演習問題

2025 年 5 月 1 日　　学籍番号 ＿＿＿＿＿＿＿＿　　氏名 ＿＿＿＿＿＿＿＿

[問 1]

デルタ関数井戸について、束縛状態の解は

$$\psi_{\text{bound}}(x) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-\frac{m\alpha}{\hbar^2}|x|},$$

と求まった。一方、散乱状態の解は

$$\psi_{\text{scattering}}(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & (x < 0), \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} & (x > 0), \end{cases}$$

$$A + B = F + G, \qquad F - G = (1 + 2i\beta)A - (1 - 2i\beta)B, \qquad \beta := \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} = \frac{\alpha}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{2E}}.$$

と求まった。以下、追加の境界条件 $G = 0$ は指定しないで考えよう。束縛状態の解と散乱状態の解が直交すること

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \psi^*_{\text{bound}}(x)\psi_{\text{scattering}}(x) = 0,$$

を示せ。

[解 1]

$$\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \psi^*_{\text{bound}}(x)\psi_{\text{scattering}}(x) \\
&= \int_{-\infty}^{0} dx\ \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar}\left[Ae^{\left(ik+\frac{m\alpha}{\hbar^2}\right)x} + Be^{\left(-ik+\frac{m\alpha}{\hbar^2}\right)x}\right] + \int_{0}^{\infty} dx\ \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar}\left[Fe^{\left(ik-\frac{m\alpha}{\hbar^2}\right)x} + Ge^{\left(-ik-\frac{m\alpha}{\hbar^2}\right)x}\right] \\
&= \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar k}\left[\frac{A}{\beta + i} + \frac{B}{\beta - i} + \frac{F}{\beta - i} + \frac{G}{\beta + i}\right] \\
&= \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar k}\frac{(\beta - i)(A + G) + (\beta + i)(B + F)}{\beta^2 + 1},
\end{aligned}$$

であるが、ここで

$$A + B = F + G, \qquad F - G = (1 + 2i\beta)A - (1 - 2i\beta)B,$$

の第 1 式を β 倍したものに第 2 式を $-i$ 倍したものを足すと

$$\beta(A + B) - i(F - G) = \beta(F + G) - i\left[(1 + 2i\beta)A - (1 - 2i\beta)B\right] \qquad \Longrightarrow \qquad (\beta - i)(A + G) + (\beta + i)(B + F) = 0,$$

となるので示された。

[問 2]

有限井戸型ポテンシャルについて、z_0 が小さい極限 (a を固定したままポテンシャルを浅くする極限 $V_0 \to 0$) を考える。このとき束縛状態の数はどうなるか。

[解 2]　$V_0 \to 0$ で $y = \tan(z)$ と $y = \sqrt{\frac{z_0^2}{z^2} - 1}$ の交点の数は 1、$y = -\frac{1}{\tan(z)}$ と $y = \sqrt{\frac{z_0^2}{z^2} - 1}$ の交点の数は 0 となる。

ポテンシャルが浅い極限でも束縛状態が必ず 1 つは存在することに注意。

[問 3]

ポテンシャルにより粒子が散乱される現象を一般化して理解しよう。図 1 のように、領域 II のみでポテンシャル $V(x)$ が非自明な関数形を持ち、領域 I,III では $V(x) = 0$ という状況を考えよう。領域 I,III での Schrödinger 方程式の一般解は、$k := \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ として

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & (\text{領域 I}), \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} & (\text{領域 III}), \end{cases}$$

である。領域 II ではポテンシャルの具体形がわからない限り $\psi(x)$ の関数形を特定することはできないが、Schrödinger 方程式が 2 階の線形微分方程式なので、2 つの線形独立な解 $f(x), g(x)$ を用いて

$$\psi(x) = Cf(x) + Dg(x) \quad (\text{領域 II}),$$

と書ける。領域 I,II の境界、および領域 II,III の境界で $\psi(x)$ と $\frac{d}{dx}\psi(x)$ に対する境界条件が存在するので、A, B, C, D, F, G に対して 4 つの等式が成り立っている。この 4 つから C, D を消去することで、A, B, F, G に対する 2 つの方程式

$$\begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix},$$

が得られる。ここに現れる行列 $S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}$ を**散乱行列 (scattering matrix, S-matrix)** と言う。なぜ A, G を用いて B, F を表すかというと、左右から領域 II に波が入射した (A, G) 結果、どのような波が左右に出ていくか (B, F) を知りたいからである。左側での反射係数 R_l および透過係数 T_l は、$A \neq 0$ かつ $G = 0$ のときの B および G で

$$R_l = \left. \frac{|B|^2}{|A|^2} \right|_{G=0} = |S_{11}|^2, \qquad T_l = \left. \frac{|F|^2}{|A|^2} \right|_{G=0} = |S_{21}|^2,$$

と与えられる。また、右側での反射係数 R_r および透過係数 T_r は、$A = 0$ かつ $G \neq 0$ のときの F および B で

$$R_r = \left. \frac{|F|^2}{|G|^2} \right|_{A=0} = |S_{22}|^2, \qquad T_r = \left. \frac{|B|^2}{|G|^2} \right|_{A=0} = |S_{12}|^2,$$

と与えられる。

(1)　デルタ関数井戸

$$V(x) = -\alpha\delta(x) \quad (\alpha > 0),$$

に対する S-matrix を構成せよ。

(2)　有限井戸型ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & (-a \le x \le a), \\ 0 & (x < -a \ \text{ or } \ a > x). \end{cases}$$

に対する S-matrix を構成せよ。

[解 3]

(1)　デルタ関数井戸に対しては、領域 II の幅が無限に狭いため領域 I,III を直接繋ぐことができる。まず $\psi(x)$ に対する条件から

$$A + B = F + G,$$

が得られ、$\frac{d}{dx}\psi(x)$ に対する条件については Schrödinger 方程式を原点周りの微小領域で積分すると

$$F - G = A(1 + 2i\beta) - B(1 - 2i\beta), \qquad \beta := \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} = \frac{\alpha}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{2E}},$$

が得られる。よって

$$\begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = \frac{1}{1 - i\beta}\begin{pmatrix} i\beta & 1 \\ 1 & i\beta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix},$$

となるから、

$$S = \frac{1}{1 - i\beta}\begin{pmatrix} i\beta & 1 \\ 1 & i\beta \end{pmatrix},$$

である。

(2)　まず領域 III から領域 II への入射波がない $(G = 0)$ 場合は、$\psi(x)$ に関する境界条件から、$x = \mp a$ それぞれについて

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = -C\sin(la) + D\cos(la), \qquad C\sin(la) + D\cos(la) = Fe^{ika},$$

が得られ、$\frac{d}{dx}\psi(x)$ に関する境界条件から同様に

$$ikAe^{-ika} - ikBe^{ika} = Cl\cos(la) + Dl\sin(la), \qquad Cl\cos(la) - Dl\sin(la) = ikFe^{ika},$$

が得られる。行列で書くと

$$\begin{pmatrix} e^{-ika} & e^{ika} \\ ike^{-ika} & -ike^{ika} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin(la) & \cos(la) \\ l\cos(la) & l\sin(la) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} \sin(la) & \cos(la) \\ l\cos(la) & -l\sin(la) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = Fe^{ika}\begin{pmatrix} 1 \\ ik \end{pmatrix},$$

となるから、C, D を消去して

$$
\begin{aligned}
\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} &= F \begin{pmatrix} e^{2ika}\left[\cos(2la) - i\frac{k^2+l^2}{2kl}\sin(2la)\right] \\ i\frac{-k^2+l^2}{2kl}\sin(2la) \end{pmatrix} \\
\Longrightarrow \qquad \begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} &= \frac{A}{e^{2ika}\left[\cos(2la) - i\frac{k^2+l^2}{2kl}\sin(2la)\right]} \begin{pmatrix} i\frac{-k^2+l^2}{2kl}\sin(2la) \\ 1 \end{pmatrix},
\end{aligned}
$$

が得られる。k と l は条件 $-k^2 + l^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$ で関連付いていることに注意しよう。さて、今の場合ポテンシャルは偶関数 $V(x) = V(-x)$ であるから、左右の入射波を入れ替える変換 $A \leftrightarrow G$ および左右の反射波を入れ替える変換 $B \leftrightarrow F$ をした式も成立する。よって

$$
\begin{pmatrix} F \\ B \end{pmatrix} = \frac{G}{e^{2ika}\left[\cos(2la) - i\frac{k^2+l^2}{2kl}\sin(2la)\right]} \begin{pmatrix} i\frac{-k^2+l^2}{2kl}\sin(2la) \\ 1 \end{pmatrix},
$$

となるから、

$$
\begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = \frac{1}{e^{2ika}\left[\cos(2la) - i\frac{k^2+l^2}{2kl}\sin(2la)\right]} \begin{pmatrix} i\frac{-k^2+l^2}{2kl}\sin(2la) & 1 \\ 1 & i\frac{-k^2+l^2}{2kl}\sin(2la) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix},
$$

となる。したがって S-matrix は

$$
S = \frac{1}{e^{2ika}\left[\cos(2la) - i\frac{k^2+l^2}{2kl}\sin(2la)\right]} \begin{pmatrix} i\frac{-k^2+l^2}{2kl}\sin(2la) & 1 \\ 1 & i\frac{-k^2+l^2}{2kl}\sin(2la) \end{pmatrix},
$$

である。

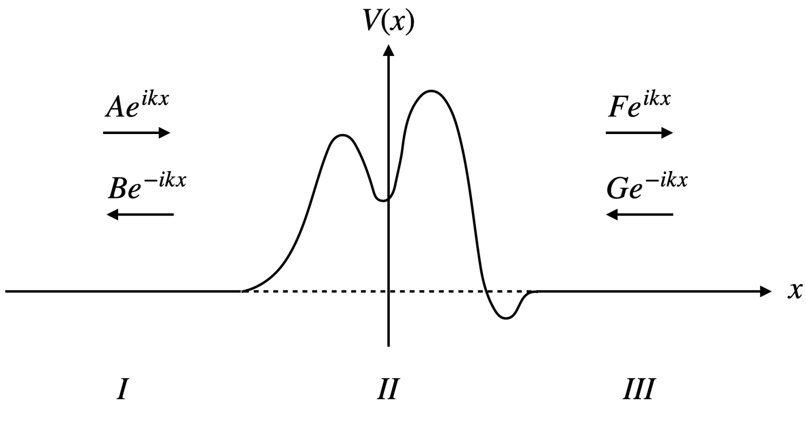

図 1: ポテンシャルが領域 II でのみ非自明な関数形を持ち、領域 I,III で $V(x) = 0$ である例。