■12 群（電子情報通信基礎）－ 5 編（量子力学・電子物理・相対論）

2 章 1 次元の基本的問題

（執筆者：清水清孝）［　年　月 受領］

■概要■

【本章の構成】

■12 群－5 編－2 章

2-1 1 次元調和振動子

（執筆者：清水清孝）［2009 年 1 月 受領］

基本的な運動の代表である調和振動子について考察しよう．働く力の大きさが変位に比例するバネでは，バネ定数を k とするとポテンシャルエネルギーは以下のように書ける．

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \tag{2・1}$$

このバネについた質量が m の粒子のシュレーディンガー方程式は以下のようになる．

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) + \frac{1}{2}kx^2\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi(x) = E\psi(x) \tag{2・2}$$

ただし，$\omega = \sqrt{k/m}$ は角振動数である．ここで $b = \sqrt{m\omega/\hbar}$ を導入し，無次元の座標 $z = x/b$ を使うと，$E = \hbar\omega\lambda/2$ として，方程式は以下のような見やすいかたちになる．

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}z^2} + (\lambda - z^2)\psi = 0 \tag{2・3}$$

まずこの方程式の解 $\psi(z)$ の，$z \to \infty$ での振る舞いについて考察しよう．$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}z^2} \sim z^2\psi$ より，$\psi \sim \exp(\pm z^2/2) \times (z$ の多項式$)$ となることが予想される．したがって発散しない解として以下のかたちをとろう．

$$\psi(z) = u(z)\exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) \tag{2・4}$$

方程式に代入すると $u(z)$ に関しては以下の微分方程式になる．

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}z^2} - 2z\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z} + (\lambda - 1)u = 0 \tag{2・5}$$

この方程式の解は以下のように z の多項式で展開することにより求めることができる．

$$u(z) = z^s\sum_{m=0} C_m z^{2m}, \quad (C_0 \neq 0) \tag{2・6}$$

ただし，ここで方程式が $z \to -z$ に対して不変なので，z^2 で展開した．これより，1 階及び 2 階の導関数を計算し，方程式に代入して z の各次数をゼロとおくと，展開係数 C_m に対する関係式が得られる．まず z^{s-2} の係数より以下の関係式を得る．

$$C_0 s(s-1) = 0 \tag{2・7}$$

$C_0 \neq 0$ より，$s = 0$ または $s = 1$ となる．u は $s = 0$ では偶関数となり，$s = 1$ では奇関数となる．次に z^{s+2m} の係数より係数 C_m に対する以下の漸化式を得る．

$$C_{m+1}(s+2m+2)(s+2m+1) - 2C_m(s+2m) + (\lambda-1)C_m = 0 \tag{2・8}$$

$$\therefore\ C_{m+1} = \frac{2s+4m+1-\lambda}{(s+2m+2)(s+2m+1)}C_m \tag{2・9}$$

m が大きいところでの係数 C_m の振る舞いをみると以下のようになる．

$$C_{m+1} \sim \frac{C_m}{m} \tag{2・10}$$

したがって u は z が大きいところでは $u \sim \exp(z^2)$ となり，$\psi \sim \exp(z^2/2)$ のかたちとなり発散する．これはシュレーディンガー方程式の解には採用できない．しかしもし漸化式の係数 $2s + 4m + 1 - \lambda$ がある $m(= n)$ に対してゼロになったとすると，u は有限次元の多項式となり $\psi = u(z)\exp(-z^2/2)$ はシュレーディンガー方程式の解になる．したがって λ は以下の値のみが許される．

$$\lambda = 4n + 2s + 1, \qquad n = 0, 1, 2, 3, 4, \cdots \tag{2・11}$$

$s = 0$ と $s = 1$ の場合をまとめて書くと $\lambda = 2n + 1$ となり，エネルギー固有値 E は以下のようになる．

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2}\lambda = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \qquad n = 0, 1, 2, 3, 4, \cdots \tag{2・12}$$

$n = 0, 1, 2$ に対する固有値を図 2・1 に示した．各エネルギー準位の間隔は $\hbar\omega$ である．

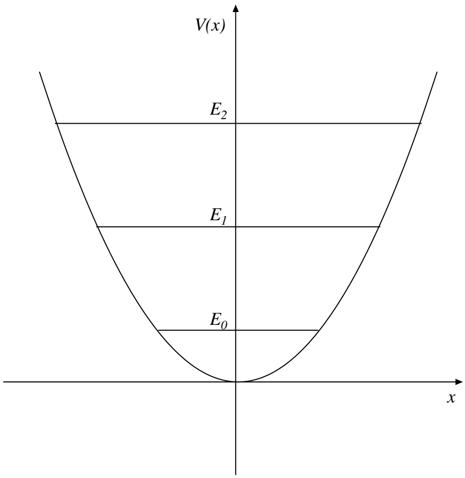

図 2・1　調和振動子のポテンシャルと固有状態（$n = 0, 1, 2$）のエネルギー

各々の n に対する多項式 u を $u_n(z)$ と書くと，この多項式はエルミート $H_n(z)$ の多項式となる．以上より，規格化された波動関数は次のように書ける．

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}2^n n! b}} H_n\left(\frac{x}{b}\right)\exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right) \tag{2・13}$$

基底状態のエネルギーは

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \tag{2・14}$$

であり，x^2 及び p_x^2 の期待値は以下のようになる．

$$< x^2 >= \frac{\hbar}{2m\omega}, \qquad < p_x^2 >= \frac{m\hbar\omega}{2} \tag{2・15}$$

古典力学におけるエネルギーの一番低い状態は，粒子が $x = 0$ のところに静止している状態である．量子力学においては，不確定性原理のために，$x = 0$ のところに静止することはできない．座標と運動量の不確定性について考察してみよう．$< x >= 0$ 及び $< p_x >= 0$ を使うと

$$(\Delta x) = \sqrt{< x^2 >} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}, \qquad (\Delta p_x) = \sqrt{< p_x^2 >} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \tag{2・16}$$

したがって

$$(\Delta x)(\Delta p_x) = \frac{\hbar}{2} \tag{2・17}$$

となり，式 (1·18) の座標と運動量の不確定性の積を最小にする状態であることが分かる．

■12 群 - 5 編 - 2 章

2-2 1 次元調和振動子の別解法

（執筆者：清水清孝）［2009 年 1 月 受領］

今まで扱ってきた 1 次元の調和振動子の固有値を別の方法で求めてみよう．量子力学で基本的なことは運動量 p と座標 x の交換関係 $xp - px = \mathrm{i}\hbar$ である．そこで微分方程式のかたちにしないで，この交換関係だけを使って固有値問題を解く方法について考えてみよう．まず以下のような演算子 a 及びそれのエルミート共役な演算子 $a^\dagger$ を導入する．

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}p \tag{2・18}$$

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}p \tag{2・19}$$

すると a と $a^\dagger$ の交換関係は以下のようになり，ハミルトニアンは a と $a^\dagger$ を使って以下のように書ける．

$$aa^\dagger - a^\dagger a = 1, \qquad H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) \tag{2・20}$$

基底状態を $|0>$ として，エネルギーを E_0 とすると明らかに $E_0 \geqq 0$ である．ここで状態 $a^\dagger|0>$ について考えてみよう．

$$Ha^\dagger|0> = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)a^\dagger|0> = \hbar\omega a^\dagger\left(a^\dagger a + 1 + \frac{1}{2}\right)|0> = (E_0 + \hbar\omega)a^\dagger|0> \tag{2・21}$$

つまり，状態 $a^\dagger|0>$ は E_0 より $\hbar\omega$ だけ高いエネルギーをもつ状態である．一般的に，固有状態 $|n>$ に対して，状態 $a^\dagger|n>$ は E_n より $\hbar\omega$ だけ高いエネルギーをもつ状態であることが分かる．

$$Ha^\dagger|n> = (E_n + \hbar\omega)a^\dagger|n> \tag{2・22}$$

同様にして，状態 $a|n>$ は E_n より $\hbar\omega$ だけ低いエネルギーをもつ状態であることも示すことができる．

$$Ha|n> = (E_n - \hbar\omega)a|n> \tag{2・23}$$

基底状態より低いエネルギーをもつ状態はつくれないから $a|0> = 0$ でなければならない．このことより，基底状態のエネルギーは以下のようになる．

$$H|0> = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)|0> = \frac{\hbar\omega}{2}|0> \tag{2・24}$$

また一般の励起状態 $|n>$ は基底状態 $|0>$ に $a^\dagger$ を n 回かけて得られ，その固有値は以下のようになる．

$$H(a^\dagger)^n|0>=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)(a^\dagger)^n|0> \tag{2・25}$$

最後に規格化された状態 $|n>$ を求めておこう．

$$|n>=N_n(a^\dagger)^n|0> \tag{2・26}$$

規格化定数 N_n に対して，$<n|n>=1$ 及び a と $a^\dagger$ の交換関係を使うと以下の関係式が得られる．

$$N_{n-1}^2=nN_n^2 \tag{2・27}$$

したがって以下の結果を得る．

$$N_n=\frac{1}{\sqrt{n!}} \tag{2・28}$$

a と $a^\dagger$ の行列要素は以下のようになる．

$$<n-1|a|n>=\sqrt{n},\quad <n+1|a^\dagger|n>=\sqrt{n+1} \tag{2・29}$$

■12 群 - 5 編 - 2 章

2-3 井戸型ポテンシャルによる反射と透過

（執筆者：清水清孝）［2009 年 1 月 受領］

図 2･2 のような，$0 < x < a$ で $V_0(> 0)$ の高さをもつ井戸型ポテンシャルによって質量が m の粒子がどのように反射されるかについて考えてみよう．

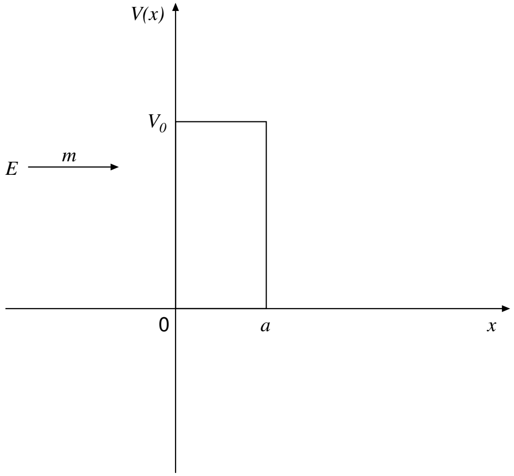

図 2･2　高さが V_0 の井戸型ポテンシャルに入射してくるエネルギー E の粒子

シュレーディンガー方程式はエネルギーを $E = \hbar^2k^2/2m$ とすると，以下のように書ける．

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x) \quad (x < 0, x > a) \tag{2･30}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = (E - V_0)\psi(x) \quad (0 < x < a) \tag{2･31}$$

まず，$E < V_0$ の場合について考えてみよう．粒子は $x = -\infty$ の方向から入射し，$x = 0$ でポテンシャル壁で反射されるか透過していくとし，$E - V_0 = -\hbar^2\kappa^2/2m$ とおくと，方程式の解は以下のようになる．

$$\psi(x) = e^{ikx} + Ae^{-ikx} \quad (x < 0) \tag{2･32}$$

$$\psi(x) = Be^{-\kappa x} + Ce^{\kappa x} \quad (0 < x < a) \tag{2･33}$$

$$\psi(x) = De^{ikx} \quad (a < x) \tag{2･34}$$

ここで定数 A, B, C, D は波動関数及びその微係数が $x = 0$ と $x = a$ で連続であるという条件から決まる．

係数を決める前に，まず粒子の流れを計算してみよう．運動量を $p = -i\hbar d/dx$ とすると，流れは以下のように書ける．

$$j(x) = \psi(x)^* \frac{p}{m}\psi(x) = \frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\left\{\psi(x)^*\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} - \frac{\mathrm{d}\psi(x)^*}{\mathrm{d}x}\psi(x)\right\} \tag{2・35}$$

波動関数を使って具体的に求めると以下のようになる．

$$j(x) = \frac{\hbar k}{m}(1 - |A|^2) \quad (x < 0) \tag{2・36}$$

$$j(x) = \frac{\hbar k}{m}|D|^2 \quad (a < x) \tag{2・37}$$

係数 $\frac{\hbar k}{m}$ は粒子の速度であり，( ) の中の 1 が，$x < 0$ で x 軸の正の方向に進む波の強さを表していることから，$|A|^2$ は反射率，$|D|^2$ は透過率であることが分かる．

波動関数及びその微係数が $x = 0$ と $x = a$ で連続であるという条件から以下の関係式を得る．

$$1 + A = B + C \tag{2・38}$$

$$\mathrm{i}k - \mathrm{i}kA = -\kappa B + \kappa C \tag{2・39}$$

$$B\mathrm{e}^{-\kappa a} + C\mathrm{e}^{\kappa a} = D\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} \tag{2・40}$$

$$-\kappa B\mathrm{e}^{-\kappa a} + \kappa C\mathrm{e}^{\kappa a} = \mathrm{i}kD\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} \tag{2・41}$$

この方程式を解くと以下のようになる．

$$A = \frac{(\kappa^2 + k^2)(2\mathrm{e}^{\kappa a} - 1)}{(\kappa + \mathrm{i}k)^2 - (\kappa - \mathrm{i}k)^2 2\mathrm{e}^{\kappa a}} \tag{2・42}$$

$$D = \frac{4\mathrm{i}k\kappa\mathrm{e}^{\kappa a - \mathrm{i}ka}}{(\kappa + \mathrm{i}k)^2 - (\kappa - \mathrm{i}k)^2 2\mathrm{e}^{\kappa a}} \tag{2・43}$$

以上より，反射率と透過率を求めると以下のようになる．

$$|A|^2 = \frac{(\kappa^2 + k^2)^2 \sinh^2 \kappa a}{(\kappa^2 + k^2)^2 \sinh^2 \kappa a + 4\kappa^2 k^2} \tag{2・44}$$

$$|D|^2 = \frac{4\kappa^2 k^2}{(\kappa^2 + k^2)^2 \sinh^2 \kappa a + 4\kappa^2 k^2} \tag{2・45}$$

明らかに，$|A|^2 + |D|^2 = 1$ であり，反射された波と透過した波の強さの和は入射してきた波の強さに等しい．これは粒子数が保存されることを示している．

$E < V_0$ の場合，古典論においては粒子はすべて壁により反射されるが，量子論においては粒子の波動性のために $E < V_0$ でも壁を透過する．この現象をトンネル効果と呼ぶ．