

第8回：11月25日（金）

前回、ハミルトニアン演算子がエルミートであれば、確率密度 $\rho = |\psi|^2$ を x 軸上全体で積分することによって得られる全確率は保存すること、すなわち時間に依存しないことを見た。これは、ある場所で ρ が減少すれば、別の場所ではその分だけ ρ が増加していることを意味する。たとえば、 $x = x_0$ で x 軸を二つの部分に分けると、 $x \leq x_0$ における減少分と $x_0 \leq x$ における増加分は一致する。

$$-\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{x_0} \rho dx = \frac{d}{dt} \int_{x_0}^{\infty} \rho dx \quad (312)$$

この両辺の値は、単位時間の中に $x = x_0$ を通して左から右へ移行する確率の量を表している。これを確率の流れという。ここでは J によって確率の流れを表すことにしよう。つまり、 J は次のように定義することができる。

$$J(x, t) = -\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^x \rho(x', t) dx' \quad (313)$$

この両辺を x で微分すると、次の式を得る。

$$\frac{\partial}{\partial x} J(x, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t). \quad (314)$$

これは確率に対する連続の式と呼ばれる。（同様の式は、保存量一般に対して成り立つ。たとえば、 ρ と J を電荷密度と電流とすれば、連続の式 (314) は電荷の保存を表す。）定常状態においては、(314) の右辺は 0 になり、 $\partial_x J = 0$ を得るから、確率の流れは位置によらない。

確率密度 ρ は波動関数を用いて $\rho = |\psi|^2$ と表されている。同様に、確率の流れ J も波動関数の二次形式として与えることができる。 J の表式を得るために、定義式 (313) を時間に依存するシュレーディンガー方程式を用いて変形してみよう。

$$\begin{aligned} J &= -\int_{-\infty}^x \frac{\partial \rho}{\partial t} dx \\ &= -\int_{-\infty}^x \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right) dx \\ &= -\int_{-\infty}^x \left[\psi^* \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U \right) - \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + U \right) \psi \right] dx \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^x \left(\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \psi \right) dx \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^x \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right) dx. \end{aligned} \quad (315)$$

二行目から三行目への変形では時間に依存するシュレーディンガー方程式を用いた。最後の式は微分の積分であるから積分を実行できる。 $x = -\infty$ において波動

関数が 0 になることを仮定すれば、確率の流れを波動関数によって表した次の式を得る。

$$J = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right). \quad (316)$$

波動関数の規格化に関する補足

ここまでは、波動関数は一つの粒子の運動を表すものと仮定し、 $\rho = |\psi|^2$ はその一つの粒子の存在確率密度を表すものと解釈してきた。しかし、実験を行う際にはしばしば同じような運動をする複数の粒子を同時に扱う。たとえば、二重スリットの実験において、同じ運動量を持つ電子を次々にスリットに向けて打ち出す場合には、複数の電子が全て同じ波動関数によって表される。このような場合、波動関数の規格化を変更し、 $\rho = |\psi|^2$ がある点における粒子の密度の期待値を表すように取るのが便利である。(全体の粒子の個数が 1 である場合には、ある点での粒子の密度の期待値は粒子の存在確率密度にほかならない。) この規格化法は、無限に広い領域に無限個の粒子が存在し、その密度が 0 でないある有限の値を取るような場合に特に便利である。この規格化法を採用した場合、 J は単位時間にある点を通る粒子の個数の期待値になる。複数の粒子をこのように取り扱うことができるのは、粒子が互いに影響を与えず、しかも全て同じ運動をしている場合だけであることを注意しておく。補足終わり

いくつかの具体的な例で流れ J を求めておこう。

例題 9.1 確定した運動量 p を持つ状態 $\psi = Ae^{ipx/\hbar}$ に対して確率の流れ J を求めよ。

波動関数を (316) に代入すれば直ちに次の結果を得る。

$$J = -\frac{i\hbar}{2m} \left(i\frac{p}{\hbar}|A|^2 + i\frac{p}{\hbar}|A|^2 \right) = \frac{p}{m}|A|^2 = v\rho \quad (317)$$

ただし、最後の等号で確率密度が $\rho = |A|^2$ であり粒子の速度が $v = p/m$ であることを用いた。この場合、流れが密度と速度の積になっているが、これは電流が電荷密度と電荷の速度の積になることと同様である。

例題 9.2 波動関数 ψ が実関数 ($\psi = \psi^*$) であるとき、 J を求めよ。

波動関数が実関数になるという状況は、たとえば束縛状態において実現される。流れの式 (316) において $\psi^* = \psi$ を用いれば、流れが 0 となるのがわかる。

$$J = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi\psi' - \psi'\psi) = 0. \quad (318)$$

これは、束縛状態のような往復運動については、粒子がある点を右から左へ横切る確率と左から右に横切る確率が一致し、それらが打ち消しあうためである。

例題 9.3 運動量の異なる二つの単色波の重ね合わせ

$$\psi = Ae^{ipx/\hbar} + Be^{ip'x/\hbar} \quad (319)$$

に対して確率の流れを求めよ。

流れの式 (316) に波動関数を代入して整理すれば、次の結果を得る。

$$J = \frac{p}{m}|A|^2 + \frac{p'}{m}|B|^2 + \frac{p+p'}{m} \operatorname{Re} \left(B^* A e^{i(p-p')x/\hbar} \right) \quad (320)$$

第1項は運動量 p の単色波に対する流れ、第2項は運動量 p' の単色波に対する流れである。第3項は二つの波の干渉によって現れる項である。このように、波動関数が二つの波動関数の和で与えられたとしても、一般には確率の流れは重ねあわされたそれぞれの波動関数に対する流れの和にはならない。(これは確率密度 $\rho = |\psi|^2$ に対しても同様である。)

ただし、特に重要な $p + p' = 0$ の場合、すなわち、大きさが等しく逆向きの運動量を持つ二つの単色波の重ね合わせ

$$\psi = Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar} \quad (321)$$

の場合にはこの干渉項が 0 になり、流れの密度はそれぞれの波の流れの密度の和となる。

$$J = \frac{p}{m}|A|^2 - \frac{p}{m}|B|^2. \quad (322)$$

9.2 反射率と透過率

遠方から飛んできた粒子が何かにぶつかり、その運動を変化させて再び遠方に飛び去るという状況は、力学の問題においてしばしば現れる。1次元の運動においては、飛んできた粒子が反転してもと来た方向に戻っていく場合と、そのまま反対側へ飛び去っていく場合が考えられる。量子力学においてはこれらの二つの場合がどのような確率で起こるかを計算することが重要な問題となる。

以下では、 $x = 0$ まわりにポテンシャルが変化する領域があり、そこへめがけて $x = +\infty$ から粒子を入射させ、その反射、透過について議論する。(図 31) 時間に

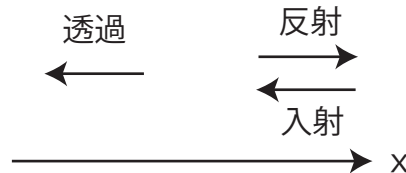


図 31: 入射、反射、透過

依存するシュレーディンガー方程式を用いることで、有限の幅を持つ波束が左側

から入射して壁によって跳ね返される様子を見ることができる。しかし、波束を用いた解析はやや複雑であるため後回しにし、ここでは確定したエネルギーを持つ、定常状態の波動関数を用いることでポテンシャルによる波の反射を調べよう。

$x = +\infty$ においてポテンシャルが 0 になるようにエネルギーの原点を取る。すると、 x が十分大きいところでの波動関数を次のように与えることができる。

$$\psi = Ae^{-ikx} + Be^{ikx}, \quad k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}. \quad (323)$$

第 1 項は左へ進む入射波、第 2 項は右へ進む反射波である。例題 9.3 で見たように、この波動関数についての確率の流れは入射波、反射波に対する流れを単純に足し合わせたものである。

$$J = J_{\text{入射}} + J_{\text{反射}}, \quad J_{\text{入射}} = -v|A|^2, \quad J_{\text{反射}} = v|B|^2, \quad v = \frac{\hbar k}{m}. \quad (324)$$

さらに、 $x \rightarrow -\infty$ においても確率の流れを計算し、それを $J_{\text{透過}}$ としよう。ここでは粒子を右側から入射させる状況を考えているので

$$J_{\text{入射}} < 0, \quad J_{\text{反射}} \geq 0, \quad J_{\text{透過}} \leq 0 \quad (325)$$

である。これらの流れの比として反射率、透過率を以下のように定義する。

$$\text{反射率} = -\frac{J_{\text{反射}}}{J_{\text{入射}}}, \quad \text{透過率} = \frac{J_{\text{透過}}}{J_{\text{入射}}}. \quad (326)$$

(314) の下で述べたように、定常状態においては確率の流れは x 座標に依存しないから、 $x \rightarrow +\infty$ における流れ $J_{\text{入射}} + J_{\text{反射}}$ と $x \rightarrow -\infty$ における流れ $J_{\text{透過}}$ は一致するはずである。このことから、次の関係式が成り立つ。

$$\text{反射率} + \text{透過率} = 1. \quad (327)$$

$x \rightarrow +\infty$ における波動関数が (324) で与えられている場合、反射率は次のように与えられる。

$$\text{反射率} = \frac{|B|^2}{|A|^2}. \quad (328)$$

エネルギーの保存則より入射粒子と反射粒子の速さは同じであるから、流れに含まれる速さの因子は分子と分母で相殺する。透過波に対しては $U(+\infty) = U(-\infty)$ でない限りそうはならないので注意が必要である。

もっとも簡単な例として、図 32 のように $x \geq 0$ において $U(x) = 0$, $x \leq 0$ において $U(x) = +\infty$ であるようなポテンシャルの壁に対して左 (x 軸の正の側) から粒子を入射させることを考えよう。 $x \geq 0$ においては、シュレーディンガー方程式の解は

$$\psi = Ae^{-ikx} + Be^{ikx}, \quad k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} \quad (329)$$

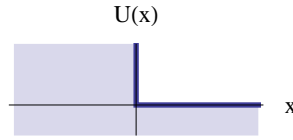


図 32: ポテンシャルの壁

である。固定端条件 $\psi(0) = 0$ より入射波と反射波の係数の間の関係

$$A + B = 0 \quad (330)$$

が得られる。これより、

$$\text{反射率} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1 \quad (331)$$

が得られる。つまり、ここで考えているようなポテンシャルの場合には、古典的運動と同様に、量子力学的にも粒子は完全に反射される。

次に、ポテンシャルの壁の高さが有限の場合を考えてみよう。(図 33)

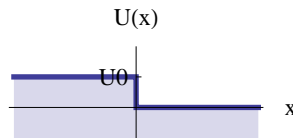


図 33: 階段型ポテンシャル

$$U(x) = U_0 \quad (x \leq 0), \quad U(x) = 0 \quad (x \geq 0). \quad (332)$$

まず、 $0 < E < U_0$ の場合を見てみよう。古典的には粒子は $x \geq 0$ の領域のみを運動することができ、入射した粒子は全て反射される。

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}, \quad b = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \quad (333)$$

によって k と b を定義すればシュレーディンガー方程式の解は

$$\begin{aligned} x \geq 0 & \quad \psi = Ae^{-ikx} + Be^{ikx}, \\ x \leq 0 & \quad \psi = Ce^{bx}. \end{aligned} \quad (334)$$

である。($x \leq 0$ における解には $x \rightarrow -\infty$ で発散しないという条件を課した。) ψ が $x = 0$ で連続であることから、

$$A + B = C \quad (335)$$

が得られる。また、 ψ' が $x = 0$ で連続であることから

$$ik(A - B) = -bC \quad (336)$$

が得られる。これら二つの式から C を消去することにより

$$\frac{B}{A} = \frac{k - ib}{k + ib} \quad (337)$$

が得られる。この両辺の絶対値を取り二乗すれば、

$$\text{反射率} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1 \quad (338)$$

が得られる。つまり、粒子は古典的な場合と同様に完全反射する。確率の保存より透過率はこのとき 0 になるはずであるが、これは $x < 0$ における波動関数が（係数の位相を適当に選べば）実であり、流れが 0 であることからわかる。ただし $x < 0$ において流れが 0 であるとはいっても、粒子の存在確率は 0 にはなっていないことに注意しよう。（図 34）このような、波動関数の「染み出し」は量子力学の特徴的な現象であり、このあとに述べるトンネル効果が起こる原因となる。

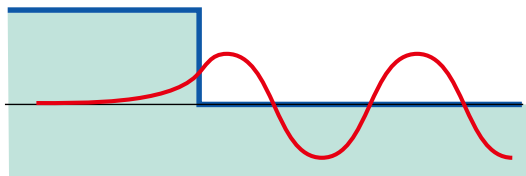


図 34: 有限の高さのポテンシャルの壁による反射を表す波動関数

今度は、粒子がポテンシャルの壁を越えるのに十分なエネルギーを持つ場合、すなわち $E > U_0$ である場合を考えてみよう。（ E は正であることを仮定するが、 U_0 は正でも負でもよい。）この場合、古典的には、右側から粒子を入射させると、 $x = 0$ において速度が変化するものの、そのまま $x \rightarrow -\infty$ へと運動を続ける。

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}, \quad k' = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_0)} \quad (339)$$

によって k と k' を定義する。形式的には、先ほどの b を $-ik'$ で置き換えたと思ってもよい。シュレーディンガー方程式の解は

$$\begin{aligned} x \geq 0 & \quad \psi = Ae^{-ikx} + Be^{ikx}, \\ x \leq 0 & \quad \psi = Ce^{-ik'x}. \end{aligned} \quad (340)$$

である。右から粒子を入射させることを考えているので、 $x \leq 0$ においては左向きに進む波だけが存在することを仮定した。

ψ および ψ' が $x = 0$ で連続でなければならないことから次の二つの式を得る。

$$A + B = C, \quad k(A - B) = k'C. \quad (341)$$

これら二つの式から C を消去することにより、次の式が得られる。

$$\frac{B}{A} = \frac{k - k'}{k + k'}. \quad (342)$$

従って、反射率は

$$\text{反射率} = \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right)^2 \quad (343)$$

となる。これは 0 と 1 の間の実数である。

エネルギー E を一定に保ちつつ U_0 を変化させたときの反射率のグラフを図 35 に与える。 $U_0 \geq E$ では完全反射であり、 $U_0 = 0$ では (何もないのと同じである

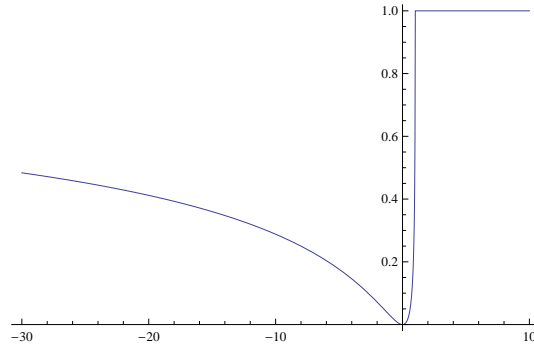


図 35: 反射率。横軸は U_0/E 、縦軸は反射率である。

から) 反射率は 0 となる。面白いのは $U_0 < 0$ であっても粒子はある確率で反射されるということである。 $U_0 \rightarrow -\infty$ の極限では反射率は限りなく 1 に近づく。

透過率は (327) を用いれば直ちに求まる。

$$\text{透過率} = 1 - \text{反射率} = \frac{4kk'}{(k + k')^2} \quad (344)$$

念のため、(326) の定義に従って計算しても同じ結果を得ることを確認しておこう。(335) と (336) より次の式が得られる。

$$\frac{C}{A} = \frac{2k}{k + k'}. \quad (345)$$

これより透過率は

$$\text{透過率} = \frac{k'|C|^2}{k|A|^2} = \frac{4kk'}{(k + k')^2} \quad (346)$$

となり (344) に一致する。入射粒子と透過粒子の速さが異なるので k'/k の因子を忘れてはならない。

9.3 トンネル効果

今度は図 36 のような箱形ポテンシャル

$$U(x) = 0 \quad (x \leq -a), \quad U(x) = U_0 \quad (-a \leq x \leq 0), \quad U(x) = 0 \quad (0 \leq x). \quad (347)$$

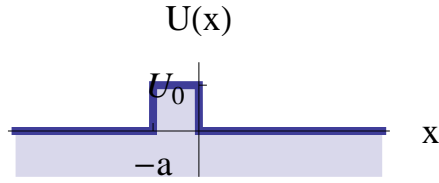


図 36: 箱形のポテンシャル障壁

に対して粒子を右側から入射させよう。粒子のエネルギーはポテンシャル障壁よりも低く $0 < E < U_0$ であるとする。このとき古典的には粒子はポテンシャルの壁を超えることはできないが、量子論的には以前に述べた波動関数の染み出しによって、粒子が壁を通り抜ける可能性が 0 ではない。

いつものように

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}, \quad b = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \quad (348)$$

によって k と b を定義しておく。それぞれの領域においてシュレーディンガー方程式の解は

$$\begin{aligned} (0 < x) \quad \psi &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \\ (-a < x < 0) \quad \psi &= Ce^{bx} + De^{-bx}, \\ (x < -a) \quad \psi &= Ee^{ikx}. \end{aligned} \quad (349)$$

となる。ただし、右側から粒子を入射させる状況を想定し、 $x < -a$ の領域では左側に進む粒子のみが存在するとした。

$x = 0$ で ψ および ψ' が連続であることより

$$A + B = C + D, \quad ik(A - B) = b(C - D) \quad (350)$$

が、 $x = -a$ で ψ および ψ' が連続であることより

$$Ce^{ba} + De^{-ba} = Ee^{ika}, \quad b(Ce^{ba} - De^{-ba}) = ikEe^{ika} \quad (351)$$

が得られる。5 つの係数 A, B, C, D, E に対して 4 つの関係式が得られたから、ある一つの係数を用いてそれ以外の係数を表すことができる。ここでは E を用いて他の係数を与えておく。

$$\begin{aligned} A &= e^{ika} \left[\cosh(ba) + i \frac{b^2 - k^2}{2bk} \sinh(ba) \right] E, \\ B &= -i \frac{b^2 + k^2}{2bk} e^{ika} \sinh(ba) E, \\ C &= \frac{b + ik}{2b} e^{ika - ba} E, \\ D &= \frac{b - ik}{2b} e^{ika + ba} E. \end{aligned} \quad (352)$$

ただし、 \sinh と \cosh は双曲線関数

$$\sinh z = \frac{e^z - e^{-z}}{2}, \quad \cosh z = \frac{e^z + e^{-z}}{2} \quad (353)$$

である。透過率は

$$\text{透過率} = \frac{|E|^2}{|A|^2} = \left[1 + \left(\frac{b^2 + k^2}{2bk} \right)^2 \sinh^2(ba) \right]^{-1}. \quad (354)$$

となる。これは 0 と 1 の間の実数である。

このように、エネルギーよりも高いポテンシャル障壁があったとしても、その厚さおよび高さが有限であれば、0 でない確率で粒子が通り抜けることができる。この現象はトンネル効果と呼ばれ、量子力学におけるもっとも重要な現象である。

上で計算した透過率の式 (354) は多少複雑である。ポテンシャルの厚さ a と、エネルギー E から測った高さ $E - U_0$ が大きいときには、透過率は非常に小さくなるが、そのような場合には $ba \gg 1$ であるから、近似的に次のように与えられる。

$$\text{透過率} \sim e^{-2ba}. \quad (355)$$

(指数関数の因子が非常に大きいので、それ以外の因子は無視した。) これより、粒子が壁をある程度の確率で通り抜けるためには、壁の厚さが $1/b$ 程度以下でなければならないことを示している。

このことは、不確定性原理を用いて以下のように説明することもできる。粒子がポテンシャル障壁を超えるためには、粒子のエネルギーは一時的に U_0 よりも大きくなる必要がある。ここでは粒子がポテンシャルを越える際にはもともとのエネルギー E から ΔE だけ高いエネルギーを持っており $E + \Delta E > U_0$ であるとす。このときの粒子の速さは

$$v = \sqrt{\frac{2}{m}(E + \Delta E - U_0)} \quad (356)$$

と与えられる。粒子のエネルギーが E から $E + \Delta E$ に変化したとすれば、これはエネルギー保存則を破っているように見える。しかしもしこの変化が短時間 Δt の間だけ起こり、不確定性原理によって決まるエネルギーの不確定性 $\sim \hbar/\Delta t$ よりも小さければ ΔE は誤差の範囲であるから、エネルギー保存則を破っているとは言えない。このことから、エネルギーの変化 ΔE が許される時間は

$$\Delta t \sim \frac{\hbar}{\Delta E} \quad (357)$$

である。(356) と (357) の積を取れば、粒子が進むことのできる距離が

$$v\Delta t \sim \sqrt{\frac{2}{m}(\Delta E - (U_0 - E))} \frac{\hbar}{\Delta E} \quad (358)$$

これは ΔE に依存する関数であるが、 $\Delta E = 2(U_0 - E)$ の時に最大値をとり、その値は $1/b$ である。つまり、トンネル効果によって超えることのできる壁の厚さは $1/b$ 程度である。これはシュレーディンガー方程式を解くことによって得られた結果に一致している。(ここで述べたような不確定性原理を用いた説明は、あくまでも理解を助けるための補助的なものとみなすべきである。このような解釈に頼ることなくシュレーディンガー方程式を用いた導出ができるようになることが大切である。)