

## 9.4 ガモフの透過因子

§9.3において、箱型ポテンシャルに対してトンネル効果が起こる確率（透過率）をシュレーディンガー方程式を解くことによって求めた。その結果、透過率は近似的に

$$\text{透過率} = e^{-2ba}, \quad b = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \quad (359)$$

と与えられることを見た。ただし  $U_0$  はポテンシャル障壁の高さ、 $E$  は粒子のエネルギーであり、 $a$  はポテンシャル障壁の厚さである。トンネル効果はさまざまな状況において現れ、一般にはポテンシャルの形は箱型ではない。そのような場合にも適用できる近似公式を WKB 近似を用いて得ることができる。

WKB 近似による波動関数の式 (264) は、ある点  $x$  における波動関数を、ある基準点  $x_0$  からその点  $x$  に至る古典的運動からの寄与の和として波動関数を与えるものであり、それぞれの古典的運動からの寄与は次のように与えられた。

$$\psi_C = \exp \frac{i}{\hbar} \int_C p dx, \quad p(x) = \pm \sqrt{2m(E - U(x))}. \quad (360)$$

積分は古典的運動の経路  $C$  に沿って行う。ここではおおまかな見積もりを行うだけなので、古典回帰点における位相のずれを無視した。この近似式の導出を振り返ってみると、 $p(x) = 0$  によって与えられる古典回帰点を除けば、 $p(x)$  が純虚数になる領域、すなわち  $E < U(x)$  である領域においても近似が良いことがわかる。そこで、壁を通り抜けるような粒子の経路に対してこの近似式を適用し、透過率を計算することを考えよう。ここでは図 37 のようなポテンシャル障壁に粒子が右側から入射し、左側に通る過程を考えることにする。ポテンシャル障壁の

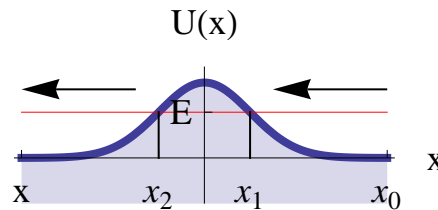


図 37: ポテンシャル障壁

右側に基準点  $x_0$  をとる。障壁の左側の点  $x$  における波動関数は次のように与えられる。

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \exp \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p_- dx \\ &= \left( \exp \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} p_- dx \right) \left( \exp \frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p_- dx \right) \left( \exp \frac{i}{\hbar} \int_{x_2}^x p_- dx \right) \quad (361) \end{aligned}$$

ただし関数  $p_-(x)$  は、それが実数になる領域では運動が右から左であることに対応して負の平方根として定義されている。

$$p_-(x) = -\sqrt{2m(E - U(x))}. \quad (362)$$

二つの古典回帰点  $x_1$  と  $x_2$  によって分けられる 3 つの領域に対応して積分を 3 つに分けた。透過率を計算するには波動関数の絶対値の大きさが問題であるが、3 つの因子のうち、最初と最後の因子、すなわち古典的運動が許される領域の寄与は、波動関数の位相にしか寄与しない。絶対値に影響を与えるのは、二番目の因子だけである。この因子中の  $p_-(x)$  は純虚数になり、符号の取り方に不定性がある。この符号を決めるために、透過波の振幅が入射波の振幅よりも小さいという条件を用いよう。そうすると、(361) の二番目の因子は

$$\exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^{x_1} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx\right) \quad (363)$$

となる。(符号が見やすいように積分の両端を入れ替えた。) これが入射波と透過波の波動関数の絶対値の比を与えるから、透過率は次のようになる。

$$\text{透過率} = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_2}^{x_1} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx\right) \quad (364)$$

これはガモフの透過因子と呼ばれる。(ポテンシャル障壁の左右で粒子の速さが違う場合に透過率を計算する場合には粒子の存在確率の比と流れの比は異なるが、ここでは (364) の因子が指数関数的に小さいような場合を近似的に考えているので、そのようなオーダー 1 の因子は無視した。) ポテンシャル障壁の高さが一定値  $U(x) = U_0$  を取る場合には、透過因子 (364) は (359) を再現する。

補足：WKB 近似の次のオーダー

WKB 近似は波動関数の位相を

$$\psi = \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right), \quad S = S^{(0)} + \hbar S^{(1)} + \hbar^2 S^{(2)} + \dots \quad (365)$$

のようにプランク定数によってべき展開し、オーダーごとに関数決めていく方法である。ここまでは  $S^{(1)}$  以降を全て無視し、 $S = S^{(0)}$  であるとして近似を行ってきた。もし  $S^{(1)}$  までを考慮すると何が得られるかを見ておこう。 $\psi = e^{iS/\hbar}$  を時間に依存しないシュレーディンガー方程式に代入すると、次の式を得る。

$$\frac{1}{2m} \left[ \left( \frac{dS}{dx} \right)^2 - i\hbar \frac{d^2 S}{dx^2} \right] + U(x) = E. \quad (366)$$

((247) の右辺を  $E$  で置き換えたものである。) この段階では何の近似も行っていない。ここに (365) にある  $S$  の展開式を代入し、 $\hbar$  の次数ごとに整理しよう。まず、 $\hbar^0$  は次のハミルトン・ヤコビ方程式を与えることは以前に見たとおりである。

$$\frac{1}{2m} \left( \frac{dS^{(0)}}{dx} \right)^2 + U(x) = E. \quad (367)$$

この解は

$$\frac{dS^{(0)}}{dx} = p(x) \quad (368)$$

を積分することによって得られた。 $p(x)$  は点  $x$  における古典的運動量である。これまでは無視していた  $\hbar^1$  のオーダーの式はどのようなかという、

$$2\frac{dS^{(0)}}{dx}\frac{dS^{(1)}}{dx} - i\frac{d^2S^{(0)}}{dx^2} = 0. \quad (369)$$

となる。これは次のように変形することができる。

$$\frac{dS^{(1)}}{dx} = \frac{i}{2}\frac{d^2S^{(0)}}{dx^2} \bigg/ \frac{dS^{(0)}}{dx} = \frac{i}{2}\frac{d}{dx}\log\frac{dS^{(0)}}{dx} = \frac{i}{2}\frac{d}{dx}\log p(x). \quad (370)$$

最後の等号で (368) を用いた。両辺を積分すると、

$$S^{(1)} = \frac{i}{2}\log p(x) + \text{const.} \quad (371)$$

この項まで考慮して波動関数を書いてみると、

$$\psi = \exp\frac{i}{\hbar}(S^{(0)} + \hbar S^{(1)}) = \text{const}\frac{1}{p(x)^{1/2}}\exp\frac{i}{\hbar}S^{(0)} \quad (372)$$

が得られる。 $S^{(1)}$  の影響は  $p(x)^{-1/2}$  という因子に現れている。これは、粒子の存在確率密度が粒子の速度に反比例することを表している。

補足終わり

## 9.5 散乱行列

トンネル効果に関する現象を調べるためには、ポテンシャル障壁による散乱、透過の情報をまとめた散乱行列を定義するのが便利である。散乱行列は透過率、反射率を含む、ポテンシャル障壁に対する完全な情報を与える。

$|x|$  が大きいところでは 0 になるようなポテンシャルによる散乱を考える。この

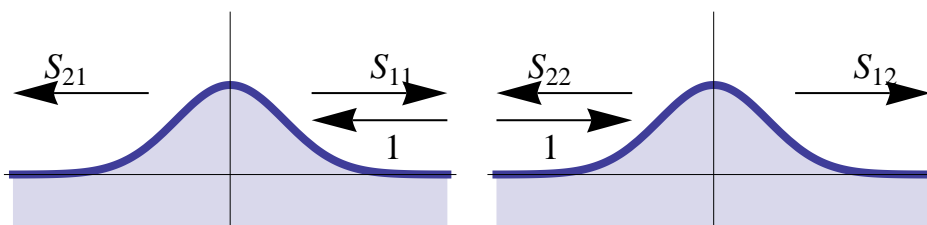


図 38: 1 次元の散乱

ポテンシャルに対して粒子を入射させよう。右からの入射と左からの入射の二つ

の場合が考えられる。 $x = +\infty$  から粒子を入射させたとき (図 38 左) の波動関数を次のように置こう。

$$\begin{aligned}\psi_1 &= e^{-ikx} + S_{11}e^{ikx} \quad (x < 0), \\ \psi_2 &= S_{21}e^{-ikx} \quad (x > 0)\end{aligned}\quad (373)$$

ただし、 $x > 0$  の側を領域 1、 $x < 0$  の側を領域 2 と名付け、それぞれの領域での波動関数を  $\psi_1$  および  $\psi_2$  と表した。入射波の係数が 1 になるような規格化を採用し、領域 1 から領域 2 への透過を表わす項の係数を  $S_{21}$ 、領域 1 から領域 1 への反射を表わす項の係数を  $S_{11}$  と表わした。以下では  $S_{fi}$  は領域  $i$  から入射した粒子がポテンシャルによって散乱されて領域  $f$  に出て行く過程に対応した係数を表すことにする、この場合の透過率は  $|S_{21}|^2$ 、反射率は  $|S_{11}|^2$  である。

同様に、領域 2、すなわち  $x = -\infty$  から粒子を入射させたとき (図 38 右) の波動関数は

$$\begin{aligned}\psi_1 &= S_{12}e^{ikx} \quad (x > 0), \\ \psi_2 &= e^{ikx} + S_{22}e^{-ikx} \quad (x < 0)\end{aligned}\quad (374)$$

のように置くことができる。今度は透過率が  $|S_{21}|^2$ 、反射率が  $|S_{22}|^2$  である、それぞれの過程の確率の保存より

$$|S_{11}|^2 + |S_{21}|^2 = 1, \quad |S_{12}|^2 + |S_{22}|^2 = 1 \quad (375)$$

が成り立つはずである。

実は、シュレーディンガー方程式の線形性を用いると、係数  $S_{fi}$  に対するより強い条件を得ることができる。(373) と (374) はどちらも同じシュレーディンガー方程式の解であるから、それらの任意の線形結合もやはり解になっているはずである。二つの解を係数  $a$  と  $b$  で重ね合わせたものは

$$\begin{aligned}\psi_1 &= ae^{-ikx} + ce^{ikx} \quad (x > 0), \\ \psi_2 &= be^{ikx} + de^{-ikx} \quad (x < 0).\end{aligned}\quad (376)$$

ただし、 $c$  と  $d$  は次のように与えられる。

$$c = aS_{11} + bS_{12}, \quad d = aS_{21} + bS_{22}.\quad (377)$$

これは図 39 のような状況を表している。入射波の係数が  $a$  と  $b$ 、散乱波の係数が  $c$  と  $d$  であるから、確率の保存より次の関係が成り立っていないなければならない。

$$|a|^2 + |b|^2 = |c|^2 + |d|^2.\quad (378)$$

これが任意の  $a$  と  $b$  に対して成り立っていないという条件より、係数  $S_{fi}$  に対するいくつかの条件を得ることができる。

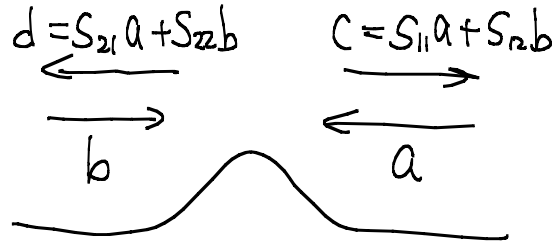


図 39: 一般の散乱

散乱行列 (scattering matrix) を次のように定義しておくのが便利である。

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \quad (379)$$

係数  $a$  と  $b$  も次のように行列表示しておく。

$$u = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \quad (380)$$

これらを用いて (378) を書き換えると、次のようになる。

$$u^\dagger u = u^\dagger S^\dagger S u. \quad (381)$$

これが任意の  $u$  で成り立たなければならないので、行列  $S$  が満足すべき条件は

$$S^\dagger S = \mathbf{1}_2 \quad (382)$$

である。すなわち行列  $S$  はユニタリーでなければならない。この条件を成分を用いて書くと、

$$S^\dagger S = \begin{pmatrix} |S_{11}|^2 + |S_{21}|^2 & S_{11}^* S_{12} + S_{21}^* S_{22} \\ S_{12}^* S_{11} + S_{22}^* S_{21} & |S_{21}|^2 + |S_{22}|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (383)$$

となる。1-1 成分と 2-2 成分は確率保存の式 (375) を与えるが、1-2 成分と 2-1 成分は新たな条件

$$S_{11}^* S_{12} + S_{21}^* S_{22} = 0 \quad (384)$$

を与えている。

さらに、散乱行列に対する別の条件が時間に依存しないシュレーディンガー方程式が実であることから得られる。シュレーディンガー方程式が実であるというのは、ある波動関数  $\psi$  が解であればその複素共役  $\psi^*$  も解であることを意味する。波動関数 (376) は係数の間に次の関係が成り立てばシュレーディンガー方程式の解の漸近形となっている。

$$\begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (385)$$

複素共役演算を行ってみよう。すると、次の波動関数が得られる。

$$\begin{aligned}\psi_1 &= a^* e^{ikx} + c^* e^{-ikx} \quad (x > 0), \\ \psi_2 &= b^* e^{-ikx} + d^* e^{ikx} \quad (x < 0).\end{aligned}\tag{386}$$

これは、係数  $(c^*, d^*)$  を持つ入射波が、係数  $(a^*, b^*)$  を持つ散乱波になる様子を表している。これもやはりシュレーディンガー方程式の解であるから、次の式が成り立つはずである。

$$\begin{pmatrix} a^* \\ b^* \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} c^* \\ d^* \end{pmatrix}\tag{387}$$

(385) の複素共役をとり、(387) に代入すると、

$$\begin{pmatrix} a^* \\ b^* \end{pmatrix} = SS^* \begin{pmatrix} a^* \\ b^* \end{pmatrix}\tag{388}$$

となる。従って  $SS^* = \mathbf{1}_2$  でなければならない。さらに  $S$  はユニタリーであり  $SS^\dagger = \mathbf{1}_2$  であることも考慮すると、 $S$  に対する次の条件が得られる。

$$S^T = S.\tag{389}$$

つまり、 $S$  は対称行列であり、 $S_{12} = S_{21}$  が成り立つ。これは  $S$  行列に対する相反定理と呼ばれるものである。相反定理より、左右から粒子を入射させた際の透過確率は等しい。

$$|S_{12}|^2 = |S_{21}|^2\tag{390}$$

これと確率の保存（あるいはユニタリー条件）を用いれば、反射確率に対しても、同様の式が成り立つ。

$$|S_{11}|^2 = |S_{22}|^2\tag{391}$$

従って、どちらかの向きの粒子だけを通過させるような一方通行のポテンシャル障壁は存在しない。

**例題 9.4** 次の  $\delta$  関数型ポテンシャルによる散乱行列を具体的に計算し、ユニタリー性、および相反定理の成立を確認せよ。

$$U(x) = Z\delta(x)\tag{392}$$

$E > 0$  と仮定し、 $k$  を次のように定義する。

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}.\tag{393}$$

領域 1 と 2 での波動関数は次のように置くことができる。

$$\begin{aligned}\psi_1 &= ae^{-ikx} + ce^{ikx}, \\ \psi_2 &= be^{ikx} + de^{-ikx}.\end{aligned}\tag{394}$$

$x = 0$  における接続条件は、 $\psi_1(0) = \psi_2(0)$  であり、係数の間の次の関係式が得られる。

$$a + c = b + d. \quad (395)$$

波動関数の微分については、§5.4 で行ったように、シュレーディンガー方程式を原点を含む微小区間で積分することで次の関係式が得られる。

$$\psi_1'(0) - \psi_2'(0) = 2q\psi(0), \quad q = \frac{mZ}{\hbar^2}. \quad (396)$$

ここに (394) を代入することで

$$-ik(a - c) - ik(b - d) = 2q(a + c) \quad (397)$$

が得られる。(395) と (397) を  $c$  と  $d$  について解くと、

$$\begin{aligned} c &= \frac{q}{ik - q}a + \frac{ik}{ik - q}b, \\ d &= \frac{ik}{ik - q}a + \frac{q}{ik - q}b. \end{aligned} \quad (398)$$

散乱行列はこの関係式の右辺に現れる係数行列に他ならない。すなわち

$$S = \begin{pmatrix} \frac{q}{ik - q} & \frac{ik}{ik - q} \\ \frac{ik}{ik - q} & \frac{q}{ik - q} \end{pmatrix} \quad (399)$$

が得られる。これは対称行列であり、相反定理が確かに満足されている。この行列がユニタリーであることも、すぐに確かめることができる。

## 10 波束の散乱

### 10.1 古典的散乱

散乱実験は、物質の構造を知る最も基本的な手段である。「見る」ということ自体が光子を用いた散乱実験の一種である。ここでは 1 次元の散乱問題として、粒子の反射を用いてポテンシャルの形状についての情報を得ることを考えよう。

無限に広がった単色波  $\psi \sim \pm e^{ikx}$  の散乱によって透過率、反射率を計算する方法についてはすでに調べた。この節では、波束が時間とともにポテンシャル障壁に近づいていき、それが跳ね返されたり透過したりする様子を波動関数を用いてどのように表すかということに焦点をあてて調べる。

問題を簡単にするために、ポテンシャルの形状に対して次の仮定を置く。

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} U(x) = 0, \quad \lim_{x \rightarrow -\infty} U(x) = +\infty. \quad (400)$$

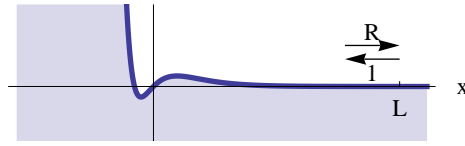


図 40: ポテンシャルの壁による波の反射

つまり、前節まで考えていたポテンシャル障壁が無限に高くなり、右からの粒子に対する反射率が1である場合を考える。このポテンシャルに  $x$  の正の側から粒子を入射させ、反射してきた粒子を調べることでポテンシャルに対する情報を得たい。

まず、古典的な場合を考えよう。 $x = x_0$  から質量  $m$  の粒子を速度  $-v$  で打ち出し、同じところに戻ってきた粒子を検出する。 $x_0$  は十分大きく、 $x = x_0$  付近では  $U(x) = 0$  であるとする。エネルギー保存則より反射波のエネルギーは入射波と同じであり、エネルギーや運動量を測っても情報は得られない。ポテンシャルの情報を得るには、粒子を打ち出してから戻ってくるまでの時間  $T$  を計るのが有効である。

ポテンシャルが単純な壁であり、

$$U(x) = 0 \quad (x > a), \quad U(x) = \infty \quad (x < a) \quad (401)$$

であると仮定すると、粒子が跳ね返って戻ってくるまでの時間は、その道のりを

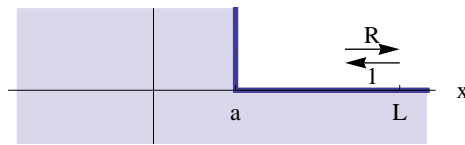


図 41: 垂直な壁

速さで割ることで得られる。

$$T = \frac{2}{v}(x_0 - a). \quad (402)$$

ここでは壁の位置を知るために時間  $T$  を計測することを考えているから、これを  $a$  について解けば、

$$a = x_0 - \frac{v}{2}T \quad (403)$$

が得られる。これが、時間  $T$  の測定結果から壁の位置情報  $a$  を得るための式である。

一般には跳ね返ってくるまでの時間は粒子の初速に依存する。一般のポテンシャルについても、粒子の反射がどのあたりで起こったかの目安として次の関数を定義しよう。

$$w_{cl}(v) = \frac{v}{2}T(v) - x_0. \quad (404)$$



(古典論で計算した量で表わすために“cl”をつけた。)あとで都合のいいように、(403)とは逆符号で定義した。これは、原点を基準として粒子がどれくらい奥まで侵入できたかを表す量であり、先ほどの単純な例の場合には  $w_{cl}(v) = -a$  である。

もう少し複雑なポテンシャルについて  $w_{cl}(v)$  を計算してみよう。ポテンシャルが調和振動子ポテンシャルを半分にしたような形の場合を考えてみよう。

$$U(x) = 0 \quad (x > 0), \quad U(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2 \quad (x < 0) \quad (405)$$

$\omega$  は調和振動子ポテンシャルの角振動数である。このとき、 $x \leq 0$  での折り返し

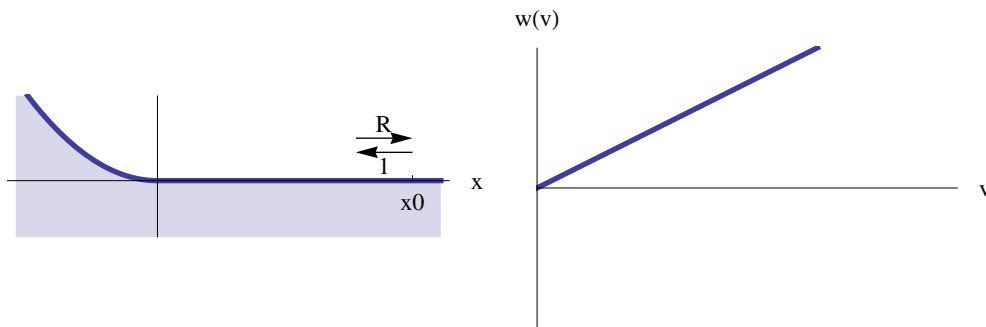


図 42: 半分の調和振動子ポテンシャルによる反射

にかかる時間は調和振動子の周期の半分  $\pi/\omega$  であるから、発射して戻るまでの時間は

$$T(v) = 2\frac{L}{v} + \frac{\pi}{\omega}. \quad (406)$$

ここから (404) の定義に従って関数  $w_{cl}(v)$  を求めると、

$$w_{cl}(v) = \frac{\pi v}{2\omega} \quad (407)$$

が得られる。この結果は、粒子の速さ  $v$  が大きいほど粒子が負の領域の奥まで侵入し、跳ね返るのに時間がかかることを意味している。(ただし、 $w_{cl}(v)$  がそのまま粒子の古典回帰点を表わしているわけではない。エネルギー保存則を用いて計算した古典回帰点は  $x = -v/\omega$  である。)

もう一つ重要な例を挙げておこう。図 43 左のように、垂直な壁の前に段差があるポテンシャルを考える。このときの関数  $w_{cl}(v)$  をグラフにしたものが右の図である。粒子が遅いときには粒子は段差を上ることができず、 $x = a$  において跳ね返るから、 $w_{cl}(v) = -a$  である。だんだん速くしていくと、エネルギーが階段の高さを超えたところで  $w_{cl}(v)$  が発散している。これは、粒子がほとんど静止した状態で段差の上を移動するために、戻ってくるまでに長い時間がかかるためである。この例からもわかるように、関数  $w_{cl}(v)$  の発散は、粒子がほぼ安定した状態でポテンシャル中に留まることができることを表している。

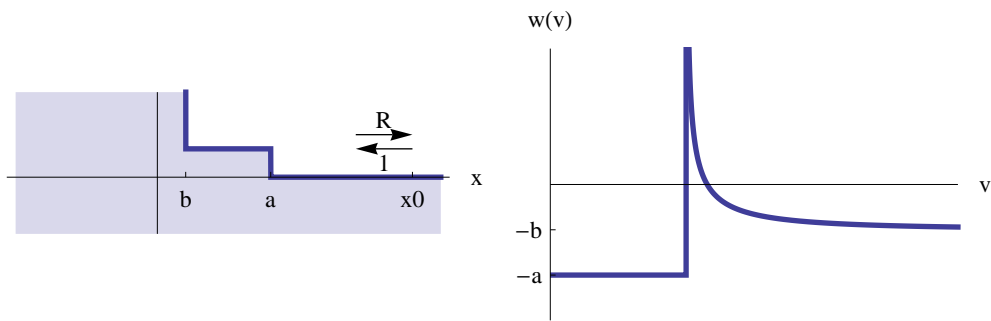


図 43: 段差のあるポテンシャル

これらの例からもわかるとおり、 $T$  を  $v$  の関数として測定し、関数  $w_{cl}(v)$  を計算すれば、ポテンシャルの形についての情報を得ることができる。次節では、この関数を波動関数の反射を用いて定義する方法について考える。