量子力学 3 演習 No.13 (00/1/27)

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、$S(x)=S_0+\frac{\hbar}{i}S_1(x)+O(\hbar^2)$ と展開して (準古典近似、あるいは WKB 近似と呼ばれる)、$S_0$、$S_1$ の満す方程式を導け。

   (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、

   $$\frac{1}{2\pi}\frac{d\lambda}{dx}\ll 1$$

   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. 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

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

   と書ける。一方、$x<a$ では

   $$\psi=\frac{C_1}{\sqrt{p}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_a^x p\,dx'\right)+\frac{C_2}{\sqrt{p}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_a^x p\,dx'\right) \tag{2}$$

   となる。以下で $C$ と $C_1$、$C_2$ の関係を求めよう。

   (a) $x\sim a$ では上の準古典的な波動関数は使えない。そこでこの領域で Schrödinger 方程式の厳密解を求めその漸近形と比較することにより $C_1$、$C_2$ を決定することを考える。$x\sim a$ で $E-V(x)\simeq F_0(x-a)$ と近似して ($F_0=-dV/dx<0$)、Schrödinger 方程式が $d^2\psi/d\xi^2-\xi\psi=0$、ただし $\xi=(2m|F_0|/\hbar^2)^{1/3}(x-a)$ となることを示せ。

   (b) この方程式の解は Airy 関数で、その漸近形から

   $$\psi\approx\frac{A}{2\xi^{1/4}}\exp\left(-\frac{2}{3}\xi^{3/2}\right)\qquad \xi\to+\infty$$

   $$\psi\approx\frac{A}{|\xi|^{1/4}}\sin\left(\frac{2}{3}|\xi|^{3/2}+\frac{\pi}{4}\right)\qquad \xi\to-\infty$$

   となることがわかる。これらを式 (1)、(2) と比較して、$C_1=(C/2)e^{i\pi/4}$、$C_2=(C/2)e^{-i\pi/4}$ となることを示せ。