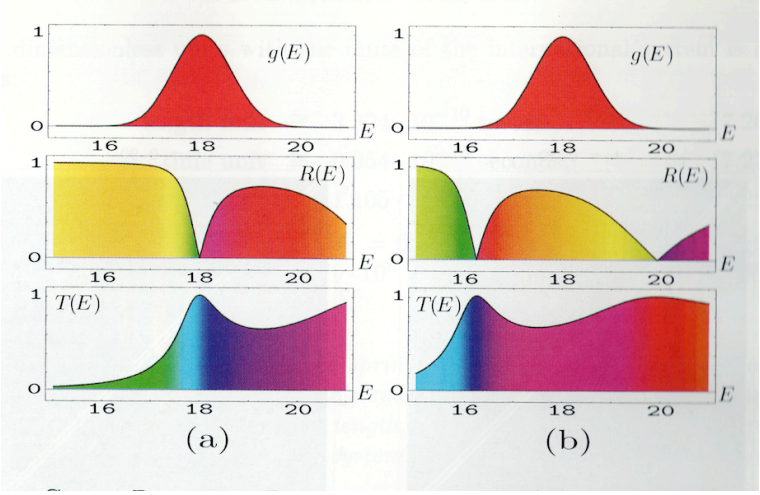


図 9.3: 【COLOR PLATE 25】入射波束のエネルギー表示 $g(E)$, および障壁に於ける散乱係数. (a) $V_0 = 16.8$. (b) $V_0 = 15$.

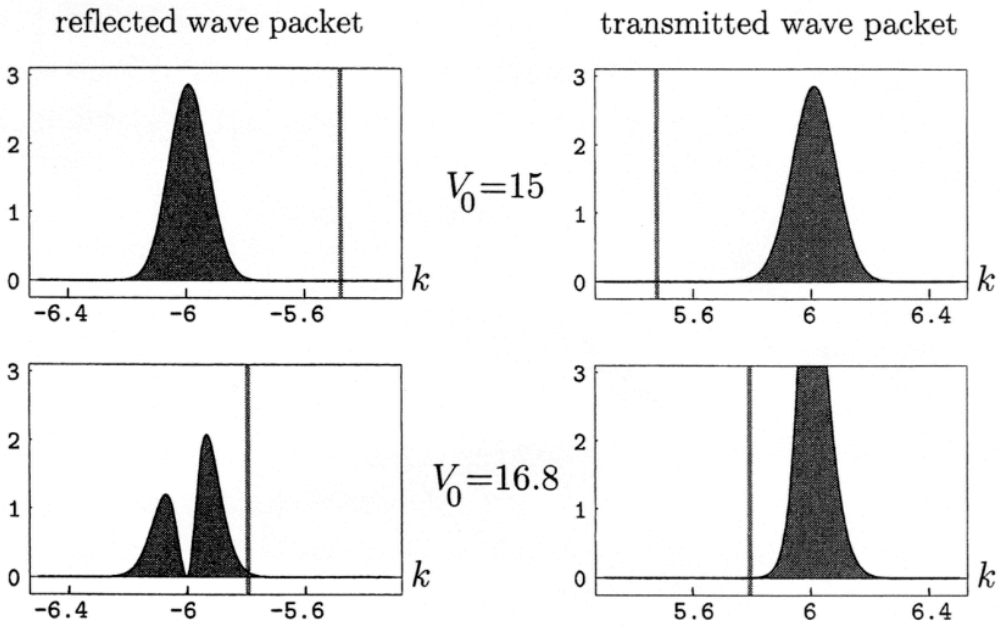


図 9.4: ポテンシャル障壁における散乱．V_0 の二つの値に対する，反射波束および透過波束のフーリエ変換の絶対値．$|k| = \sqrt{2V_0}$ における縦線は V_0 の大きさを示す．

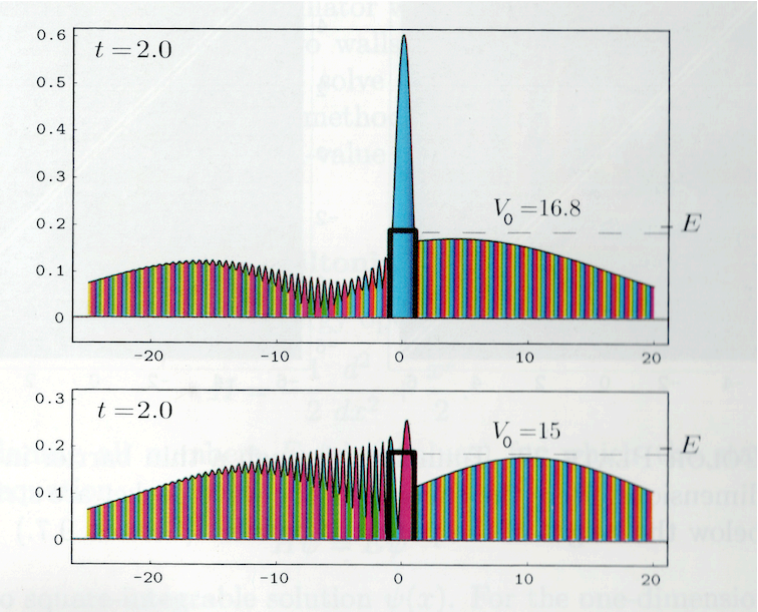


図 9.5: 【COLOR PLATE 26】カラープレート 25 の 2 つの状況において、エネルギーがポテンシャル障壁を厳密に上回る場合の散乱.

反射された波束のエネルギー表示は積 $\underleftarrow{R}(E)\,g(E)$ で与えられ，透過された部分は $\underrightarrow{T}(E)\,g(E)$ で与えられる．エネルギー表示から，3.8 節で述べた変数変換により，射出波のフーリエ変換を決定することができる．その結果を図 9.5 に示す.

$V_0 = 16.8$ と $V_0 = 15$ の二つの状況は，反射された波束において全く異なる運動量分布を生じさせる．まず逆説的に見える事実として，より小さな障壁がより大きな反射成分を生じさせる，ということがある．V_0 が大きい場合，波束のエネルギーは反射係数のゼロ点付近に位置するため，反射成分 $\underleftarrow{R}(E)\,g(E)$ はかなり小さくゼロ点を持つ．これは【カラープレート 25】で最もよく確認できる.

【カラープレート 26】は，障壁での波束の散乱を示している．$V_0 = 16.8$ の場合，反射成分の振幅が確かに小さいことが分かる.【カラープレート 24】の平面波に於いてすでに現れている共鳴は，散乱過程全体を通じて粒子が障壁内部に存在する確率がかなり大きいことを意味する．その結果，透過波は非共鳴の場合（$V_0 = 15$）と比べて遅延する．この時間遅延は共鳴現象に典型的なものである.

運動量分布の図 9.5 から，位置空間での散乱波束の漸近的振る舞いを求めることができる．漸近的振る舞いは自由シュレーディンガー方程式によって記述されるからである．この記述は図 9.7 を参照することで確認できる.

9.7　トンネル効果

式 (9.70) の形のポテンシャルに対する反射係数および透過係数の公式 (9.68)，(9.69) は，重要な量子力学的効果を示すために用いることができる．エネルギー E が障壁の高さ V_0 より小さい正の値をとる場合，古典粒子は反射されるはずである．しかし量子力学的粒子は障壁を「トンネル」する一定の確率を持つ.

$E < V_0$ の場合でも式 (9.68)，(9.69) は成立する．ただし，k_0 が純虚数となることを考慮する

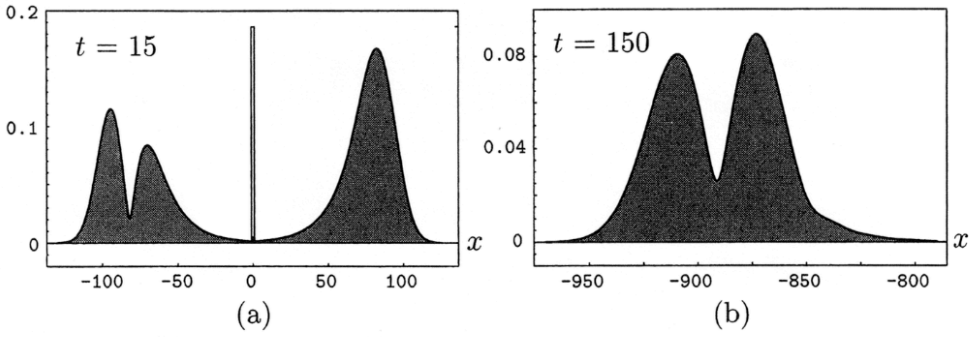


図 9.6: $V_0 = 16.8$，$R = 1$ のポテンシャル障壁における散乱．(a) 散乱された波束がポテンシャル障壁の領域を離れた状態．以降は自由発展が支配し，運動量分布は図 9.5 と同様に一定となる．位置分布の形状はすでに図 9.8 の漸近的運動量分布に類似している．(b) より後の時刻における反射波束の一部．位置空間での波束は，本質的に運動量空間での波束をスケールしたものである．

必要がある：

$$k_0 = \mathrm{i}\sqrt{2(V_0 - E)} = \mathrm{i}\kappa_0, \qquad 0 \le E \le V_0. \tag{9.71}$$

透過係数 (9.69) は ($k_- = k_+ = k$，$r = R$，$L = 2R$ とすると) 次のようになる：

$$\underset{\rightarrow}{T}(E) = \frac{2\kappa_0 k \, \exp(-\mathrm{i}kL)}{2\kappa_0 k \cosh \kappa_0 L + \mathrm{i}(\kappa_0^2 - k^2) \sinh \kappa_0 L}, \tag{9.72}$$

したがって遷移確率 $|\underset{\rightarrow}{T}(E)|^2$ はゼロにならない．

古典的に禁止された領域 $-R \le x < R$ における波動関数の指数的に減衰する部分は $x = R$ においてゼロでなく，したがって粒子が障壁を透過する (トンネル効果) 確率はゼロではない．これは純粋に量子力学的な効果であり，古典粒子は障壁を越えるには低すぎるエネルギーで反射されるはずだからである．

図 9.8 は，固定エネルギー ($E = 1$) における反射確率 $|\underline{R}(E)|^2$ を示している．これは依然として障壁の厚さ R および高さ V_0 に依存する．トンネル効果は，エネルギーより高い障壁 ($V_0 > E$) に対しても反射確率が 1 未満であることを意味する．ある特定の R の値において反射確率がゼロになるのは，第一ステップで反射された波と第二ステップで反射された波の間の破壊的干渉によるものである．

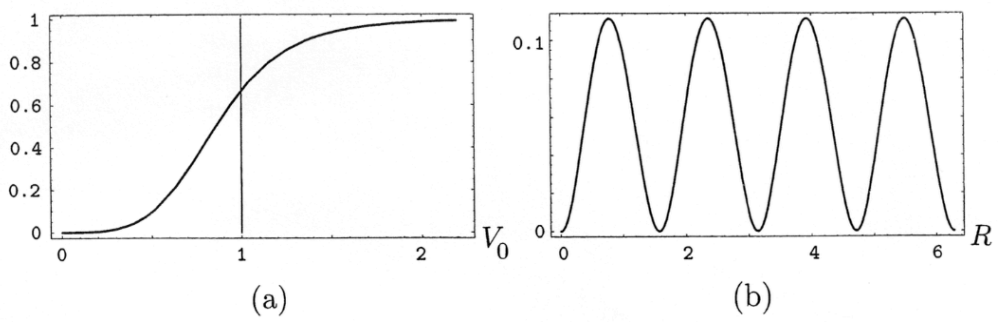


図 9.7: (a) 固定エネルギー ($E = 1$)，$R = 1$ を固定したときの V_0 の関数としての反射確率．(b) $V_0 = 1/2$ を固定したときの厚さ R の関数としての反射確率.