7　量子力学おける粒子の反射・透過・散乱

量子力学において粒子の運動はシュレーディンガー方程式で与えられるが、今回は簡単な場合について粒子の運動がポテンシャルによって乱される様子を解いてみる。

7.1　シュレーディンガー方程式

まず 1 次元問題を考える。

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\psi \tag{1}$$

ここで ψ は波動関数、V はポテンシャルである。無次元化するために、

$$x_0\equiv\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mE_0}},\quad t_0=\frac{\hbar}{E_0}$$

を使うと、

$$i\frac{\partial\psi}{\partial\tau}=\left(-\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+v(\xi)\right)\psi \tag{2}$$

ただし

$$\tau=t/t_0,\quad \xi=x/x_0\quad v(\xi)=\frac{V(x)}{E_0}$$

である。E_0 は好きに選べるエネルギーの次元をもつ定数である。

7.2　差分化

波動関数の実部と虚部をそれぞれ $\psi_r\equiv\mathrm{Re}\psi,\quad \psi_i\equiv\mathrm{Im}\psi$ とすると、シュレーディンガー方程式は

$$\frac{\partial\psi_r}{\partial\tau}=\left(-\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+v(\xi)\right)\psi_i \tag{3}$$

$$\frac{\partial\psi_i}{\partial\tau}=\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}-v(\xi)\right)\psi_r \tag{4}$$

という形に帰着される。この式を差分化する。

右辺の二階微分を先週のラプラス方程式のときと同様に差分化すると、

$$\frac{\partial\psi_{r\ \mathrm{i}}}{\partial t}=-\frac{1}{(\Delta\xi)^2}\left(\psi_{i\ \mathrm{i+1}}+\psi_{i\ \mathrm{i-1}}-2\psi_{i\ \mathrm{i}}\right)+v_\mathrm{i}\psi_{i\ \mathrm{i}} \tag{5}$$

$$\frac{\partial\psi_{i\ \mathrm{i}}}{\partial t}=\frac{1}{(\Delta\xi)^2}\left(\psi_{r\ \mathrm{i+1}}+\psi_{r\ \mathrm{i-1}}-2\psi_{r\ \mathrm{i}}\right)-v_\mathrm{i}\psi_{r\ \mathrm{i}} \tag{6}$$

ここで添え字の i は ξ_{i} での物理量を表す。この形まで変形すると、$\psi_{r\ \mathrm{i}}$ と $\psi_{i\ \mathrm{i}}$ に関する、「グリッド数× 2」元連立常微分方程式と見ることができる。後は N 粒子の運動方程式を解いたときと同様にルンゲクッタ法などで時間積分していけばよい。

7.3 矩形波束の透過・反射（箱型ポテンシャル）

決まった運動量を持った平面波の一部を切り取った矩形の波束入射してくるとして考える。$\tau = 0$ での波動関数は

$$\psi(0,\xi) = \frac{1}{\sqrt{L_1}} e^{i\xi} \quad \text{if } 0 < \xi < L_1, \qquad \text{otherwise } \psi(0,\xi) = 0 \tag{7}$$

である。空間依存性が $e^{i\xi}$ であるとすると、シュレーディンガー方程式 (2) で $v = 0$ として代入すると、時間発展する解は $\psi \propto e^{i(\xi - \tau)}$ のように ξ の正の方向に進む平面波になる。もっとも、この初期条件の波では、波の存在区間が幅 L_1 に限られているので、実際には平面波にはならず、波束が崩れていくことになる。またこの初期条件での確率密度を計算すると、$0 < x < L_1$ の領域に粒子が局在する箱型の確率分布関数となっている。

ポテンシャルは

$$v(\xi) = 0.9 \quad \text{if } 0.5L < \xi < 0.6L, \qquad \text{otherwise } v(\xi) = 0 \tag{8}$$

の障壁を考える。今入射粒子のエネルギーはおよそ E_0 になっているので、E_0 で規格化されたポテンシャル v の値が 1 であるということは、「すれすれ」粒子のエネルギーがポテンシャルを超えるか超えないかの値であることを示している。

→トップページのプログラム

注意）$0 > x, x > L$ の領域に、境界との緩衝領域を与えている。これは数値計算の境界で、波が反射してしまい、自由に波が出入りする境界条件を与えるのが難しいからである。緩衝領域では、関数 dump にしたがって波動関数が指数関数的に減衰するようにしてあり、これによって $0 < x < L$ の領域への反射を防ぐことができる。

動かすことができ、コードを理解できたら以下について考えてみよ。

- 存在確率密度をプロットしてみよ。
- 障壁の高さや厚みを変えるとどうなるか？
- 障壁ではなく、井戸にするとどうなるか？
- ポテンシャルを透過する確率・反射する確率はどうなるか?
- グリッド数を変えたときに数値解の収束の様子はどうなっているか？

7.4　課題

2 次元のシュレーディンガー方程式を差分化した式を作り、1 次元のときと同様に波束の伝播・散乱の様子を調べてみよ。ただしポテンシャルは" 茶筒型" すなわち $\sqrt{x^2+y^2} < r_0$ で有限の値をとり、外では 0 となるものとすること。投入する波束はガウス型、すなわち

$$\psi(0,x,y) = e^{-(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_c)^2/r_0^2} e^{ikx}$$

とする（x 方向に伝搬する波）。