



Mathematicaを用いた量子力学的散乱状態のアニメーション

メタデータ	言語: jpn 出版者: 宮崎大学教育文化学部 公開日: 2008-03-21 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: 作田, 俊美, 今吉, 幸哉, Sakuda, Toshimi, Imayoshi, Yukiya メールアドレス: 所属:
URL	http://hdl.handle.net/10458/1390

Mathematicaを用いた量子力学的散乱状態のアニメーション

作田俊美・今吉幸哉*

Computer Animations for Quantum Scattering States Using Mathematica

Toshimi SAKUDA and Yukiya IMAYOSHI*

要 旨

コンピュータを用いた量子力学的散乱状態のシミュレーションの教材開発を行った。散乱状態は、運動系の取り扱いの難しさが、量子力学の中でも学生の理解度がなかなか得にくい分野である。数式処理とグラフィックス機能の優れたソフトウェアMathematicaを利用することにより、数学的解法にとらわれることなく、量子効果の本質を理解させるための教材開発を行った。粒子の衝突問題を、(1) 時間に依存しない取り扱いと、(2) 時間依存の取り扱いの、2つの立場でのシミュレーションを開発した。(1)では、時間に依存しないSchrödinger方程式を解析的に解き、波動関数や散乱係数の議論をさせるシミュレーションを作成した。この立場では、定常状態として扱うため、衝突現象の直感的なイメージとの関連が付きにくい。そこで(2)の立場では入射粒子に波束を用いて、時間依存のSchrödinger方程式を運動量固有関数で展開する方法で解き、波束が時間とともに散乱される様子をアニメーションで表示した。これらは散乱状態の直感的理解に非常に効果的であると期待される。2つのシミュレーションともパラメータを設定することで、入射粒子のエネルギー、ポテンシャルの型を変えることもできる。学生が自由に条件を変えながら、波動関数の振る舞いを色々な面から学習できるシステムとした。

1. 序論

量子力学は、日常生活で直接経験することができない、ミクロの系で成立する基本法則である。このような系では、古典力学が成立するマクロな系では現れない現象(粒子性と波動性の二重性、物理量の不確定性、確率的様相など)が現れる。量子力学は光の研究を基礎として発展してきた学問であるが、現代の科学技術(半導体、原子炉、レーザーなど)の基礎理論であり、今後の技術革新にとって、量子力学は必須な役割を果たすことが予想されている。その意

*宮崎大学大学院教育学研究科(2000年3月修了)

味で、量子力学の基本的理解は、物理専攻でない学生にとっても非常に意義のあることになってきた。

しかし、ミクロな系では多くの物理概念に対して、何ら直感も経験も有していないから、この理論が日常の認識では理解しがたい部分があることも事実である。Schrödinger方程式が、容易に解く事ができる場合は多くはない。そして、高度な数学を必要とする場合が多く、物理的な本質を学ぶことよりも、抽象的な数学を理解する過程に力をそがれてしまっている学生も少なくない。このような特徴のために学生が量子力学を正しく理解する事が難しいことが現実問題である。科学を記述するに、数学は必要不可欠なものであることは周知の事実であるが、物理的な内容を深めていく過程において壁になることもあるだろう。このような困難を克服するためにコンピュータを活用することは、非常に有効なことだと考えられる。例えば、微分方程式の深い知識がなくてもSchrödinger方程式を解くことが可能である。また、波動関数のコンピュータグラフィックスによる視覚的な表示も直感的な理解に有用である。そして今回提案するのは、量子力学による散乱問題を考えるときに、その波動関数の時間変化を理解するためにコンピュータのアニメーション機能を使う方法である。従来、この様な場合に大型の計算機と大規模なプログラミングを必要としていたが、最近のコンピュータとソフトウェアの進歩によって、学校現場で比較的簡単に実行できるようになった。学生の自主学習や教室での演示としても大変有効であろう。

これから議論するようなエネルギー固有値が連続的に分布しているような問題は、通常、粒子とある力場との衝突に関連して起こってくる。衝突の問題では、あらかじめエネルギーが指定されていて、非常な遠方(力場の存在しない)での波動関数の振る舞いをそのエネルギーを使って求め、次いでこの漸近的な振る舞いを粒子が力場によって散乱される量に関係付けることになる。

これらの解で正確に求められるものは比較的少数であるが、それらは広く応用しうるものである。なぜなら、それらの解はもっと複雑な系の近似的な計算の基礎として役立つものであるからである。また、衝突現象の研究は原子核や素粒子の問題に関連して特に重要になるのである。

もともと衝突問題では、粒子を送るのであるから、その粒子の振る舞いを記述する波動関数に波束を適用し議論することで物理的にはっきりした意味を持つ。しかし、実際はエネルギー(もしくは運動量)を狭い範囲に限らせるので波束はx方向に十分広いものを扱うことになる。そこで通常は、極限として、一定の運動量を持ち、無限に広い範囲にわたるような波動関数(平面波)とポテンシャルによる散乱として扱われる。この場合の系は時間的に定常状態となり、時間に依存しない系として比較的簡単に扱うことができる。但し、衝突現象のイメージとの関連が付きにくく、直感的な理解はしにくいのが、散乱係数を考察するには有効である。そこで、まずはじめに平面波を使う方法を取り扱い、その後波束を用いて系の時間発展を考慮した場合の散乱を議論することにする。この方法では、波束が運動しポテンシャルに衝突する様子を時間的に追跡するので、直感的イメージが得易い。この時に、コンピュータによるアニメーションが大変有効である。

2. 一次元散乱問題の時間に依存しない取り扱い

2-1. Schrödinger方程式

時間依存も含めたSchrödinger方程式は、

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

である。ポテンシャルが時間に依存しないとき、この方程式を満足する波動関数は次のように書ける。

$$\psi(x, t) = u(x) \exp\left[-i \frac{E}{\hbar} t\right] \quad (2)$$

ここで、空間部分の関数 $u(x)$ は、次の時間に依存しないSchrödinger方程式を満たす。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + V(x) u(x) = E u(x) \quad (3)$$

一般に波動関数 ψ はエネルギー演算子の固有関数、 E はそれに対応するエネルギー固有値である。しかし散乱状態においては、 E は連続的な値が許される。従って、散乱問題では、あるエネルギー値 E を持った入射波動関数がどのように散乱されるかを求めることになる。

2-2. 凸型ポテンシャル障壁での散乱

凸型をしたポテンシャル障壁を図1のようにとる。

$$\begin{cases} V(x) = 0, & (x < 0) \\ V(x) = V_0, & (0 \leq x \leq a) \\ V(x) = 0, & (x > a) \end{cases} \quad (4)$$

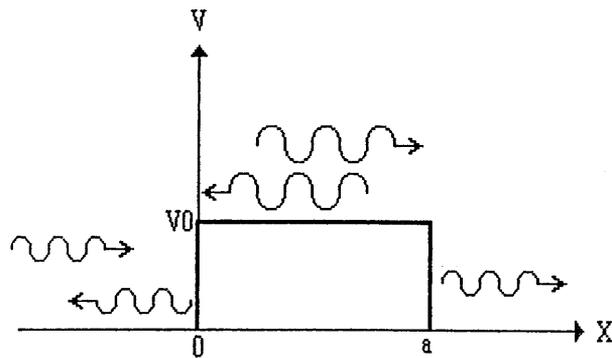


図1 凸型ポテンシャル障壁

このポテンシャルに $-\infty$ の遠方から、ある運動量で飛んでくる粒子があるものとする。古典論的に考えれば、 $E > V_0$ の場合は凸型ポテンシャルを完全に超え、 $E < V_0$ の場合ではそれによって完全に反射される。しかし、量子論では、その波動性のために、どちらの場合もポテンシャル周辺、内部での振る舞いは古典論とは違って来る。これはSchrödinger方程式を解くことによってはじめて理解される。解く時の注意は、ポテンシャルの高さとエネルギー値との大小により方程式の形が変わるので、場合分けが必要である。

(i) 入射粒子のエネルギー E がポテンシャルの高さ V_0 より大きい場合 ($E > V_0$)

この場合のSchrödinger方程式は次のようになり、

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} = Eu \quad (x < 0, x > a) \quad (5)$$

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} + V_0 u = Eu \quad (0 \leq x \leq a) \quad (6)$$

これらの方程式の一般解は次のように書ける。

$$u_L = A \exp[ikx] + B \exp[-ikx] \quad (x < 0) \quad (7)$$

$$u_i = C \exp[i\alpha x] + D \exp[-i\alpha x] \quad (0 \leq x \leq a) \quad (8)$$

$$u_R = F \exp[ikx] \quad (x > a) \quad (9)$$

$$\text{但し、} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$$

(7)式の第1項は入射波、第2項は $x=0$ でのポテンシャル壁による反射波をあらわす。また、ポテンシャル内部での解(8)式は x の正の方向と負の方向の波がありうることを示している。

(9)式は x の正の方向に進む、ポテンシャルを透過した波をあらわしている。

これらの解は $x=0$, $x=a$ で、滑らかにつながる条件を満足しなければならないことから、波の各成分の係数の比がもとまる。

$$\frac{B}{A} = \frac{(k^2 - \alpha^2)(1 - \exp[2i\alpha a])}{(k + \alpha)^2 - (k - \alpha)^2 \exp[2i\alpha a]} \quad (10)$$

$$\frac{C}{A} = \frac{2k(k + \alpha)}{(k + \alpha)^2 - (k - \alpha)^2 \exp[2i\alpha a]} \quad (11)$$

$$\frac{D}{A} = \frac{2k(\alpha - k) \exp[2i\alpha a]}{(k + \alpha)^2 - (k - \alpha)^2 \exp[2i\alpha a]} \quad (12)$$

$$\frac{F}{A} = \frac{4k\alpha \exp[ia(\alpha - k)]}{(k + \alpha)^2 - (k - \alpha)^2 \exp[2i\alpha a]} \quad (13)$$

これらから、反射率 $\left| \frac{B}{A} \right|^2$ 、透過率 $\left| \frac{F}{A} \right|^2$ をそれぞれ計算する。まず反射率は、

$$\left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left[1 + \frac{4E(E - V_0)}{V_0 \sin^2[\alpha a]} \right]^{-1} \quad (14)$$

同様に、透過率は、

$$\left| \frac{F}{A} \right|^2 = \left[1 + \frac{V_0^2 \sin^2[\alpha a]}{4E(E - V_0)} \right]^{-1} \quad (15)$$

予想されるように、 $\left| \frac{B}{A} \right|^2 + \left| \frac{F}{A} \right|^2$ を計算すると1となる。これは確率の保存を表す。

(ii) 入射粒子のエネルギー E がポテンシャルの高さ V_0 より低い場合 ($E < V_0$)

この場合、古典論で考えると、粒子は全て反射するが、量子論では透過する成分も表れる点特徴的である。運動方程式を解く場合、(i)の場合と違うのはポテンシャル内部での ($0 \leq x \leq a$) Schrödinger方程式における E と V_0 の関係である。

$$\frac{d^2 u}{dx^2} = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} u \quad (0 \leq x \leq a) \quad (16)$$

各領域におけるSchrödinger方程式の解は、 $\beta = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$ とおくと次のようになる。

$$u_L = A \exp[ikx] + B \exp[-ikx] \quad (x < 0) \quad (17)$$

$$u_i = C \exp[-\beta x] + D \exp[\beta x] \quad (0 \leq x \leq a) \quad (18)$$

$$u_R = F \exp[ikx] \quad (x > a) \quad (19)$$

これらの解が連続条件を満足することから、散乱係数 $A \sim F$ を決めるのだが、(i)の結果を利用して係数を求めることができる。すなわち、(i)の場合と違うのはポテンシャル内部で α が虚数になることだけであるから、 $\alpha \rightarrow i\beta$ とすれば、(i)の結果はそのまま使える。実際、各領域における解もそのようになっているのは容易に確かめられる。したがって $E < V_0$ の場合の散乱係数の比は、

$$\frac{B}{A} = \frac{(k^2 + \beta^2)(1 - \exp[-2\beta a])}{(k + i\beta)^2 - (k - i\beta)^2 \exp[-2\beta a]} \quad (20)$$

$$\frac{C}{A} = \frac{2k(k + i\beta)}{(k + i\beta)^2 - (k - i\beta)^2 \exp[-2\beta a]} \quad (21)$$

$$\frac{D}{A} = \frac{2k(i\beta - k) \exp[-2\beta a]}{(k + i\beta)^2 - (k - i\beta)^2 \exp[-2\beta a]} \quad (22)$$

$$\frac{F}{A} = \frac{4i\beta k \exp[ia(i\beta - k)]}{(k + i\beta)^2 - (k - i\beta)^2 \exp[-2\beta a]} \quad (23)$$

となる。透過率をもとめれば、

$$\left| \frac{F}{A} \right|^2 = \left[1 + \frac{V_0^2 \sinh^2[\beta a]}{4E(V_0 - E)} \right]^{-1} \quad (24)$$

このように $E < V_0$ でも透過率は0ではないので、これをトンネル効果(tunneling)と呼ぶ。

(iii) 入射粒子のエネルギー E がポテンシャル V_0 と同じ場合 ($E = V_0$)

ポテンシャル外部のSchrödinger方程式はこれまでと同じだが、その内部では少し異なる。この場合の解を書き下すと、

$$u_L = A \exp[ikx] + B \exp[-ikx] \quad (x < 0) \quad (25)$$

$$u_i = C + Dx \quad (0 \leq x \leq a) \quad (26)$$

$$u_R = F \exp[ikx] \quad (x > a) \quad (27)$$

となり、これらが $x=0, x=a$ で連続条件を満足することから、散乱係数の比がもとまる。

$$\frac{B}{A} = \frac{ika}{ika - 2} \quad (28)$$

$$\frac{C}{A} = \frac{2(1 - ika)}{2 - ika} \quad (29)$$

$$\frac{D}{A} = \frac{2ika}{2 - ika} \quad (30)$$

$$\frac{F}{A} = \frac{2 \exp[-ika]}{2 - ika} \quad (31)$$

この場合における透過率を計算すると、

$$\left| \frac{F}{A} \right|^2 = \left[1 + \frac{a^2 m V_0}{2\hbar^2} \right]^{-1} \quad (32)$$

この結果が、(15)式で $E \rightarrow V_0$ にしたときと同様な結果を与えることは容易に確かめることができる。これらの結果をもちいて、凸型ポテンシャルの場合の確率密度を描き、反射、透過率のグラフを図2に描いた。

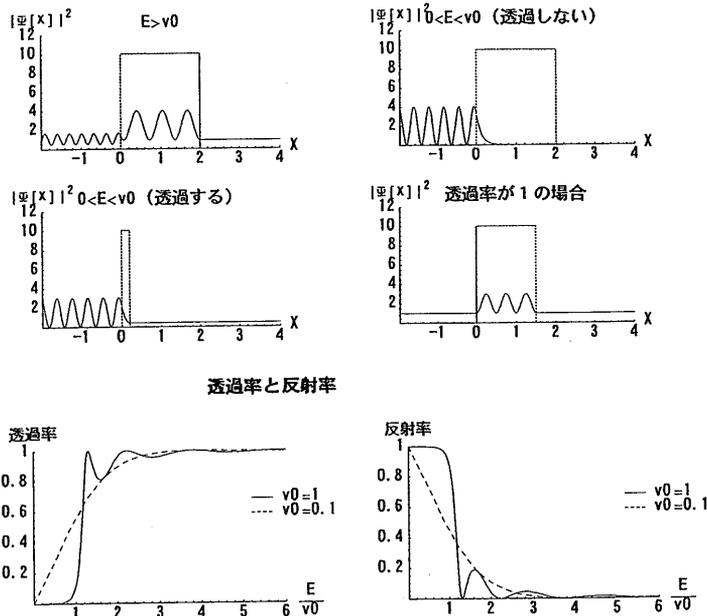


図2 凸型ポテンシャルでの散乱

入射波のエネルギー E がポテンシャルの高さ V_0 よりも相対的に小さくなると、反射波の振幅が大きくなり、 $x < 0$ での存在確率が大きくなる。しかし、凸型ポテンシャルの幅が有限なので、しみだしが必ず起こり、結果として波を透過させることができる。その場合も示してある。 $E < V_0$ で透過する場合、透過しない場合を比べると、ポテンシャル左側の確率密度はいくらか、透過する場合の方が小さくなっているのがわかる。その分ポテンシャルの右側へ存在する確立が大きくなったのである。また、ポテンシャルが存在していても、透過率が1ということで、波は左方から右方と素直に通過していくイメージを考えがちだが、ポテンシャル内部では反射波が存在していることがみてわかる。その結果、ポテンシャル内部で入射波と反射波が干渉し振幅が大きくなっている（このことは、透過率が1より小さい場合も同様である）。これらの波の進行を粒子の進行と捉えると、ポテンシャル内部では左方、右方に進む粒子が両方存在していることになる。

透過率、反射率のグラフはポテンシャルの高さが $V_0 = 1, V_0 = 0.1$ の場合を示している。 E が相対的に V_0 よりも大きいところで、透過率が1になることがみてわかる。これは、(15)において、 $\sin[\alpha a] = 0$ となる場合で、すなわち

$$\alpha a = \pi, 2\pi, \dots = n\pi \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (33)$$

のとき、ポテンシャル内部での波長を $\lambda = \frac{2\pi}{\alpha}$ とすると、

$$2a = n \frac{2\pi}{\alpha} = n\lambda \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (34)$$

を満足するときに、透過率は1となる。つまり、ポテンシャルの幅 a が半波長の整数倍になるときに、完全に透過するのである。量子力学の波動性の干渉効果の興味深い現象例である。半導体等でのトンネル効果等で実証されれば、非常に面白いと思われる。

2-3. 井戸型ポテンシャル

次に障壁とは逆の井戸型ポテンシャル図3を考える。

$$\begin{cases} V(x) = 0 & (x < 0) \\ V(x) = -V_0 & (0 \leq x \leq a) \\ V(x) = 0 & (x > a) \end{cases} \quad (35)$$

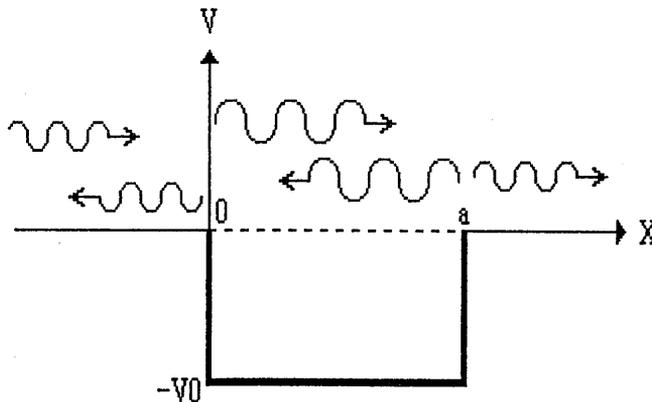


図3 井戸型ポテンシャル

この場合はこれまでの議論のように E と V_0 の大小関係を考えることなく、次のように各領域の Schrödinger 方程式を書ける。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} = Eu \quad (x < 0, x > a) \quad (36)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} + V_0 u = Eu \quad (0 \leq x \leq a) \quad (37)$$

但し、 $V_0 < 0$ である。

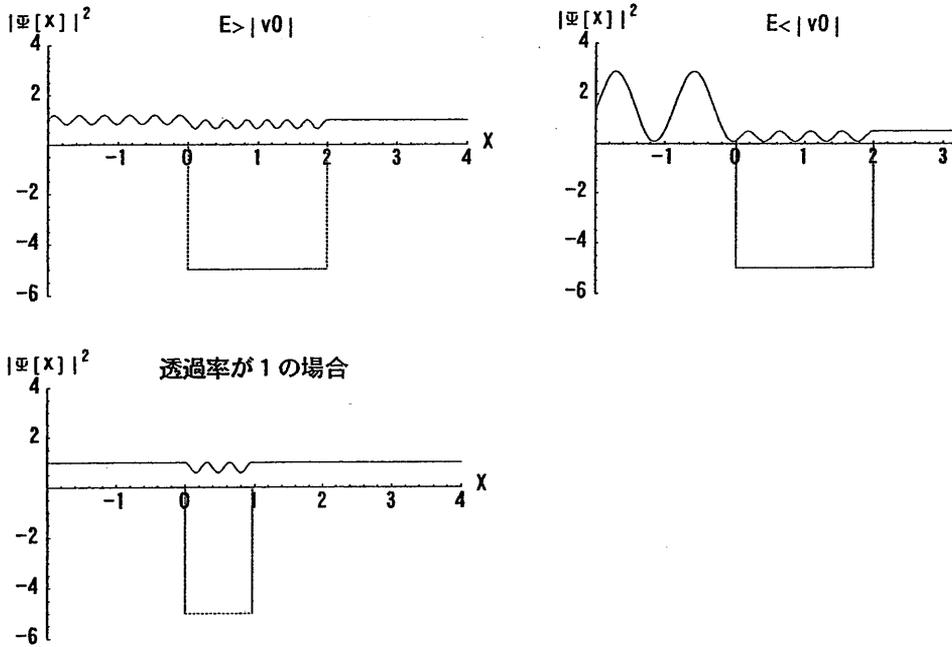


図4 井戸型ポテンシャルでの散乱

これは (5)、(6) 式と同じ形をしている。従って、その結果がそのまま適用できる。解を書き下すと、

$$u_L = A \exp[ikx] + B \exp[-ikx] \quad (x < 0) \quad (38)$$

$$u_i = C \exp[i\alpha x] + D \exp[-i\alpha x] \quad (0 \leq x \leq a) \quad (39)$$

$$u_R = F \exp[ikx] \quad (x > a) \quad (40)$$

$$\text{但し、} k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}, \quad V_0 < 0$$

となり、散乱係数間の比は、

$$\frac{B}{A} = \frac{(k^2 - \alpha^2)(1 - \exp[2i\alpha a])}{(k + \alpha)^2 - (k - \alpha)^2 \exp[2i\alpha a]} \quad (41)$$

$$\frac{C}{A} = \frac{2k(k + \alpha)}{(k + \alpha)^2 - (k - \alpha)^2 \exp[2i\alpha a]} \quad (42)$$

$$\frac{D}{A} = \frac{2k(\alpha - k) \exp[2i\alpha a]}{(k + \alpha)^2 - (k - \alpha)^2 \exp[2i\alpha a]} \quad (43)$$

$$\frac{F}{A} = \frac{4k\alpha \exp[ia(\alpha - k)]}{(k + \alpha)^2 - (k - \alpha)^2 \exp[2i\alpha a]} \quad (44)$$

注意すべきことは $V_0 < 0$ だということである。

前節2-2と同様に、これらの結果をもちいて、井戸型ポテンシャルの場合の確率密度を図4に示す。この場合もこれまでと同様に、入射波のエネルギー E がポテンシャルの高さ V_0 より相対的に小さくなると、反射波の振幅が大きくなり、その結果 $x < 0$ の確率密度が大きくなるのがわかる。また、階段型 (引力) ポテンシャルと同様に引力ポテンシャルであるが、やはり、境界面で波は反射されていることが古典論とは異なる。さらに、波の進行を粒子の進行として考えると、粒子は井戸内部に捉えられ、その両端で反射していると考えられることができる。

3. 一次元散乱問題の時間依存な取り扱い

これまでの立場は、ある入射粒子のエネルギー (入射運動量のある特定値) に対応する、時間に依存しないSchrödinger方程式の定常解を利用して様々なポテンシャルによる散乱について考えた。それらの解で記述される定常状態の場合、その確率振幅の値は時間について変化することはない。つまり、定常状態にあるということは、その粒子のエネルギーが決まっているということである。言い換えると粒子は決まった運動量を持っているということである。粒子の運動量の不確定さが零であるとき、その位置の不確定さが無限大であることは、量子力学の基本原則、不確定性原理の教えるところである。つまりは、空間内のあらゆる位置で粒子を発見する確率があり、しかも時間的に変化しないということである。このことは一方では、学生達にとって、衝突の直感的イメージを描きにくいことが欠点であるといえる。そこで次に我々が議論するのは、空間内を1個の粒子が運動していて、それがポテンシャルと遭遇したときにどのような振る舞いをするかを、時間的に追跡する立場である。この立場のほうが衝突のイメージに合致しており、直感的な理解がし易いと思われる。

この立場で分析を進めるためには、まず空間内に局在した入射粒子を、量子力学的に表現する必要がある。一般に我々の考える古典的粒子は“どこかに場所を占めている小さなもの”であり、その位置と運動量は同時に測定可能である。しかし、量子論では、先に述べたようにそれらは同時には測定することはできず、ある不確定さが生じるのである。したがって、ミクロな系を論ずる上で、その不確定性を満足するような描像、波束、を使って議論を進めることが適当であろう。すなわち、波動関数を波束を使って表現し、その時間変化を調べていくのである。

議論の出発は、時間に依存するSchrödinger方程式であるが、たとえ一次元の場合であってもこの偏微分方程式を解析的に解くことは容易ではない。しかし、このやり方では1個の粒子

のポテンシャルとの衝突問題，すなわち波束とポテンシャルとの散乱過程を時間的に調べることができる。つまり，それがポテンシャルに反射されたり，ポテンシャル障壁を透過したりする時間経過を明らかにすることができる。これは学生の量子力学の理解にとって非常に有効であると思われる。

この問題を分析する方法としては，時間に依存するSchrödinger方程式の解を運動量の固有関数で展開する方法や，微分方程式を差分方程式で近似する，つまり数値積分する方法等がある。今回は計算時間のより速いと考えられる，固有関数による展開法を用いる。

3-1. 最小波束

ここでは，量子論における空間に局在化した粒子の描像—波束—について少し説明する。波束を使うことによって粒子が他の場所よりもその場所に発見されやすくなっている状態を記述することができ，その時間による移り変わりも調べることができる。そのような状態を表すには，少し違っている色々な波数 k をもつ波の関数 $\exp[ikx]$ を重ね合わせればよい。つまり，少し違う運動量を持つ状態をたし合わせるということである。このことはちょうど色々な波長の波を混ぜ合わせることに言い換えることができる。不確定性原理を満足するような最小の波束の形は，粒子に外力が働く場合もそうでない場合も同じ構造をしている。このことは位置と運動量の不確定さの積の最小値，

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (45)$$

を求めるときの必要条件から導くことができる。最小波束の波動関数の結果だけ書くと，

$$\psi(x) = \left[2\pi (\Delta x)^2 \right]^{-\frac{1}{4}} \exp \left[-\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{4 (\Delta x)^2} + \frac{i \langle p \rangle x}{\hbar} \right] \quad (46)$$

のようになる。但し， $\langle x \rangle$ は粒子の平均位置， $\langle p \rangle$ はその平均運動量を示している。

3-2. 運動量の固有関数による展開

我々はSchrödinger方程式を満足する波動関数を固有関数で展開する方法で解く。この節ではその方法について簡単に説明する。

我々が考えているのは，色々なエネルギー状態を重ね合わせた波束を記述する波動関数である。これは定常状態のエネルギー固有関数を使って展開することで，もとめることができる。つまり，

$$\psi(x, t) = \sum_E A_E u_E(x) f_E(t) \quad (47)$$

自由粒子に対しては，運動量の固有関数はエネルギーの固有関数でもあるから，

$$\psi(x, t) = \sum_k A_k u_k(x) \exp \left[-\frac{iE_k t}{\hbar} \right] \quad (48)$$

と書くことができ，これはFourier級数とよばれる。また，(48)は時間に依存するSchrödinger方程式(1)を満たす解であることは，それをその方程式に代入すれば容易に確かめられる。

具体的には、

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (49)$$

ならば、(48) は (1) の解になっている。(49) は自由粒子の全エネルギーであることは次式のように書くと直ぐわかる。

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{P^2}{2m} \quad (50)$$

結局波束の運動をもとめる問題は、初期状態、例えば $t=0$ における波動関数の展開係数をもとめ、それから、(48) と (49) を使って他の任意の時刻での波動関数をもとめることに帰着する。 A_k をもとめるには、固有関数の直交性から、次の式から求まる。

$$A_k = \int u_k^*(x) \psi(x, 0) dx \quad (51)$$

この場合、積分領域は固有関数を規格化した範囲をとる。

3-3. 最小波束の時間による変化

この節では、前節3-2で議論した、運動量固有関数を展開する方法で、具体的な系での時間に依存する Schrödinger 方程式の解をもとめる。

(i) 自由粒子の場合

もっとも簡単で、基本的な例は、自由粒子の時間変化をあらわす波動関数をもとめることである。波動関数 ψ の初期条件として、

$$\psi(x, 0) = \left[2\pi (\Delta x)^2 \right]^{-\frac{1}{4}} \exp \left[-\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{4 (\Delta x)^2} + \frac{i \langle p \rangle x}{\hbar} \right] \quad (52)$$

とする。これは、 $t=0$ で自由粒子を表す波束が $\langle x \rangle$ を中心とし、運動量の平均が $\langle p \rangle$ で動いていることを表している。固有関数が一辺の長さ L の箱によって規格化されているとすれば、(51) より展開係数 A_k は、

$$\begin{aligned} A_k &= \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \left\{ L^{-\frac{1}{2}} \exp[ikx] \right\} \left\{ \left[2\pi (\Delta x)^2 \right]^{-\frac{1}{4}} \exp \left[-\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{4 (\Delta x)^2} + \frac{i \langle p \rangle x}{\hbar} \right] \right\} dx \\ &= \left[\frac{8\pi (\Delta x)^2}{L^2} \right]^{\frac{1}{4}} \exp \left[-\left(\frac{\langle p \rangle}{\hbar} - k \right)^2 (\Delta x)^2 + i \left(\frac{\langle p \rangle}{\hbar} - k \right) \langle x \rangle \right] \quad (53) \end{aligned}$$

ここに、 L は非常に大きくとっても一般性は失われないから $L \rightarrow \infty$ として、積分した結果が2行目の式である。

これで展開係数はもとまったので、任意の時刻における波動関数は次のように書ける

$$\psi(x, t) = \sum_k A_k u_k(x) \exp\left[-\frac{iE_k t}{\hbar}\right] \quad (54)$$

先程述べたように、 L はいくらでも大きくとれるので、

$$k = \frac{2\pi n}{L} \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (55)$$

なる関係より、隣接する k との差を Δk とすると、

$$\Delta k = \frac{2\pi}{L} \quad (56)$$

と書け、 L を十分に大きくすれば k は連続的に変化しているとみなせる。したがって、(48) の Fourier 級数は Fourier 積分に書きなおせる。

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{1}{\Delta k} \sum_k A_k u_k(x) \exp\left[-\frac{iE_k t}{\hbar}\right] \Delta k \\ &= \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A_k u_k(x) \exp\left[-\frac{iE_k t}{\hbar}\right] dk \end{aligned} \quad (57)$$

この式から、(53) で計算した展開係数 A_k 、運動量の固有関数 u_k を使って ψ をもとめる。つまり、

$$\psi(x, t) = \left[\frac{(\Delta x)^2}{2\pi^3}\right]^{\frac{1}{4}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\left(\frac{\langle p \rangle}{\hbar} - k\right)^2 (\Delta x)^2 + i\left(\frac{\langle p \rangle}{\hbar} - k\right)\langle x \rangle + ikx - i\frac{\hbar k^2 t}{2m}\right] dk \quad (58)$$

右辺の定積分の計算結果は、

$$\psi(x, t) = (2\pi)^{-\frac{1}{4}} \left\{ (\Delta x) + \frac{i\hbar t}{2m} \right\}^{-\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{\left(\frac{t\langle p \rangle}{m} + \langle x \rangle - x\right)^2}{4\left((\Delta x)^2 + \frac{i\hbar t}{2m}\right)} + \frac{i\langle p \rangle}{\hbar} x - \frac{i\langle p \rangle^2 t}{2m\hbar}\right] \quad (59)$$

また、その確率密度は、

$$|\psi(x, t)|^2 = (2\pi)^{-\frac{1}{2}} \left\{ (\Delta x)^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 (\Delta x)^2} \right\}^{-\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{\left(\frac{t\langle p \rangle}{m} + \langle x \rangle - x\right)^2}{2\left((\Delta x)^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 (\Delta x)^2}\right)}\right] \quad (60)$$

となる。つまり、(53) は $t=0$ で (46) の形をしていた波束の時間による確率密度の変化を表している。もっと簡単な例は、 $\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$ とした場合である。この場合の波束は最初 $x=0$ を中心とし、平均運動量が 0 という状態を表す。

実際に (60) を使って、図 5 にシミュレーションの結果を示した。パラメータは $\langle x \rangle = 0, \langle p \rangle = 5$

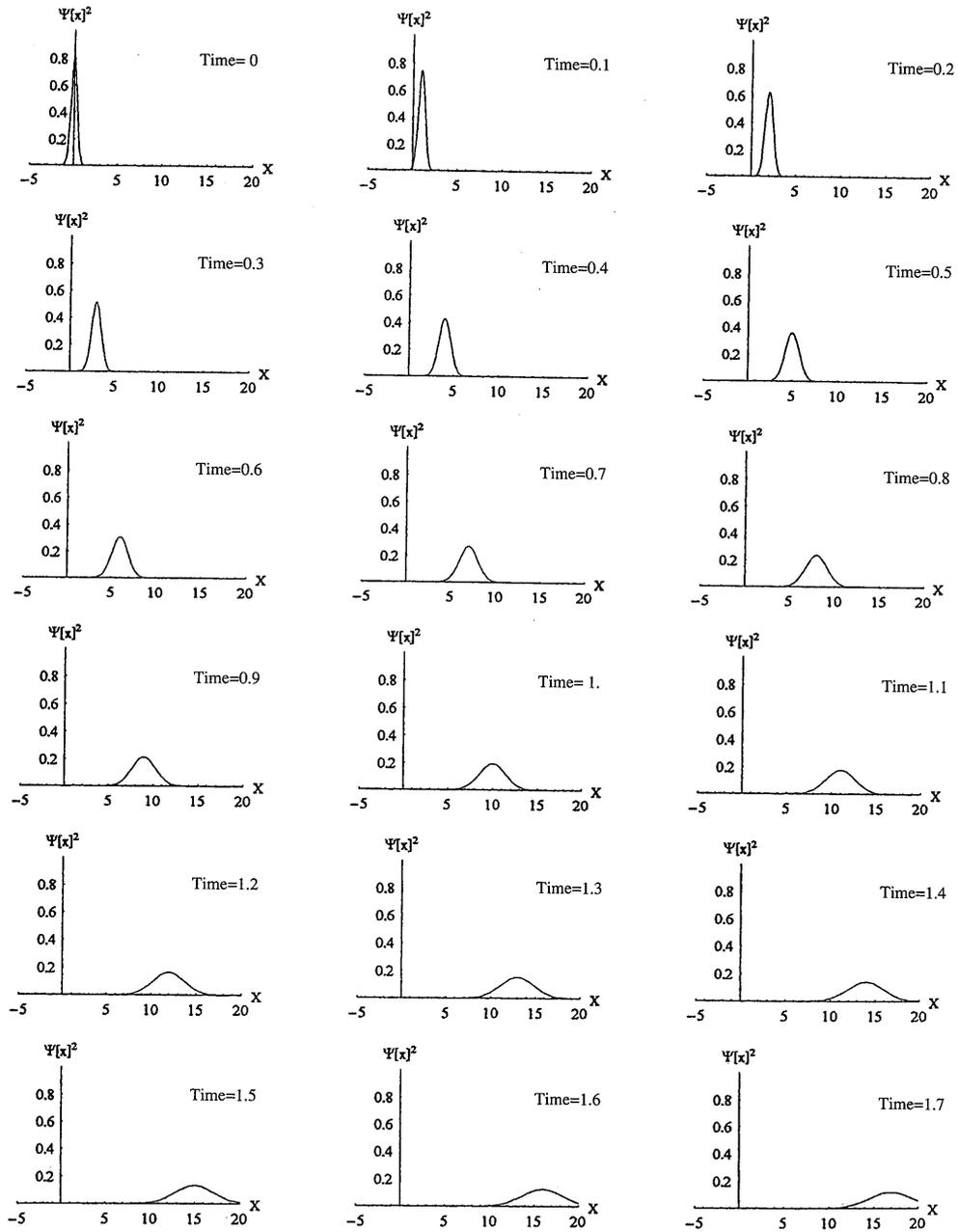


図5 最少波束の時間変化 ($\langle p \rangle = 5$)

とした。縦軸には確率密度、横軸には位置をとって、各コマの右上には時間間隔が示してある。これらの描画は、実際にはパソコンのアニメーションとして表示されるが、本文では都合上、アニメーションの各コマに相当するものを配列して表示している。図5では、波束の中心が x 軸正の方向へシフトしながら広がっていく様子を見ることが出来る。また、これらの状態より、位置の不確定さ Δx を大きくすると、波束が先程の状態よりもゆっくりと広がっていく様子を見ることが出来るが、これは、 Δx を大きくするために、運動量の不確定さ Δp が小さくなったためだと考えることができる。

(ii) ポテンシャルがある場合

(i) では、1次元の自由粒子を波束を使って表現しその運動の様子を議論した。同様な議論を階段型ポテンシャルがある場合に適用してみる。やはり、出発は時間に依存するSchrödinger方程式であるが、これを分離定数 E を使って時間部分と空間部分に分離するには、ポテンシャルが時間の関数でないことが必要である。したがって、ポテンシャルがある場合でも、それが時間に依存せず、位置だけの関数であることが必要である。具体例として、階段型ポテンシャル（または井戸型ポテンシャルの階段部分）について考えてみる。

この場合の時間に依存するSchrödinger方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_L(x,t)}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \Psi_L(x,t)}{\partial t} \quad (x < 0) \quad (61)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_R(x,t)}{\partial x^2} + V_0 \Psi(x) = i\hbar \frac{\partial \Psi_R(x,t)}{\partial t} \quad (x > 0) \quad (62)$$

となる。但し、 Ψ の添字は原点よりLeft, Rightの意味である。

したがって、(61)、(62)を満足する波動関数は、(i)の場合と同様にして、Fourier級数もしくはFourier積分で表現できる。

$$\begin{aligned} \Psi_{L,R}(x,t) &= \sum_k A_k u_{L,R}(x,k) f(t,k) \\ &= \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A_k u_{L,R}(x,k) f(t,k) dk \end{aligned} \quad (63)$$

但し、 $u_{L,R}$ は幅 L の箱で規格化してある。展開係数 A_k は、自由粒子の場合で計算したものをい、積分することで波動関数をもとめることができる。しかし、被積分関数を書き下してみるとわかるが、ポテンシャルがある場合は、解析的に積分することは困難である。そこで今回は数値積分を行うことにする。

●積分区間の決定

数値積分を行うとなると積分範囲を考慮する必要がある。(63)式の物理的な意味は、色々なエネルギーを持つ波をたし合わせることであるが、これは色々な波数 k の波をたし合わせるこ

と同等である。つまり、無限個のエネルギー状態（無限個の波数 k ）をたし合わせるのであるが、実際問題として積分値に効いてくるのは有限の範囲を積分したものであることは容易にわかる。そこで数値積分を物理的に意味のある範囲で区切ることを考える。それには、展開係数 A_k の関数の形から考えればよい。

$$A_k \propto \exp \left[- \left(\frac{\langle p \rangle}{\hbar} - k \right)^2 (\Delta x)^2 + i \left(\frac{\langle p \rangle}{\hbar} - k \right) \langle x \rangle \right] \quad (64)$$

\exp の最初の項はガウス関数を表していることから、この関数はある値 k を中心として正規分布しており、ある有限な値でその関数値はほとんど零になってしまう。そのような k の値を、 $f[k] = \exp[-10]$ なる k として、積分範囲とすれば十分である。そのようにして決めた範囲をここでは $[k_1, k_2]$ とする。

● 積分区間の分割

上では、積分区間 $[k_1, k_2]$ を決める方法を述べたが、さらに実際の数値積分においては、波動関数の形の違いに対応するために、その積分区間を分割する必要があることを議論する。波束とポテンシャルの衝突を考えると、ポテンシャルの形はもちろん、入射波束の平均エネルギーを与えることになる。定常状態を扱う場合は、ある決まった入射エネルギーを与えるが、時間に依存する場合は、その平均エネルギーを与えるということが注意すべき点である。すなわち、いろいろな定常状態のエネルギーを混ぜあわせた結果が、入射波束の平均エネルギーである。これらのエネルギー値は正規分布しているため、ポテンシャルの高さ V_0 よりも大きいものもあれば小さいものもあるだろう。

時間に依存する状態を考えたときに、入射粒子のエネルギーとポテンシャルの高さ V_0 の大小関係によって、その固有関数 u の関数形が変わることを思い出してほしい。つまり、(63) 式の Fourier 積分を行うときに、足しあわす波のエネルギー E がポテンシャルの高さ V_0 より大きいか、小さいかを考慮して積分する必要がある。そこで、入射粒子のエネルギー E とポテンシャルの高さ V_0 が等しいときを考えると、

$$E = V_0 \iff \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = V_0 \iff k = \sqrt{\frac{2m V_0}{\hbar^2}} (\equiv k_0) \quad (65)$$

となるので（ここで、 E と V_0 が等しい時の k を k_0 と置いた。）、先程決定した積分範囲 $[k_1, k_2]$ を $[k_1, k_0]$ と $[k_0, k_2]$ に分割し積分を実行する。その結果 (63) の Fourier 積分は次のように書き換えることができる。

$$\Psi_{L,R}(x, t) = \frac{L}{2\pi} \left(\int_{k_1}^{k_0} A_k u_{L,R}(x, k) f(t, k) dk + \int_{k_0}^{k_2} A_k u_{L,R}(x, k) f(t, k) dk \right) \quad (66)$$

第一項はポテンシャルの高さより小さいエネルギーの波を足し合わせ、第二項はポテンシャルの高さより大きいエネルギーの波を足し合わせている。

これで、準備は整ったので実際に (64) 式を使って、凸型ポテンシャル、井戸型ポテンシャル等での散乱問題のアニメーションの結果を示す。

4. 井戸型ポテンシャルと凸型ポテンシャルでの散乱アニメーション

この節では、(64)式を使って、具体的に粒子のポテンシャルによる散乱をシミュレーションする。各シミュレーションの1コマ目の波束は、ポテンシャルに散乱される前の、ある時刻 t での粒子の存在確率を示し、各コマの右上のTimeが時間経過を示している。横軸には位置、縦軸にはポテンシャルエネルギー軸を重ねてある。ポテンシャルは破線で示されている。これらの描画は、アニメーションの各コマに相当するものを、適当な時間間隔で並べている。実際はアニメーションとしてパソコン上で提示する。

図6～9には、4種類のシミュレーションの結果を示すが、それらの初期条件を以下の表にまとめてある。但し、入射粒子の平均エネルギーを E_0 、ポテンシャルの高さを V_0 、幅を a としている。

表1 シミュレーションに用いたパラメーター

	E_0	V_0	a
Simulation①	10	-20	2
Simulation②	10	-20	4
Simulation③	10	10	2
Simulation④	10	20	2

Simulation①～④は、入射粒子の波束、ある時刻 $t=0$ での平均運動量 $\langle p \rangle$ 、平均位置 $\langle x \rangle = 5$ である、がポテンシャルに衝突し散乱される様子をシミュレーションしている。

Simulation①、②は井戸型ポテンシャル、引力の場合のポテンシャル、で①、②の違いはポテンシャルの幅だけである。両者に共通しているのは、ポテンシャルに衝突すると、その壁での反射波と入射波が干渉し複雑な波形が生じ、やがて左右に引きちぎられる（反射波と透過波に分かれそれぞれ進む）ことである。古典論的な粒子の描像からすれば、その粒子はこれらのポテンシャル内部では、引力を受け加速するのであるが、量子論ではその波動性のために散乱をすることが確かめられる。また、時刻 $t=0.5\sim 1.6$ でのポテンシャル内部の波束の複雑な波形は、 x 軸正方向へ進む波と、ポテンシャルの右側で反射された波が重ね合わされた結果であると考えられる。さらに、①、②を比べると後者の方は、波束が引きちぎられた後、 $t=1.7$ 以降、にポテンシャルの左側に二つの山がみられる。①、②の違いは井戸の幅であるが、後者の場合その幅を広げたために、ポテンシャルの右端による反射波が前者の場合より遅れて見られたと考えることができる。即ち、それらの二つの山で、左側のものはポテンシャルの左端で反射された波、右側のものはポテンシャルの右端で反射された波であると考えられる。

Simulation③、④は凸型ポテンシャル、斥力の場合のポテンシャル、で③、④の違いはポテンシャルの高さだけである。③の場合もやはり、ポテンシャルに衝突すると波束は散乱を始め、その後、左右に引きちぎられる。井戸型ポテンシャルと異なるのは、波束が引きちぎられた後に、凸型ポテンシャル内部にも波束が残る、ポテンシャル内部にも粒子の存在確率がある、という点である。これは、ポテンシャル内部に透過した波がその右端で反射され次に左端で反射され、それが再び右端で反射されるのが交互に起こった結果であると考えられる。また、③では波束がポテンシャルを超えることができたが、④ではその高さを2倍にすることで、波束がポテンシャルに反射される結果を得ることができた。つまり、入射粒子の平均エネルギーの2倍の高さのポテンシャルに衝突するシミュレーションを行ったのだが、この場合、古典論で考

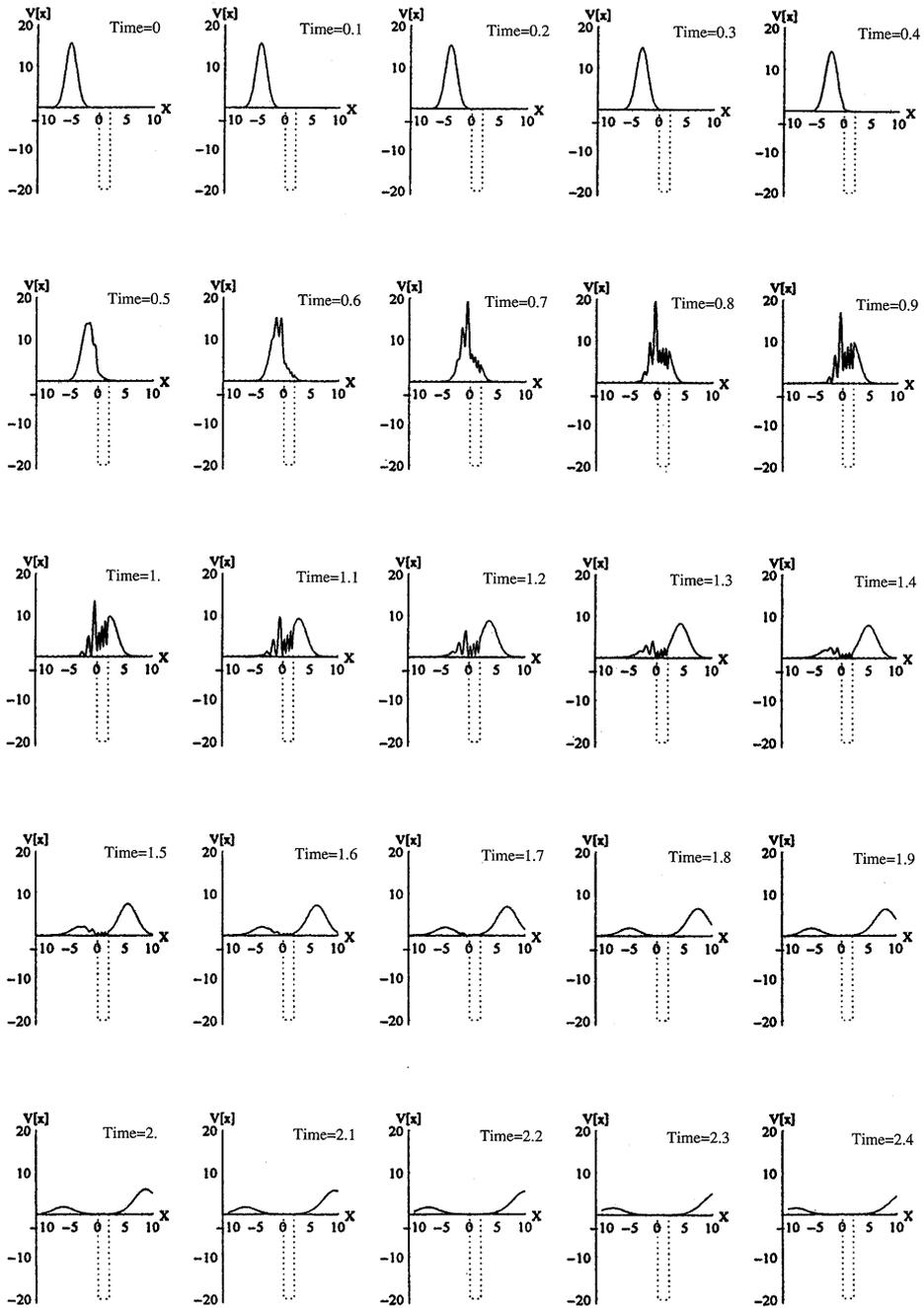


図 6 Simulation① ($E_0=10, V_0=-20, a=2$)

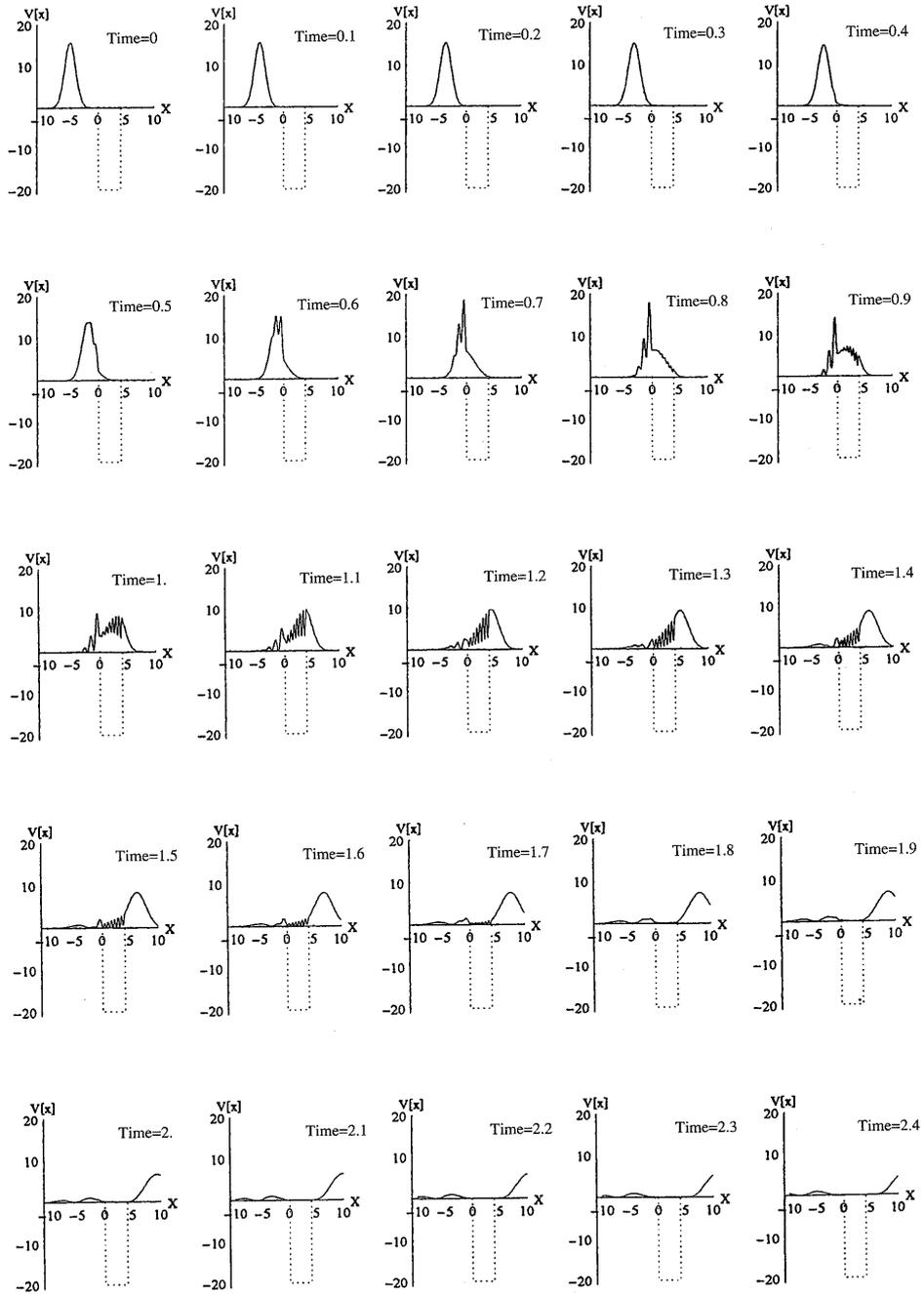


図7 Simulation② ($E_0=10, V_0=-20, a=4$)

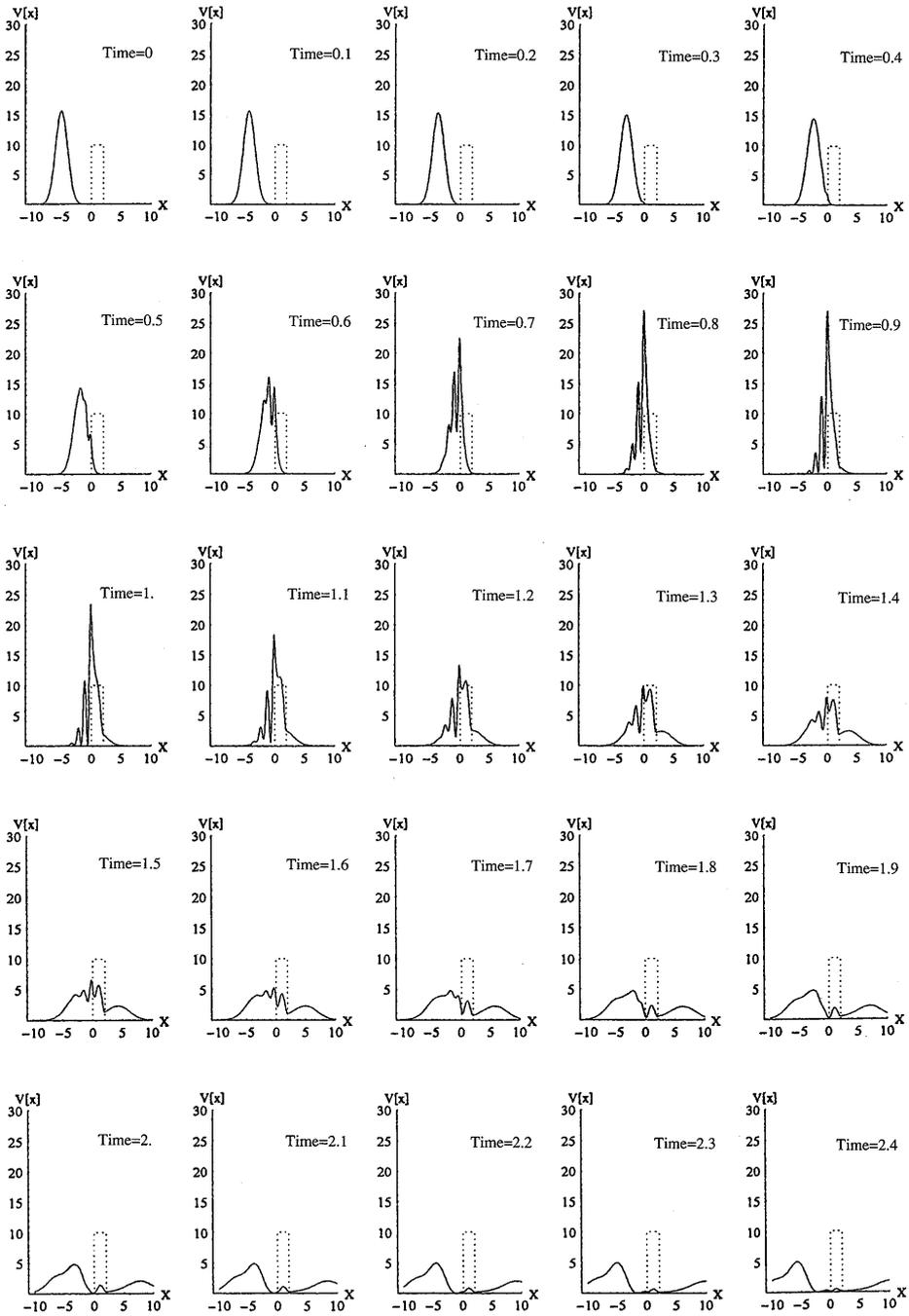


図 8 Simulation③ ($E_0=10, V_0=10, a=2$)

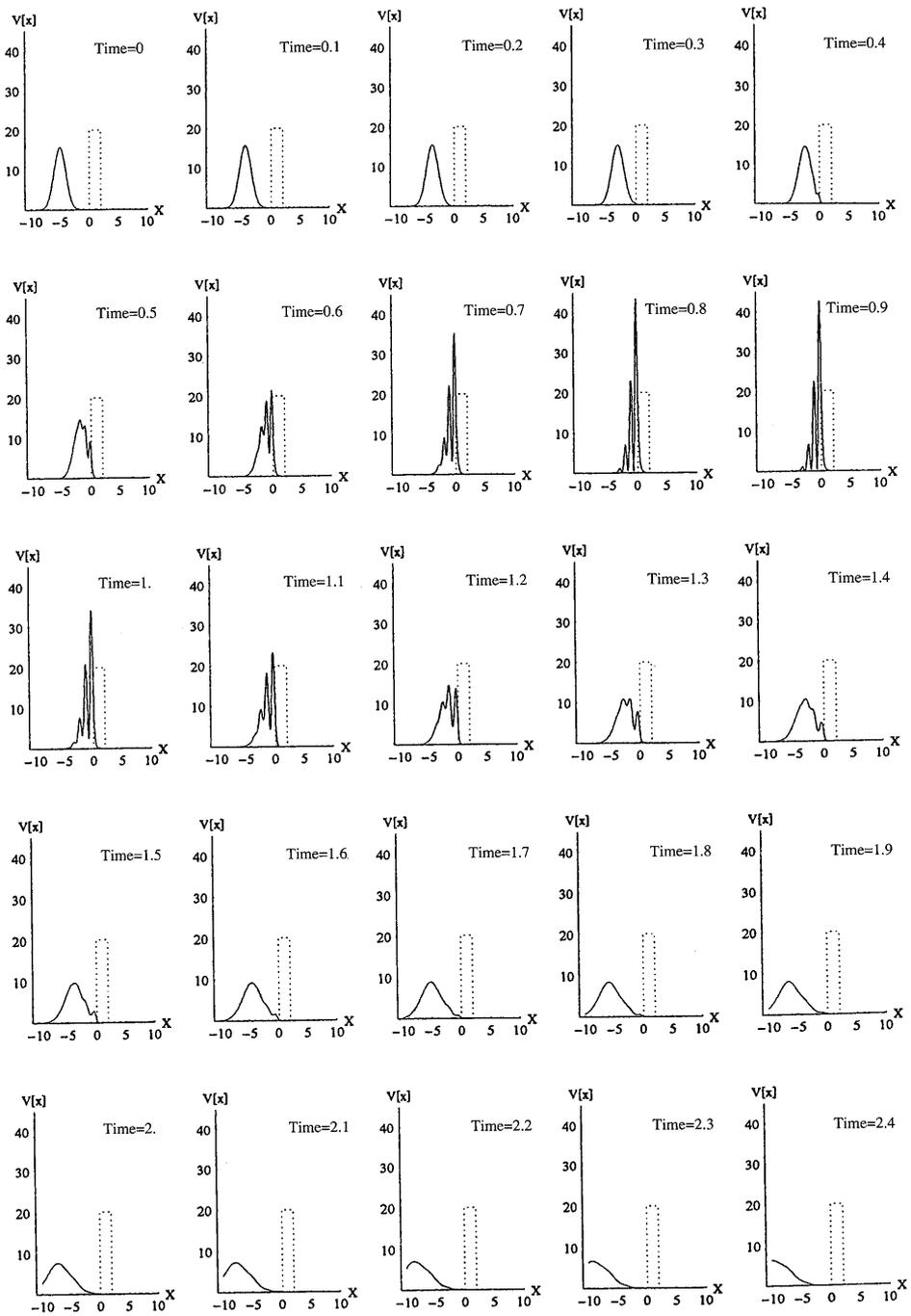


図9 Simulation④ ($E_0=10, V_0=20, a=2$)

えると完全に粒子は反射されてしまうが、量子論では非常に興味ある結果を示す。注目すべき点は、時刻 $t=0.5\sim 1.4$ を見ると、波束が反射されるときに、ポテンシャル内部に有限な確率密度が存在することである。つまり、トンネリングを確認することができた。

これらの他にも、付録のプログラムの説明にあるように、ポテンシャルの形や、入射粒子の平均エネルギーを自由に変化させて衝突のアニメーションを表示させることができる。これらのことは、学生が主体的に、興味をもって学習する上で重要な点でもある。

5. 考察

本論文では、量子力学的散乱問題のMathematicaを用いたシミュレーションのプログラムを開発した。取り扱う視点として、①時間に依存しない取り扱い、②時間依存の取り扱いの2つの立場で議論した。定常状態での議論は、解くべきSchrödinger方程式も簡単で、容易に解を求めることができ、散乱係数についての議論も容易である。しかし、学生が衝突というイメージをもつことができるかといえは、疑問が残る。時間に依存する取り扱いは、前者とは違って、解析的に解くことの困難な方程式を扱い、散乱係数の議論をすることも容易ではない。しかし、衝突のアニメーションを見る、もしくは作ることで、彼らの量子力学的散乱状態に対する直感的な理解が進むことが期待される。両者は互いに相補的であり、学生が量子力学を理解する上で、いろいろなアプローチを提示することは、非常に教育的意義のあることだと考える。

一般に、ミクロな系を記述するSchrödinger方程式を解析的に解くことは、非常にかぎられた系にしか当てはまらない。しかし、量子力学のいろいろな問題に興味を持った学生に、この問題を解くことは難しいと言って、その結果だけを示すことは、彼らが物理学を学んでいく上で、あまり望ましいことではなかろう。できるならば、なんらかの筋道を教示する方が望ましいと思われる。そこで我々は、この分野の研究では広く使われている数値解析的なアプローチをすることで、方程式を解いた。このことは学生が量子力学を学ぶ上で、もっと多くの問題や、現代的な問題にアプローチできる可能性を開く意味でも、意義があると考え。また、その結果得られた情報を、シミュレーションするなどして、物理的なモデルを直感的に理解する事もできるだろう。このような経験を踏んだ彼らが、将来、複雑な系に遭遇したときのアプローチの一つになることも期待される。

付録 散乱問題のアニメーションのプログラム

凸型または井戸型のポテンシャルでの散乱問題に対するアニメーションのプログラムのフローチャートを示す。系の基本的なパラメータは使用者が簡単に変更して、走らせることが可能である。

フローチャート	説 明
1. 関数のクリア 2. 定数のクリア	基本的には、プロセス1, 2は実行しなくてもよいが、ポテンシャルを変えたときに、波動関数, 散乱係数そしてパラメータの割り当てを解除するためにこの部分を実行する。
3. 関数の定義	展開係数 (G), 波動関数 (uL, ui, uR, f), 散乱係数 (B, C, D, F), 伝播係数 (α, β) を定義する。但し、添字の1は $E > V_0$, 2は $E < V_0$, 3は $E = V_0$ の場合を示している。井戸型ポテンシャルの場合は常にであるので添字に1のついたものを使えばよい。それぞれの関数の詳細は節2-2, 3参照
4. 初期値の設定	パラメータの設定をする。 Δx : 粒子の位置の不確かさ, m : 粒子の質量, \hbar : Planck定数, p_0 : 入射粒子の平均エネルギー, x_0 : 入射粒子の平均位置, v_0 : ポテンシャル壁の高さ, a : ポテンシャルの幅。井戸型の場合は, v_0 の値を負にすればよい。
5. 積分範囲の決定	3-3 (ii) で議論した積分範囲 $[k_1, k_0]$ と $[k_0, k_2]$ を決定する。井戸型の場合は, 積分範囲は分割する必要はないので, $[k_1, k_2]$ でよい。詳細の説明は節3-3参照。
6. 数値積分	① 5で得られた積分範囲で, 数値積分を行う。このとき, x 座標と時刻 t を代入するが, 我々は, ポテンシャルとの衝突前後で波動関数の様子を詳しく知りたいので, ポテンシャルの近くでは x 座標の刻みを細かくして計算している。関数の説明をすると, $LLpusai: [x, -10, -5, 0.1]$ での数値解 (x 軸の $-10 \sim -5$ までを 0.1 刻みで計算した) 同様に, $LRpusai: [x, -5, 0, 0.05]$, $ipusai: [x, 0, a, 0.05]$, $Rpusai: [x, 0, 10, 0.1]$ 。また, 時刻 $t = 0 \sim 3$ までを 0.1 で刻んでいる。 ② 座標 x , 時刻 t での波動関数の確率密度を計算 (上の結果の絶対値の二乗を計算する) し, 時刻 t での {座標, 確率密度} のリストを作る。凸型, 井戸型では, ポテンシャルの左側 ($x < 0$), 内部 ($0 \leq x \leq a$), 右側 ($x > a$) の3つのリストが作られる。これらのリストをプロットすれば, ある時刻における確率密度の分布を描くことができる。
7. リストの結合	6で得られた3つのリストを, 同時刻において結合する。
8. ポテンシャルの表示	ポテンシャルを描く。今回はListPlotを使っているが, ポテンシャルの関数を作って描くことも可能である。
9. 波動関数のアニメーション	7で得られた数値解のリストを, 時刻 $t = 0 \sim 3$ で, 0.1 ごとに描く。これらと, 8で描いたポテンシャルと同時に表示させると, アニメーションの各コマが完成する。アニメーションするときには, 任意のコマをダブルクリックすればよい。

参考文献

- 1) L. I. Schiff, 「量子力学」 吉岡書店
- 2) R. P. Feynman 「ファインマン物理学Ⅴ 量子力学」 岩波書店
- 3) S. Wolfram 「Mathematica ブック 第3版」 トッパン
- 4) N. Blachman 「Mathematica 実践的アプローチ」 トッパン