量子力学 II　演習問題 11

2018 年 7 月 3 日

1　Airy 関数を用いた準古典的波動関数の接続

1 次元空間における量子力学的な粒子の運動を準古典近似によって調べる。ハミルトニアンは次のように与えられる。

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

このとき、固有エネルギー E に対応する固有状態の第 1 次近似における準古典的波動関数は次のようになる（講義ノートの式 (9.15)）。

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \left(c_1 e^{\frac{i}{\hbar}\int p(x)dx} + c_2 e^{-\frac{i}{\hbar}\int p(x)dx} \right)$$

但し、$p(x) := \sqrt{2m(E - U(x))}$ である。ここで、$x = a$ を転回点、すなわち $U(a) = E$ が成り立つ点とし、ポテンシャルが $x < a$ で $U(x) < E$、$x > a$ で $U(x) > E$ であるとする。このとき、転回点の左側から入射する粒子の波動関数について考える。$x > a$ における解のうち x の増加に伴って減衰する解は

$$\psi_+(x) = \frac{c}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p(y)dy \right| \right)$$

と表される。$x < a$ においては右向きの入射波と転回点で反射された左向きの反射波が存在し、波動関数は

$$\psi_-(x) = \frac{c_1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(y)dy \right) + \frac{c_2}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(y)dy \right)$$

となる。ここで係数 c, c_1, c_2 の関係を調べるために両者を $x = a$ 近傍で滑らかに接続することを考える。講義ノートにおいては x を複素数に拡張することによって接続したが、ここでは Airy 関数を用いた接続を考えよう。転回点の近傍において、ポテンシャルを転回点 $x = a$ のまわりで展開し，その 1 次までの項で近似する。

$$U(x) \simeq U(a) + U'(a)(x-a) = E + U'(a)(x-a)$$

(1) シュレディンガー方程式 $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$ について、ポテンシャルにこの線形近似を適用するとき、適切な変数変換 $x = f(z)$, $u(z) := \psi(f(z))$ を施すことによって、シュレディンガー方程式を次のような形に帰着させることができることを示せ。

$$\frac{\mathrm{d}^2 u(z)}{\mathrm{d}z^2} - zu(z) = 0 \qquad (1)$$

次のように与えられる 2 つの関数 $\mathrm{Ai}(z)$ と $\mathrm{Bi}(z)$ が $u(z)$ についての微分方程式 (1) の解となっていることが知られている。

$$\mathrm{Ai}(z) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \cos\left(\frac{t^3}{3} + zt \right) \mathrm{d}t$$

$$\mathrm{Bi}(z) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \left[\sin\left(\frac{t^3}{3} + zt \right) + \exp\left(\frac{-t^3}{3} + zt \right) \right] \mathrm{d}t$$

よって、微分方程式 (1) の解 $u(z)$ は $\mathrm{Ai}(z)$ と $\mathrm{Bi}(z)$ の線型結合によって $u(z) = c_A\,\mathrm{Ai}(z) + c_B\,\mathrm{Bi}(z)$ と書ける。$\mathrm{Ai}(z)$ は第一種 Airy 関数または単に Airy 関数と呼ばれ、$\mathrm{Bi}(z)$ は第二種 Airy 関数または Biry 関数と呼ばれる。これらの関数は $z \to -\infty$ において次のような漸近形を持つことが知られている。

$$\mathrm{Ai}(z) \approx \frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{|z|^{1/4}}\cos\left(\frac{2}{3}|z|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right), \quad \mathrm{Bi}(z) \approx -\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{|z|^{1/4}}\sin\left(\frac{2}{3}|z|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right)$$

また、$z \to +\infty$ において次のような漸近形を持つことが知られている。

$$\mathrm{Ai}(z) \approx \frac{1}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}}\exp\left(-\frac{2}{3}z^{3/2}\right), \quad \mathrm{Bi}(z) \approx \frac{1}{\sqrt{\pi}z^{1/4}}\exp\left(+\frac{2}{3}z^{3/2}\right)$$

(2) $u(z) = c_A\,\mathrm{Ai}(z) + c_B\,\mathrm{Bi}(z)$ において変数を z から x に戻すことにより、転回点近傍における波動関数 $\psi_a(x) := u(f^{-1}(x))$ が得られる。このとき、$x \to -\infty$ において $\psi_a(x)$ が $\psi_-(x)$ に漸近し、$x \to +\infty$ において $\psi_a(x)$ が $\psi_+(x)$ に漸近することを要請することによって、c_1 および c_2 を、c を用いて表し、$\psi_-(x)$ が次の形となることを示せ。

$$\psi_-(x) = \frac{c}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^x p(y)dy\right| - \frac{\pi}{4}\right)$$

2　準古典近似による調和振動子のエネルギー準位の解析

1 次元調和振動子型ポテンシャル $U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ の中を運動する粒子のエネルギー準位を準古典近似によって求めよう。固有エネルギー E に対応するエネルギー固有状態を考える。このとき、回帰点すなわち $p(x) := \sqrt{2m(E - U(x))} = 0$ の 2 つの解を a, b（但し、$a < b$）とする。

(1) a、b の値を求めよ。

第 1 次近似における準古典的波動関数を考える。$x > b$ における波動関数 $\psi_+(x)$ は x の増加に伴って減衰するため次のような形で表される。

$$\psi_+(x) = \frac{c'}{2\sqrt{|p(x)|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\left|\int_b^x p(y)dy\right|\right)$$

一方で、$x < a$ における波動関数 $\psi_-(x)$ は x の減少に伴って減衰するため次のような形で表される。

$$\psi_-(x) = \frac{c}{2\sqrt{|p(x)|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\left|\int_x^a p(y)dy\right|\right)$$

(2) $a < x < b$ における波動関数を $\psi_0(x)$ とする。大問 1 の結果を用いて $x = b$ における接続を考え、$\psi_0(x)$ を、c' を用いて表せ。また、同様の考察によって $x = a$ における接続を考え、$\psi_0(x)$ を、c を用いて表せ。

(3) (2) で求めた $\psi_0(x)$ の 2 通りの表式が $a < x < b$ において一致することを要請することによって固有エネルギー E を求めよ。また、準古典近似によって得られた E が厳密に求めた値と一致することを確認せよ。

3　原子核のアルファ崩壊

原子核は陽子と中性子からなる系であるが，質量数が 200 を超える核種の多くはアルファ粒子（陽子数が 2，中性子数が 2 のヘリウム原子核 ^{4}He）を放出して崩壊する。原子核の内部にいるアルファ粒子は，陽子や中性子の間にはたらく強い相互作用（核力）と陽子がもつ正電荷の間にはたらくクーロン力を受けている。しかし，核力は作用する距離が極めて短く，原子核の外に出たアルファ粒子はクーロン力の作用だけを受ける。これらの核力とクーロン力を単純化して，アルファ粒子に作用する球対称ポテンシャル $V(r)$ が次のように与えられるとする。

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & (r < R) \\ \frac{1}{r} Z_\alpha Z_{\mathrm{D}} \hbar c \alpha & (r > R) \end{cases}$$

ここで、$R(>0)$ は核力が作用する距離、$V_0(>0)$ は核力ポテンシャルの大きさ、$Z_\alpha(>0)$ はアルファ粒子の価数、$Z_D(>0)$ は原子核の価数、$\alpha(>0)$ は微細構造定数であり、スピン自由度は考えない。ポテンシャルが中心対称なので軌道角運動量量子数 l と磁気量子数 m が保存し（l, m は整数、$l \geq 0, -l \leq m \leq l$)、エネルギー固有関数は $\Psi(\mathbf{r}) = Y_{lm}(\theta, \phi) R_l(r)$ というように動径成分と角度成分に変数分離できる。ラプラシアンが角運動量演算子 $\hat{\mathbf{L}}$ を用いて表されることに注意すると、固有エネルギー E (但し、$-V_0 < E < V(R)$) に対応する固有状態の動径成分の固有値方程式が得られる。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mr} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} r + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R_l(r) = E R_l(r)$$

ここで、アルファ崩壊は $l = 0$ において崩壊確率が最も大きいことが知られており、以下では $l = 0$ の状態のみ考える。$\chi(r) = r R_0(r)$ とおくと次のような $\chi(r)$ についての固有値方程式が得られる。

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + V(r) \right) \chi(r) = E \chi(r)$$

この方程式を、$r < R$ においては厳密に解き、$r > R$ においては WKB 近似を用いて解き、$r = R$ においては波動関数およびその 1 階微分の連続性を課して接続する。

(1) 転回点 b、すなわち、$V(b) = E$ なる b を求めよ。

以後、$0 < r < R$、$R < r < b$、$b < r$ の領域をそれぞれ領域 1、2、3 と呼ぶ。アルファ崩壊は核力のポテンシャルの中（領域 1）にあるアルファ粒子がトンネル効果によって原子核の外（領域 3）に出てくる現象である。従って，領域 3 における波動関数は外向きの波だけであり，これがアルファ粒子の波動関数が満たすべき境界条件になる。よって、領域 3 における波動関数 $\chi_3(r)$ は次のように表される。

$$\chi_3(r) = \frac{C}{\sqrt{k(r)}} e^{+i\eta(b,r)}$$

ここで、

$$k(r) = \frac{\sqrt{2m(E - V(r))}}{\hbar}, \quad \eta(c, d) = \int_c^d \mathrm{d}x \frac{\sqrt{2m|E - V(x)|}}{\hbar}$$

である。一方で、領域 1 における厳密解 $\chi_1(r)$ は次のように書ける。

$$\chi_1(r) = \frac{1}{\sqrt{k_0}} \left(C_+ e^{+ik_0(r-R)} + C_- e^{-ik_0(r-R)} \right)$$

ここで、$k_0 = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$ である。このとき、透過係数 T は次のように定義される。

$$T = \frac{|C|^2}{|C_+|^2}$$

この T を求めることがこの問題の目標である。

(2) 領域 2 における準古典的波動関数 $\chi_2(r)$ を領域 3 から接続することによって求めよ。

(3) $r = R$ において、$\chi_1(r)$ と $\chi_2(r)$ の連続性およびそれらの 1 階微分の連続性を課すことによって、$C_\pm$ と C の関係を求めよ。

(4) (3) の結果を用いて、透過係数 T を求めよ。