

5.3 井戸型ポテンシャル（深さ有限）

次の例として、ある領域の中と外で異なる値を取るポテンシャル上を運動する粒子について考えよう。このようなポテンシャルは、金属内の電子などをモデル

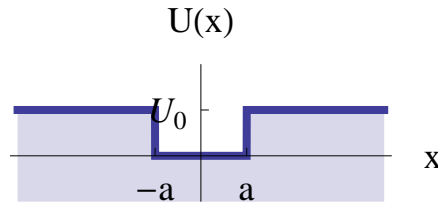


図 19: 深さが有限の井戸型ポテンシャル

化した際に現れる。 $U_0 \rightarrow \infty$ の極限では先ほど考えた深さが無限大の井戸型ポテンシャルに帰着する。

このようなポテンシャル上での古典的粒子の運動は次のようになる。

$E > U_0$ のとき 粒子は $-\infty$ から $+\infty$ またはその逆に運動する。

$0 < E < U_0$ のとき 粒子は $x = \pm a$ の間を往復運動する。

これに対し、量子論的にはエネルギースペクトルに関する一般論より

$E > U_0$ のとき 連続スペクトル、二重に縮退、規格化不可能

$0 < E < U_0$ のとき 離散スペクトル、縮退なし、規格化可能

であると期待される。 $x = \pm a$ においてポテンシャルは不連続であるが、§5.1 において与えた波動関数の性質 [2] より、波動関数は連続である。従って、 $x = \pm a$ によって分けられる 3 つの領域でシュレーディンガー方程式の解を求め、それらを滑らかにつなぎ合わせることで全領域での解を得ることができる。

ここでは $0 < E < U_0$ であると仮定して束縛状態の解を求めてみよう。

$$b = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}, \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad (217)$$

を定義しておくると便利である。すると、井戸の内部 ($-a < x < a$) でのシュレーディンガー方程式は

$$\psi'' + k^2\psi = 0 \quad (218)$$

であり、解は e^{ikx} と e^{-ikx} の線形結合である。井戸の外 ($|x| > a$) ではシュレーディンガー方程式は

$$\psi'' - b^2\psi = 0. \quad (219)$$

であり、その解は e^{bx} と e^{-bx} の線形結合である。波動関数は、これらの微分方程式を満足することに加え、 $x = \pm a$ において滑らかであり、 $x \rightarrow \pm\infty$ において ψ は有限でなければならないという条件が課される。

ポテンシャルが偶関数であるから、§5.1 において与えた波動関数の性質 [5] より、波動関数は偶関数または奇関数としてよい。まずは偶関数の場合を考えよう。上記のシュレーディンガー方程式の解は、それぞれの領域において次のように与えられる。

$$\psi = Ae^{bx} \quad (x \leq -a), \quad \psi = B \cos(kx) \quad (-a \leq x \leq a), \quad \psi = Ae^{-bx} \quad (a \leq x). \quad (220)$$

井戸の外側での波動関数の形を決めるのに、 $x \rightarrow \pm\infty$ で 0 になることを用いた。波動関数が $x = \pm a$ で連続であるということより

$$Ae^{-ba} = B \cos ka \quad (221)$$

を得る。さらに、点 $x = \pm a$ において滑らかでなければならない (つまり、 ψ' が連続でなければならない) という条件から

$$bAe^{-ba} = kB \sin ka \quad (222)$$

を得る。(221) と (222) の比を取ることで、 A と B を含まない次の式を得ることができる。

$$b = k \tan ka \quad (223)$$

b も k もそれらの定義 (217) を通してエネルギー E に依存している。従って、(223) を解くことによって離散的なエネルギーの値を得ることができる。この方程式を E について解析的に解くことはできないが、グラフを用いて値を数値的に求めるのは簡単である。 k と b は定義 (217) より次の関係式を満足する。

$$b^2 + k^2 = \frac{2mU_0}{\hbar^2} \quad (224)$$

従って、(223) と (224) のグラフを k - b 平面上に描き、それらの交点を求めることで、 k と b の値が求まる。(b と k はどちらも正なので、第一象限だけを見ればよい。) 実際に図示すると、図 20 のようになる。

同様にして、波動関数が奇関数である場合も考えることができる。各領域での波動関数は (220) の代わりに次のようになる。

$$\psi = -Ae^{bx} \quad (x \leq -a), \quad \psi = B \sin(kx) \quad (-a \leq x \leq a), \quad \psi = Ae^{-bx} \quad (a \leq x). \quad (225)$$

$x = \pm a$ における接続条件からは

$$Ae^{-ba} = B \sin ka, \quad bAe^{-ba} = -kB \cos(ka) \quad (226)$$

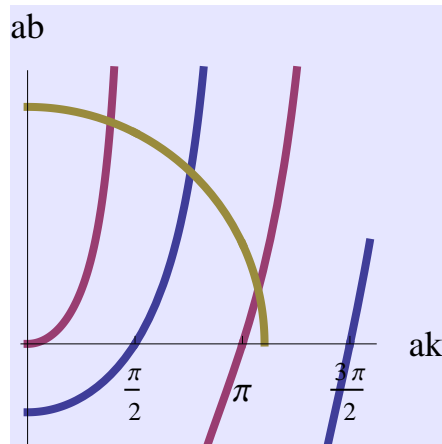


図 20: (223) のグラフを赤、(227) のグラフを青、(224) のグラフを黄で描いた。

の条件が得られ、これらの比を取ることで

$$b = -k \cot ka \quad (227)$$

を得る。今度は (227) と (224) を連立させて解くことで、 b と k が決まる。これも、グラフを用いて解くことができる。

図 20 からグラフの交点を読み取ると、束縛状態の個数は波動関数が偶関数であるものと奇関数であるものをあわせて

$$\left[\frac{ak}{\pi/2} \right] + 1 \quad (228)$$

であることがわかる。ただしここで用いた $[\dots]$ はガウス記号であり、 $[x]$ は x を超えない最大の整数を表す。

波動関数の概形を図示すると、図 21 のようになる。解は次のようになる。ポテ

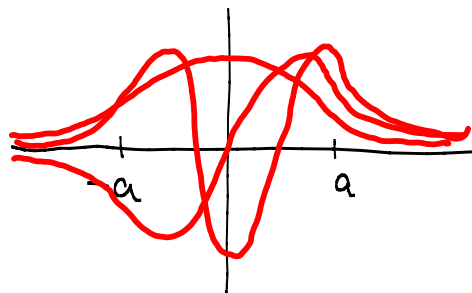


図 21: 箱型ポテンシャル上の束縛状態の波動関数

ンシャルの井戸の外側（古典的には粒子が来ることが許されない領域）であっても粒子が存在する確率が 0 ではないことに注意しよう。

5.4 δ -関数型ポテンシャル

§5.3 において考えた有限の深さの井戸型ポテンシャルのエネルギーの原点をずらしたものを図 22 に与えた。このポテンシャルにおいて、ポテンシャルのグラフ

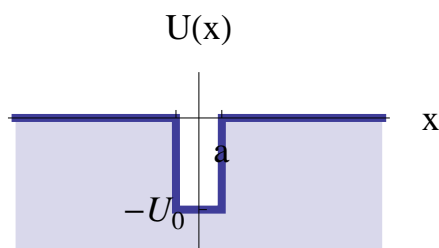


図 22: 井戸型ポテンシャル。ポテンシャルのグラフと x 軸に囲まれた長方形領域の面積を有限に保ちつつ U_0 を無限大にする極限で δ -関数型ポテンシャルに移行する。

と x 軸に囲まれた面積 $2aU_0 = Z$ を一定にしながら $a \rightarrow 0, U_0 \rightarrow \infty$ の極限をとると、 δ -関数型ポテンシャル

$$U(x) = -Z\delta(x) \quad (229)$$

が得られる。シュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - Z\delta(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (230)$$

である。ここでは $Z > 0$ を仮定する。(つまり、ポテンシャルは負の値をとる。) 束縛状態 ($E < 0$) があるかどうかをしらべてみよう。

$x \neq 0$ では

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (231)$$

なので、一般解は

$$\psi = Ae^{bx} + Be^{-bx} \quad (232)$$

である。ただし、

$$b = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE} \quad (233)$$

によって b を定義した。 $\pm\infty$ で発散しないためには

$$\begin{cases} \psi = Ae^{bx} & (x < 0) \\ \psi = Be^{-bx} & (x > 0) \end{cases} \quad (234)$$

でなければならない。

波動関数は $x = 0$ で連続でなければならないから、 $A = B$ であり、波動関数はまとめて

$$\psi(x) = Ae^{-b|x|} \quad (235)$$

と与えることができる。 $x = 0$ で ψ' は連続ではないことに注意。グラフの折れ曲がり方に対する情報を得るために、シュレーディンガー方程式を $-\epsilon \sim \epsilon$ で積分する。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d\psi}{dx} \right]_{-\epsilon}^{+\epsilon} - Z\psi(0) = E \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \psi(x) dx \quad (236)$$

そして $\epsilon \rightarrow 0$ の極限を取れば、 $x = 0$ における波動関数の折れ曲がり具合を決める次の式が得られる。

$$\psi'(+0) - \psi'(-0) = -\frac{2mZ}{\hbar^2} \psi(0) \quad (237)$$

ここに (235) を代入すると、

$$b = \frac{mZ}{\hbar^2} \quad (238)$$

が得られる。ここから、エネルギー固有値が一意的に次のように決まる。

$$E = -\frac{b^2 \hbar^2}{2m} = -\frac{mZ^2}{2\hbar^2}. \quad (239)$$

束縛状態が存在すれば一つだけであることは以下のような考察からもわかる。仮に束縛状態が二つ以上存在したとしてみよう。すると、§5.2 に与えた振動定理より第一励起状態の波動関数は奇関数である。ということは $\psi(0) = 0$ であり、粒子が原点に存在する確率は 0 である。ということは粒子はポテンシャル ($x = 0$ においてのみ 0 でない) の影響を受けないはずであり、束縛状態にはならない。これは仮定に反するから、束縛状態は二つ以上は存在しないということが結論される。

係数 A は波動関数の規格化により定めることができる。

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2b|x|} dx = |A|^2 \frac{1}{b}. \quad (240)$$

つまり A は (位相の不定性を除き) $A = \sqrt{b}$ と決まり、規格化された波動関数は次のように与えられる。(図 23)

$$\psi(x) = \sqrt{b} e^{-b|x|} \quad (241)$$

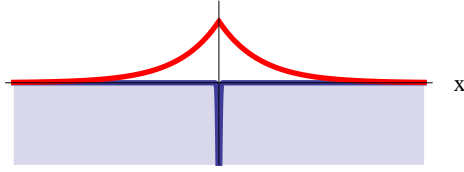


図 23: δ 関数型ポテンシャル上の束縛状態の波動関数

6 古典的運動との関係

6.1 古典極限

量子力学において、 $\hbar \rightarrow 0$ の極限をうまく取ることによって、古典力学を得ることができる。このとき、波動関数に対応するのは何であろうか。

時間に依存するシュレーディンガー方程式

$$\hat{H}(\hat{p}, x)\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi \quad (242)$$

の解について考えよう。自由粒子（つまりポテンシャルが $U(x) = 0$ ）であれば、

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} \quad (243)$$

が解となる。この波動関数自体は $\hbar \rightarrow 0$ の極限を取ると意味の無いものになってしまう。古典的に意味がありそうなのは、位相部分から i/\hbar という因子を取り除いた $px - Et$ の部分である。そこで一般の場合の解を次のように置いてみよう。

$$\psi = \exp \frac{i}{\hbar} S(x, t). \quad (244)$$

上記の自由粒子の場合には

$$S(x, t) = px - Et \quad (245)$$

であり、古典的にも何らかの意味を持ちそうである。

古典極限を取ったときに、関数 $S(x, t)$ がどのような方程式を満足するかを見てみよう。ハミルトニアンが

$$H(\hat{p}, x) = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + U(x) \quad (246)$$

と与えられる場合に、(244) を時間に依存するシュレーディンガー方程式に代入してみると、次の式を得る。

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 - i\hbar \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right] + U(x) = -\frac{\partial S}{\partial t} \quad (247)$$

よって、 $\hbar \rightarrow 0$ の極限では

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + U = -\frac{\partial S}{\partial t} \quad (248)$$

が得られる。これは、古典力学（解析力学）におけるハミルトン・ヤコビ方程式であり、その解である関数 $S(x, t)$ は作用関数

$$S(x, t) = \int_{t_0}^t L(x, \dot{x}) dt \quad (249)$$

である。

ハミルトン・ヤコビ方程式の一般形は

$$H \left(p = \frac{\partial S}{\partial x}, x \right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad (250)$$

である。時間に依存するシュレーディンガー方程式に対して、定常状態の波動関数

$$\psi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \psi(x) \quad (251)$$

を代入すると、時間に依存しないシュレーディンガー方程式が得られるが、このことに対応して、ハミルトン・ヤコビ方程式に対して

$$S(x, t) = S(x) - Et \quad (252)$$

を代入すると、時間に依存しないハミルトン・ヤコビ方程式が得られる。

$$H \left(p = \frac{\partial S}{\partial x}, x \right) = E \quad (253)$$

この式は時間に依存しないシュレーディンガー方程式の $\hbar \rightarrow 0$ 極限として得ることもできる。

6.2 半古典近似

1次元の系では、時間に依存しないハミルトン・ヤコビ方程式(253)は簡単に解くことができる。 $U(x) < E$ であるような領域において、次の関数を定義しよう。

$$p_{\pm}(x) = \pm \sqrt{2m(E - U(x))} \quad (254)$$

これは、エネルギー E を持つ質点が点 x を通過するときの運動量である。運動の方向それぞれに対応して $p_+(x)$ と $p_-(x)$ を定義した。この関数を用いれば、時間に依存しないハミルトン・ヤコビ方程式(253)は

$$\frac{dS(x)}{dx} = p_{\pm}(x) \quad (255)$$

と書くことができる。従って、積分することにより次の解を得る。

$$S_{\pm}(x) = \int p_{\pm}(x) dx \quad (256)$$

$S_{\pm}(x)$ それぞれが積分定数の不定性を持つが、これはあとで決める。 $S_{\pm}(x)$ が求まれば、波動関数は近似的に

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}S_+(x)} + e^{\frac{i}{\hbar}S_-(x)} \quad (257)$$

と与えられる。それぞれの項の係数は自由に選ぶことができるが、それは $S_{\pm}(x)$ の定義に繰り込んであるものとする。

ここで行ったように、 \hbar が小さいとして近似的に波動関数を求める近似法を WKB 近似 (Wentzel-Kramers-Brillouin 近似) と呼ぶ。

このような近似を行う場合には、近似が悪くなるのはどのような場合かを常に気にする必要がある。ハミルトン・ヤコビ方程式を得る手続きを振り返ってみると、(247) の括弧の中の二つの項

$$\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 - i\hbar \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \quad (258)$$

において第 2 項が第 1 項よりも十分に小さいと仮定して無視した。しかし $\partial S/\partial x = 0$ の点ではこれが成り立たず、近似が悪くなる。ハミルトン・ヤコビ方程式の解については $p = \partial S/\partial x$ は運動量であるから、 $\partial S/\partial x = 0$ という点は運動量が 0 である点、すなわち全エネルギー E がポテンシャルエネルギー $U(x)$ と等しくなり、粒子が運動の向きを変える点である。このような点のことを古典回帰点と呼ぶ。(図 24)

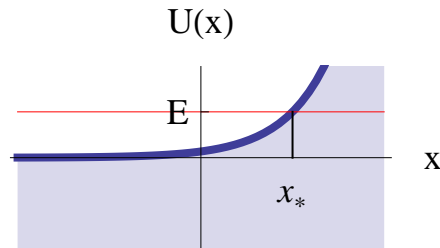


図 24: 古典回帰点

古典回帰点においては、上で行った近似が良くないので、真面目にシュレーディンガー方程式を解く必要がある。ここでは問題を簡単にするために、ポテンシャルが急激に立ち上がり、古典回帰点 $x = x_*$ においては固定端条件 $\psi(x_*) = 0$ が課される場合を考えてみよう。 $S_{\pm}(x)$ のうち、 $S_+(x)$ を積分定数まで含めて定義するために、基準点 x_0 を定め、そこからの積分として $S_+(x)$ を次のように定義することにする。

$$S_+(x) = \int_{x_0}^x p_+(x) dx \quad (259)$$

このとき、(257) の第 2 項に現れる $S_-(x)$ の定数部分は波動関数が固定端条件を満足するように決めなければならない。すなわち

$$e^{\frac{i}{\hbar}S_-(x_*)} = -e^{\frac{i}{\hbar}S_+(x_*)} \quad (260)$$

が成り立たなければならない。この両辺の対数を取ることで

$$\frac{S_-(x_*)}{\hbar} = \frac{S_+(x_*)}{\hbar} - \pi. \quad (261)$$

が得られる。(対数は多価関数であるためにさらに 2π の整数倍を右辺に加えることもできるが、ここでは無視する。) よって、 $S_-(x)$ は次のように与えることができる。

$$\begin{aligned} \frac{S_-(x)}{\hbar} &= \frac{S_-(x_*)}{\hbar} + \frac{1}{\hbar} \int_{x_*}^x p_-(x) dx \\ &= \frac{S_+(x_*)}{\hbar} - \pi + \frac{1}{\hbar} \int_{x_*}^x p_-(x) dx \\ &= \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^{x_*} p_+(x) dx - \pi + \frac{1}{\hbar} \int_{x_*}^x p_-(x) dx. \end{aligned} \quad (262)$$

(259) と (262) を次のように表すと、その意味がわかりやすくなる。

$$\frac{S_+(x)}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \int_{C_1} p dx, \quad \frac{S_-(x)}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \int_{C_2} p dx - \pi. \quad (263)$$

ただし、 C_1 は寄り道せずに x_0 から x_* へ移動する経路、 C_2 は x_0 から出発して一旦古典回帰点 x_* に行き、 x まで戻る経路である。(図 25) 積分はそれぞれの経

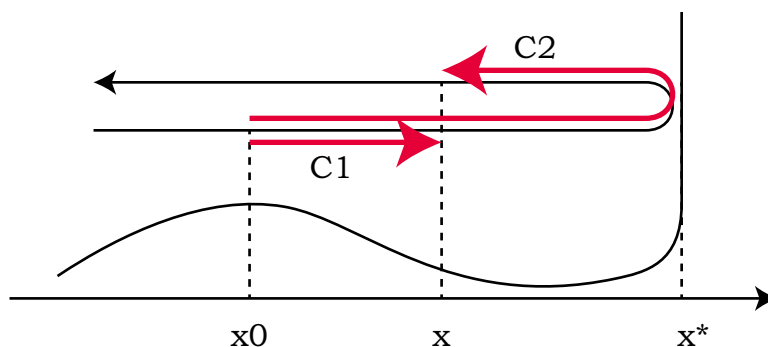


図 25: 半古典近似の波動関数に寄与する古典的経路

路に沿って行い、 p の符号は運動の向きに従って選ぶ。 $S_-(x)$ の式にある $-\pi$ という寄与は、古典回帰点における反射の際の位相のずれとみなすことができる。

一般には、波動関数は次のように与えられる。

$$\psi(x) = \sum_C \exp\left(\frac{i}{\hbar}S_C(x)\right) \quad (264)$$

ただし、 C は基準点 x_0 を x をつなぐ運動を表す経路であり、 $S_C(x)$ はそれぞれの経路ごとに次のように与えられる関数である。

$$\frac{S(x)}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \int_C p dx - \Delta_C \quad (265)$$

ただし Δ_C は古典回帰点における位相のずれである。複数回古典回帰点で跳ね返った場合には、それら全てに関する位相のずれを加える必要がある。ここでは近似的に固定端条件を用いたために $\Delta = \pi$ であったが、一般には $\Delta = \pi$ とは限らない。たとえば、 $E - U(x)$ が連続的に正から負に転じるような古典回帰点においては

$$\Delta = \frac{\pi}{2} \quad (266)$$

であることが知られている。