

デルタ関数型ポテンシャルによる散乱の計算

ガオゾウ

2019 年 1 月 27 日

1 概要

Twitter してたら TL で B2 がデルタ関数型ポテンシャルによる散乱の計算をしていたので何となく自分もやってみた。

2 問題設定

一次元の問題を考える。 $x = 0$ の点にデルタ関数型ポテンシャルが存在するとする。 $x = -\infty$ から $\psi(x) = e^{ikx}$ の入射波が入射してきたときの、波の透過率と反射率を計算せよ。

3 解答

このような問題の場合には、普通定常状態を考える。これは、常に $x = -\infty$ から粒子が飛んできているときに、その時の「平均の」反射率・透過率を求めることに相当すると考えられる（と思う）。

さて、今の問題ではポテンシャル V とハミルトニアン $H(x)$ は次のように与えられる。

$$H(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (1)$$

$$V(x) = V\delta(x) \quad (2)$$

このとき、定常状態を求めるシュレーディンガー方程式は次のようになる。

$$H\psi = E\psi \quad \text{すなわち、} \quad (3)$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V\delta(x) \right\} \psi = E\psi \quad (4)$$

この微分方程式の解を求めよう。まず、この微分方程式は $x > 0$ と $x < 0$ のそれぞれでは簡単に解くことができる。実際、例えば $x > 0$ では $H(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ であるから、シュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi = E\psi \quad (5)$$

となり、非常に簡単な二階の微分方程式である。これを解けば、

$$\psi(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx} \quad (6)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (7)$$

がわかる。ここで C_1, C_2 は任意の定数である*1。

$x > 0$ と $x < 0$ のそれぞれでこのようにシュレーディンガー方程式を解くことができる。したがって、シュレーディンガー方程式 (4) の解 $\psi(x)$ は次のように書けるはずである。

$$\psi(x) = \begin{cases} C_1 e^{ik_1 x} + C_2 e^{-ik_1 x}, E = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} & (x < 0) \\ C_3 e^{ik_2 x} + C_4 e^{-ik_2 x}, E = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} & (x > 0) \end{cases} \quad (8)$$

今、 $x < 0$ と $x > 0$ と分けて考えたのはあくまで微分方程式を解く私たちの都合であって、本当は一本の微分方程式 (4) であったことを思い出すと、 $x < 0$ と $x > 0$ のそれぞれにおけるエネルギーは同じものでなくてはならないはずだから、 $k_1 = k_2$ がわかる。また、今デルタ関数型ポテンシャルに、平面波 e^{ikx} が $x = -\infty$ から入射してきている状況を考えている。したがって、 $C_1 = 1$ という境界条件を課するのが自然である*2。さらに、物理的に考えれば $x > 0$ においては x 軸正方向に進む粒子しか存在しないはずである。波数 k の平面波の運動量は $\hbar k$ で与えられることから、式 8 において $C_4 = 0$ でなくてはならないことがわかる。結局、残った任意定数は C_2, C_3 である。

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + C_2 e^{-ikx} & (x < 0) \\ C_3 e^{ikx} & (x > 0) \end{cases} \quad (9)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (10)$$

最後に、 C_2, C_3 を決めよう。以下では $C_2 = T, C_3 = R$ と書くことにする。

T, R は次の二つの要請から決まる。一つ目は、波動関数 ψ は連続でなくてはならない*3。二つ目の要請は、波動関数の導関数に関する要請である。それを導くために、微分方程式 4 を原点付近の微小区間 $(-\epsilon, \epsilon)$ で積分することを考えよう。

$$\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V\delta(x) \right\} \psi = \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx E \psi \quad (11)$$

左辺を少し計算すると、

$$\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V\delta(x) \right\} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{-\epsilon}^{\epsilon} + V\psi(x=0) \quad (12)$$

式 11 に式 12 を代入し、 $\epsilon \rightarrow 0$ とすると、右辺が波動関数の連続性から 0 になることに注意すれば、

*1 本当は波動関数を規格化する必要があるが、今はあまり気にしないことにする。

*2 課さなくてもできる。これはあとで透過率や反射率の計算を楽にするために、入射波の振幅を 1 に規格化しているといってもよい。

*3 この正確な理由はよく知らないが、たぶん運動量演算子が微分演算子で書かれていることから、一回も微分できないような波動関数はいろいろまずいということだと思う。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-0}^{+0} + \psi(x=0) = 0 \quad (13)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d\psi}{dx}(x=+0) - \frac{d\psi}{dx}(x=-0) \right) = V\psi(x=0) \quad (14)$$

したがって、波動関数の導関数は、原点で $\psi(x=0)$ だけ飛ばなくてはならないことがわかる。これが波動関数に対する第二の要請である。

以上二つの要請を考慮して、式 9 における C_1, C_2 、もとい T, R を決めればよい。

すなわち、 T, R が満たすべき条件は次のようになる。

$$(\psi(x=0) =) e^{ikx} + Re^{-ikx} = Te^{ikx} \quad @x=0 \quad (15)$$

$$ik(e^{ikx} - Re^{-ikx}) = ikTe^{ikx} + \frac{2mV}{\hbar^2}\psi(x=0) \quad @x=0 \quad (16)$$

これを T, R の方程式として解けば答えが求まる。式に $x=0$ を代入して整理すれば、

$$1 + R = T \quad (17)$$

$$1 - R = T - \alpha T = (1 - \alpha)T \quad (18)$$

ただし、 $\alpha = 2mVi/\hbar^2 k$ とおいた。

これを解いて、

$$T = \frac{2}{2 - \alpha} \quad (19)$$

$$R = T - 1 = \frac{\alpha}{2 - \alpha} \quad (20)$$

T, R はそれぞれ、透過波と反射波の波動関数の振幅であった。したがって、透過率と反射率はこの絶対値の二乗に相当する*4。よって、反射率と透過率はそれぞれ、

$$(\text{透過率}) = |T|^2 = \frac{4}{|2 - \alpha|^2} = \frac{4}{4 - 4\text{Re}\{\alpha\} + |\alpha|^2} \quad (21)$$

$$= \frac{\hbar^4 k^2}{m^2 V^2 + \hbar^4 k^2} \quad (22)$$

$$(\text{反射率}) = |R|^2 = \frac{|\alpha|^2}{|2 - \alpha|^2} = \frac{4m^2 V^2 / \hbar^4 k^2}{4 + 4m^2 V^2 / \hbar^4 k^2} \quad (23)$$

$$= \frac{m^2 V^2}{m^2 V^2 + \hbar^4 k^2} \quad (24)$$

と計算できる。透過率と反射率を足すと確かに 1 になっていることも確かめられる。

*4 確率流密度の大きさを計算することによってこれは直接示することができる。