

第10回：12月9日（金）

10.2 位相のずれ

同じ問題を量子論的に扱ってみよう。「粒子が戻ってくるまでの時間」を定義するためには、広がり有限の波束を用いる必要があるが、まずは簡単な単色波の散乱を考える。先ほどと同様に、ポテンシャルが $x = a$ における垂直な壁である場合に $-a$ になるような関数を波動関数を用いて定義しよう。

$x \rightarrow \infty$ での波動関数の漸近形は

$$\psi(x) = e^{-ikx} + Re^{ikx} \quad (408)$$

とおくことができる。ここでは反射率が1の場合を考えているから、反射係数 R の絶対値は1である。従って、実数 δ を用いて次のように表わすことができる。

$$R = e^{2i\delta} \quad (409)$$

こうして定義される δ は位相のずれと呼ばれる。

$x = a$ にポテンシャルの壁がある場合を考えてみよう。このとき $x = a$ における固定端条件

$$0 = \psi(a) = e^{-ika} + e^{ika+2i\delta} = e^{-ika}(1 + e^{2ika+2i\delta}) \quad (410)$$

が成り立つから、 δ が次の式を満足する。

$$ka + \delta = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi \quad (n \in \mathbf{Z}) \quad (411)$$

(このように、位相のずれには π の定数倍の不定性がある。) この両辺を k で微分すると、

$$\frac{d\delta}{dk} = -a \quad (412)$$

が得られる。(この式には位相のずれの不定性は影響しない。) そこで、古典的に定義した関数 $w_{cl}(v)$ に対応して、一般のポテンシャルによる散乱の場合にも、関数

$$w_q(k) = \frac{d\delta}{dk} \quad (413)$$

を定義しよう。

これが、古典的な極限(波束に対する k と x の不確定性が無視できるような極限)で前節で定義した $w_{cl}(v)$ に一致することを示しておこう。 $t = 0$ において $x = x_0$ を通過する入射波の波束は次のように与えることができる。

$$\psi(x, t) = \int f(k) e^{-ik(x-x_0) - i\omega t} dk. \quad (414)$$

ただし、 $f(k)$ は $k = k_0$ のまわりで値を持つ実関数であり、 Δk 程度の広がりを持つとする。上記の積分は $\Delta x \sim 1/\Delta k$ 程度の広がりを持つ波束を与える。

この波動関数が 0 でない値を持つのは、 k 積分の被積分関数の位相があまり変化しないところである。これは次の条件で与えられる。

$$0 = \frac{d}{dk}(k(x - x_0) + \omega t)|_{k=k_0} = (x - x_0) + vt \quad (415)$$

ただし v は群速度 $v = d\omega/dk|_{k=k_0}$ であり、波束が移動する速さである。よって、波束の位置は時間の関数として

$$x = x_0 - vt \quad (416)$$

と与えられ、確かに $t = 0$ で点 $x = x_0$ を通過する波束を与える。

反射した波束の運動も同様に調べることができる。反射係数 $R = e^{2i\delta}$ が与えられたときに、入射単色波 e^{-ikx} に対して反射単色波は $e^{2i\delta}e^{ikx}$ と与えられる。従って (414) によって入射波が与えられたときの反射波は、置き換え $e^{-ikx} \rightarrow e^{2i\delta}e^{ikx}$ を行うことで次のように得られる。

$$\psi(x, t) = \int f(k)e^{-ik(-x-x_0)-i\omega t+2i\delta} dk. \quad (417)$$

この反射波の位置は入射波と同様にして

$$0 = \frac{d}{dk}(k(-x - x_0) + \omega t - 2\delta)|_{k=k_0} = -x - x_0 + vt - 2w_q(k_0) \quad (418)$$

となる。(413) を用いて位相のずれ δ の k 微分を w_q とした。従って、反射した波束の位置は

$$x = -x_0 + vt - 2w_q(k) \quad (419)$$

と与えられる。(k_0 を単に k と書いた。) 従って、反射した波束が位置 $x = x_0$ を通過する時刻は

$$T = \frac{2}{v}(x_0 + w_q(k)) \quad (420)$$

である。これを用いて (404) で定義された $w_{cl}(v)$ を計算すると、 w_q に一致することが示される。

$$w_{cl}(v) = w_q(k). \quad (421)$$

また別の方法でこの関係を確認することもできる。反射係数の定義式 (408) より、 R は $x = x_0$ における入射波 $\psi_{in}(x) = e^{-ikx}$ と反射波 $\psi_{out} = Re^{ikx}$ の比を用いて次のように与えられることがわかる。

$$R = e^{-2ikx_0} \frac{\psi_{out}(x_0)}{\psi_{in}(x_0)} \quad (422)$$

§6.2 において解説した WKB 近似を用いると、入射波の波動関数は

$$\psi_{\text{in}} = e^{\frac{i}{\hbar}S_{\text{in}}(x)}, \quad S_{\text{in}}(x) = \int_{x_0}^x p_-(x)dx \quad (423)$$

反射波の波動関数は

$$\psi_{\text{out}} = e^{\frac{i}{\hbar}S_{\text{out}}(x)}, \quad S_{\text{out}}(x) = \int_{x_0}^{x_*} p_-(x)dx + \int_{x_*}^x p_+(x)dx \quad (424)$$

である。ただし $p_{\pm}(x)$ は

$$p_{\pm}(x) = \pm\sqrt{2m(E - U(x))} \quad (425)$$

であり、 x_* は古典回帰点である。古典回帰点における位相のずれは無視した。この二つの波動関数から (422) によって反射係数を求めると、

$$R = e^{-2ikx_0} \frac{\psi_{\text{out}}(x_0)}{\psi_{\text{in}}(x_0)} = e^{-2ikx_0} e^{\frac{i}{\hbar}(S_{\text{out}}(x_0) - S_{\text{in}}(x_0))} = \exp \frac{2i}{\hbar} \left(\int_{x_*}^{x_0} p_+(x)dx - p_0x_0 \right) \quad (426)$$

となる。ただし p_0 は $x = x_0$ を通過する時の運動量である。この両辺の対数を取ること、位相のずれが次のように得られる。

$$\delta = \frac{1}{\hbar} \left(\int_{x_*}^{x_0} p_+(x)dx - p_0x_0 \right) + \pi n. \quad (427)$$

この両辺を $k = p_0/\hbar$ で微分してみよう。

$$\frac{d\delta}{dk} = \frac{d}{dp_0} \left(\int_{x_*}^{x_0} p_+(x)dx - p_0x_0 \right) = \frac{dE}{dp_0} \int_{x_*}^{x_0} \frac{\partial p_+(x)}{\partial E} dx - x_0. \quad (428)$$

dE/dp は粒子の速さを与えることを用いれば、この式の右辺をさらに次のように変形することができる。

$$\frac{d\delta}{dk} = v(x_0) \int_{x_*}^{x_0} \frac{dx}{v(x)} - x_0 = \frac{v(x_0)}{2} T - x_0. \quad (429)$$

である。ただし、 $v(x)$ は粒子が点 x を通過するときの速度であり、 T は古典的粒子が往復するのにかかる時間

$$T = 2 \int_{x_*}^{x_0} \frac{dx}{v(x)} \quad (430)$$

である。(429) を $w_{\text{cl}}(v)$ の定義式 (404) と比較すると一致していることがわかる。

w_{cl} と w_{q} が等しいことが分かったので、以下ではこれらを区別せずに単に $w(k)$ と書くことにしよう。前節では古典的考察により $w(v)$ の振る舞いをみることで準安定状態の存在などが読み取れることを見た。量子論的には、 $w(k)$ は反射係数から決まり、それが大きくなる場所には準安定状態が存在する。また、反射係数は準安定状態だけではなく、真に安定な束縛状態の情報も含まれている。このことをさらに詳しく見ていこう。

10.3 準安定状態

準安定状態を与える単純なモデルとして、図44のようなポテンシャルを考える。初期状態では粒子は $b < x < a$ の領域に存在し、 $x = a$ にある高いポテンシャルの

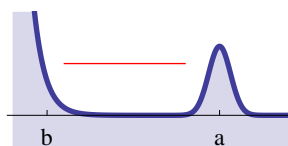


図 44: ポテンシャルの壁で閉じ込められた粒子

山により粒子はある程度の時間この領域内に閉じ込められ、その後トンネル効果によって山を越え外部領域に飛び出してくる。ポテンシャルの山が十分高く、透過率が非常に小さいとすると、粒子は長時間領域内に閉じ込められる。このような状態は準安定状態と呼ばれ、粒子が閉じ込められる時間の平均 τ は、その準安定状態の寿命と呼ばれる。粒子がポテンシャル内に存在している確率は次のように与えられる。

$$P = \exp\left(-\frac{t - t_0}{\tau}\right). \quad (431)$$

ここでの目標は、この準安定状態についての情報を、このポテンシャルに対する反射係数 R から読み取ることである。問題を簡単にするために、 $x \rightarrow \infty$ においてポテンシャルは 0 になり、 $b < x < a$ の領域内にもポテンシャルが 0 になる領域が存在するとする。そうすると、 $x = b$ に存在する壁と $x = a$ における山を独立に扱い、それぞれに対して反射係数 \tilde{R} と散乱行列 S を定義することができる。まずはそれらを用いてこのポテンシャル全体の反射係数 R を計算することから始めよう。

$x = a$ におけるポテンシャルの山の散乱行列 S を用いることで、 $x = a$ の両側の $U(x) = 0$ である領域での波動関数は次のように表わすことができる。

$$\begin{aligned} \psi_{\text{外}}(x) &= Ae^{-ik(x-a)} + (S_{11}A + S_{12}B)e^{ik(x-a)}, \\ \psi_{\text{内}}(x) &= Be^{ik(x-a)} + (S_{21}A + S_{22}B)e^{-ik(x-a)}. \end{aligned} \quad (432)$$

ただし、 $b < x < a$ の波動関数を $\psi_{\text{内}}$ 、 $a < x$ の波動関数を $\psi_{\text{外}}$ と表わした。指数関数の中に座標が $x - a$ の形で現れるのは、散乱行列を $x = a$ を原点として定義したためである。また、 $x = b$ での反射係数を \tilde{R} とすると、 $\psi_{\text{内}}$ は次のように与えられる。

$$\psi_{\text{内}}(x) = Ce^{-ik(x-b)} + \tilde{R}Ce^{ik(x-b)}. \quad (433)$$

反射係数 \tilde{R} も $x = b$ を原点として定義されている。(432) の第二式と (433) を比較することで、係数の間の次の関係式が得られる。

$$Be^{-ika} = \tilde{R}Ce^{-ikb}, \quad (S_{21}A + S_{22}B)e^{ika} = Ce^{ikb}. \quad (434)$$

この二つの式の両辺の比をとると

$$\left(S_{21} \frac{A}{B} + S_{22}\right) e^{2ika} = \frac{1}{\tilde{R}} e^{2ikb}. \quad (435)$$

が得られ、これより B/A を求めることができる。

ポテンシャル全体の反射係数 R は外側の波動関数の入射波成分 e^{-ikx} の係数 Ae^{ika} と反射波成分 e^{ikx} の係数 $(S_{11}A + S_{12}B)e^{-ika}$ の比として与えられる。

$$R = \left(S_{11} + S_{12} \frac{B}{A}\right) e^{-2ika} = \frac{S_{11} - (S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21})\tilde{R}e^{2ikL}}{1 - S_{22}\tilde{R}e^{2ikL}} e^{-2ika} \quad (436)$$

二つ目の等号では (435) より得られる B/A を代入した。さらにこの式は散乱行列のユニタリー性より従う式

$$\frac{S_{11}}{\det S} = (S^{-1})_{22} = (S^\dagger)_{22} = S_{22}^* \quad (437)$$

を用いれば次の形に書き換えることができる。

$$R = -\frac{S_{11}}{S_{22}^*} \tilde{R} e^{-2ikb} \frac{1 - S_{22}^* \tilde{R}^* e^{-2ikL}}{1 - S_{22} \tilde{R} e^{2ikL}}. \quad (438)$$

(438) によって与えられる反射係数の絶対値が 1 であることはすぐに確認できる。

この反射係数を用いることで、準安定状態に対する情報を得たい。準安定状態は、通常の意味での定常状態ではない。しかし少し工夫をすることで、あたかも定常状態であるかのように時間に依存しないシュレーディンガー方程式を用いて扱うことができる。

準安定状態では、時間が経過すればするほど粒子は無限遠へ飛び去って行き、有限区間における存在確率は減少していく。このことは波動関数に減衰因子 $e^{-t/2\tau}$ を導入することで表わすことができる。準安定状態のエネルギーを E_0 とすれば、波動関数の時間依存性は次のように与えられる。

$$\psi(x, t) = \psi(x) e^{-iE_0 t/\hbar} e^{-t/2\tau} = \psi(x) \exp \left[-\frac{it}{\hbar} \left(E_0 - \frac{i\hbar}{2\tau} \right) \right] \quad (439)$$

厳密に言えば、準安定状態は定常状態ではないためにエネルギーは確定値を取らないが、寿命が十分長ければ、エネルギーの不確定性は非常に小さくなる。そのエネルギーの分布の中心値が E_0 と解釈できる。ここでは常に、準安定状態の寿命は長く、 E_0 が十分高い精度で定義できるような状況を考えることにする。

波動関数の時間依存性が (439) によって与えられるということは、準安定状態が形式的に複素数のエネルギー

$$E = E_0 - \frac{i\hbar}{2\tau} \quad (440)$$

を持つ定常状態として扱うことができることを意味する。寿命が十分長いという仮定により、このエネルギーの虚部は微小量として扱うことができる。従って波数を

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad (441)$$

で定義すると、これもやはり複素数になる。平方根の符号はその実部が正になるように選ぶことにする。するとその虚部は E と同様に負の微小量になる。 k を実部と虚部に分け、

$$k = k_0 - ik' \quad (442)$$

とおく。 k' の 2 次の項を無視すれば $E_0 = (\hbar^2/2m)k^2$ であり、

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(k_0 - ik')^2 = E_0 - i\frac{\hbar^2}{m}k_0k' \quad (443)$$

が成り立つ。虚部を (440) の虚部と比較することで

$$\tau = \frac{1}{2vk'} \quad (444)$$

が得られる。ただし v はポテンシャル内に閉じ込められた粒子の速さ $v = \hbar k_0/m$ である。

寿命を計算するために k' を求めよう。ここで先ほど計算した反射係数 (438) を用いることができる。準安定状態にある粒子が少しずつ遠方に飛び去っていくという状況においては、ポテンシャル内部から出てくる波だけがあり、入射波は存在しない。従って、ポテンシャルの壁による反射を表わす波動関数の漸近形

$$\psi(x) = e^{-ikx} + R(k)e^{ikx} \quad (445)$$

において入射波 (第 1 項) が反射波 (第 2 項) に比べて 0 になる場合の k を決めることができればよい。全体を $R(k)$ で割って規格化を変更すれば

$$\psi(x) = \frac{1}{R(k)}e^{-ikx} + e^{ikx} \quad (446)$$

となるから、ポテンシャル内部から出てくる波だけがあるという条件は、

$$\frac{1}{R(k)} = 0 \quad (447)$$

によって与えられる。確率の保存より、通常は $|R(k)| = 1$ が成り立つが、これはあくまでも k が実数である場合である。 k を複素数に拡張すると $|R(k)|$ は一般には 1 ではない。すなわち、 k の複素平面上で反射係数が発散する点 (極) を見つけなければならない。

散乱係数 $R(k)$ の極 \leftrightarrow 準安定状態

上で述べたように $|R(k)|^2 = R(k)R^*(k^*)$ は複素 k 平面上で 1 にはならないが、 $f(k) = R(k)R^*(k) = 1$ という関数を定義すると、これは実軸上で 1 である正則関数であるから、複素平面全体でも 1 になる。($R^*(k)$ は複素関数 $R(k)$ の複素共役 (k^* の関数である) の k^* を k に置き換えたものであり、 k が実数であれば $(R(k))^*$ と等しい。) 従って

$$R(k) = \frac{1}{R^*(k)} = \frac{1}{(R(k^*))^*} \quad (448)$$

が成り立つ。これは図 45 のように R の極と零点が実軸をはさんで常に対を成すことを意味している。(つまり、ある点に極があると、実軸をはさんで対称な点に零点が存在する。)

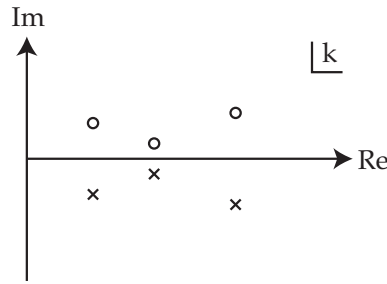


図 45: $R(k)$ の極 (\times) と零点 (\circ) は実軸の両側に対をなして現れる。

反射係数の具体系 (438) を用いて、 $R(k)$ の極の位置を求めよう。(438) が発散するのは分母にある因子 $1 - S_{22}\tilde{R}e^{2ikL}$ が 0 になる場合である。(より一般にはそれ以外の極が存在する場合もありえるが、ここでは考えない。) (442) を代入すれば

$$S_{22}\tilde{R}e^{2ik_0L+2k'L} = 1. \quad (449)$$

k_0 は (449) の偏角をとり、整理することで次のように得られる。

$$k_0 = \frac{1}{2L} \left(2\pi n - \arg(S_{22}\tilde{R}) \right) \quad (450)$$

これは $b < x < a$ をポテンシャルの井戸とみなしたときに、その中の束縛状態の波数を与える式である。これにより得られるとびとびの k_0 がそれぞれ準安定状態に対応し、その値から準安定状態のエネルギー E_0 が決まる。

(449) の両辺の絶対値を取れば、

$$|S_{22}|e^{2k'L} = 1 \quad (451)$$

が得られる。 $x = a$ におけるポテンシャルの山の透過率 T が小さいと仮定すると

$$|S_{22}| = \sqrt{1 - T} \sim \exp\left(-\frac{T}{2}\right) \quad (452)$$

が成り立つ。これを用いれば

$$k' = \frac{T}{4L} \quad (453)$$

となる。これを (444) に代入することで、準安定状態の寿命は次のように決まる。

$$\tau = \frac{2L}{vT}. \quad (454)$$

これは半古典的解析を用いて以下のように解釈することができる。ポテンシャルに閉じ込められた粒子は、 $b < x < a$ の領域を速さ v で往復している。従って、時間 t が経過する間に山にぶつかる回数は

$$\frac{v}{2L}t \quad (455)$$

である。一回山に衝突するたびに確率 T で山を通り抜けるとすると、時間 t が経過したあとも内部にとどまっている確率は

$$(1 - T)^{\frac{vt}{2L}} \sim \exp\left(-\frac{vT}{2L}t\right) \quad (456)$$

と与えられる。これは準安定状態の寿命が (454) によって与えられることを意味している。