量子力学 3 演習 (田中担当クラス) 問題 No.6 (2002/11/7)

1. 量子力学から古典力学への移行を見て、準古典近似について考えよう。

   (a) 波動関数を $\psi(\boldsymbol{x},t)=\exp(iS(\boldsymbol{x},t)/\hbar)$ と置く。(1 粒子の)Schrödinger 方程式から $S(\boldsymbol{x},t)$ の満す方程式を導き、$\hbar\to 0$ の極限で S の満す方程式が Hamilton-Jacobi の方程式であることを確かめよ。(すなわち、$\hbar\to 0$ の極限で量子力学から古典力学への移行が起っている。)

   (b) 定常状態について上と同じことを行ない、$(\nabla S)^2-i\hbar\Delta S=2m(E-V(\boldsymbol{x}))$ となることを示せ。

   (c) 1 次元の定常状態について、$S(x)=S_0+\frac{\hbar}{i}S_1(x)+\cdots$ と展開して、S_0、S_1 の満す方程式を導け。(準古典近似、あるいは WKB 近似と呼ばれる。)

   (d) 上で求めた方程式を解き、古典的に到達可能な領域、すなわち $E>V(x)$ では

   $$\psi=\frac{C_1}{\sqrt{p}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int p\,dx\right)+\frac{C_2}{\sqrt{p}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int p\,dx\right)$$

   となることを示せ。ただし $p(x)=\sqrt{2m(E-V(x))}$ で、C_1、C_2 は定数である。また、古典的に到達不可能な領域、$E<V(x)$ では

   $$\psi=\frac{C_1}{\sqrt{|p|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int |p|\,dx\right)+\frac{C_2}{\sqrt{p}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int |p|\,dx\right)$$

   と書けることを示せ。

   (e) 準古典近似がよい近似であるためには、$(1/2\pi)|d\lambda/dx|\ll 1$ でなければならないことを示せ。また、これは $m\hbar|F|/|p|^3\ll 1$ と書けることを示せ。ただし、$F=-dV/dx$ である。(これから、運動量の小さい領域、とくに古典的回帰点では準古典近似は適用できないことがわかる。)

2. ポテンシャルが $x>a$ で $V(x)=+\infty$ のとき、$x<a$ で $E>V(x)$ とすれば、準古典近似の波動関数はどのようになるか。

3. 1 次元の右上がりのポテンシャルを考え、古典的回帰点を $x=a$ としよう。すなわち、$E=V(a)$ で、$x>a$ では $E<V(x)$、$x<a$ では $E>V(x)$ である。$x>a$ の領域は古典的に到達不可能であるから、$x\to+\infty$ で波動関数はゼロになるはずである。したがって、$x>a$ で回帰点から十分に離れたところで

   $$\psi=\frac{C}{2\sqrt{|p|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_a^x |p|\,dx'\right)$$

   と書ける。一方、$x<a$ では

   $$\psi=\frac{C_1}{\sqrt{p}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_a^x p\,dx'\right)+\frac{C_2}{\sqrt{p}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_a^x p\,dx'\right)$$

   となる。以下で C と C_1、C_2 の関係を求めよう。

   (a) $x=a$ でポテンシャルが $V(x)=E-F_0(x-a)+\cdots$ (ただし $F_0=-dV/dx|_{x=a}<0$) と展開できるとしよう。このとき、問題 1e の条件から $|x-a|$ にどのような制限が課されることになるか。以下では、この制限と上の $V(x)$ の展開が両立する x の領域、すなわち準古典近似が適用できるぐらい回帰点から離れているが、ポテンシャルの線形近似も成立するような領域、があると仮定する。

   (b) 波動関数 $\psi(x)$ を形式的に複素数 x の関数とみなし、$x-a$ が正から負へ移る際に (常に準古典性が満されるように) $x=a$ から十分離れた経路を通ればよい。$x-a=\rho e^{i\varphi}(\rho>0)$ と置き、φ を $0\to\pi$ として上半面の半円を通ることにしよう。φ が $0\to\pi$ と変化するとき、

   $$-\frac{1}{\hbar}\int_a^x |p|\,dx'\longrightarrow-\frac{i}{\hbar}\int_a^x p\,dx'$$

   となることを示せ。

(c) 同様に φ が $0 \to \pi$ と変化するとき、$1/\sqrt{|p|} \to e^{-i\pi/4}/\sqrt{p}$ となることを示し、上の結果を合せて接続条件 $C_2 = (C/2)e^{-i\pi/4}$ を示せ。

(d) 下半面の半円を通る経路を考えて、もうひとつの接続条件 $C_1 = (C/2)e^{i\pi/4}$ を導け。

(e) ポテンシャルが右下がりの場合について、上と同様にして接続条件を求め、右上がりの場合と合せて、回帰点が $x = a$ のとき、

$$V(x) > E,\ \psi = \frac{C}{2\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^x p\,dx'\right|\right) \longrightarrow V(x) < E,\ \psi = \frac{C}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^x p\,dx'\right| - \frac{\pi}{4}\right)$$

という接続公式が成り立つことを示せ。

4. ポテンシャルの井戸の中の準古典的な粒子の運動を考える。回帰点を $x = a, b\ (a < b)$ とする。

(a) $x > b$ で

$$\psi(x) = \frac{C}{2\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_b^x |p|\,dx'\right)$$

として、接続公式を用いて $a < x < b$ での波動関数を決定せよ。

(b) 同様に $x < a$ で

$$\psi(x) = \frac{C'}{2\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_x^a |p|\,dx'\right)$$

として、$a < x < b$ での波動関数を決定せよ。

(c) これらの波動関数が一致することを要請して、Bohr–Sommerfeld の量子化条件、

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\oint p\,dx = n + \frac{1}{2} \tag{1}$$

を導け。また、n は波動関数のゼロ点の数であることを確かめよ。

(d) $x < a$、$x > b$ で波動関数は指数関数的に減少するから、波動関数の規格化は $a < x < b$ での積分だけ考えればよい。規格化された波動関数が

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2\omega}{\pi v}} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p dx' - \frac{\pi}{4}\right)$$

となることを示せ。ただし、$v = p/m$、$\omega = 2\pi/T$ で、T は古典的な運動の周期を表す。($\cos$ の部分は速く振動しているから、規格化積分で $\cos^2$ をその平均値 $1/2$ で置き換えてよい。)

5. 式 (1) を用いて、準古典近似での調和振動子のエネルギー準位を求めよ。