階段型障 2 :steppot2-qa100126.tex

次のような一次元の階段型ポテンシャル障壁に左側から、エネルギー E の粒子（質量 m）が進入する。エネルギー E がその障壁 V_0 よりも高い（$E > V_0$）の場合以下の問に答えよ。ただし、プランク定数を $\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}$ とする。

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x \leq 0) \\ V_0 & (x > 0) \end{cases}$$

1. 領域 I（$x \leq 0$）, 領域 II($x > 0$) ごとにシュレディンガー方程式とその一般解を記せ。
2. 有限の大きさのポテンシャル障壁の境界で、波動関数は連続、かつ微分係数が等しいという境界条件より、特殊解の積分定数の比を求めよ。
3. 入射波に対する確率流れ密度 J_{inc}、反射波に対する確率流れ密度 J_{ref}、透過波に対する確率流れ密度 J_{trans} を計算せよ。ただし、波動関数（またはその部分）ψ_a に対する確率流れ密度（の x 成分）$J_x(\psi_a)$ は次のように定義される：
$$J_x(\psi_a) \equiv \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi_a^*\frac{\partial\psi_a}{\partial x} - \frac{\partial\psi_a^*}{\partial x}\psi_a\right), \ (i : \text{純虚数}) \tag{1}$$
4. 反射率 R、透過率 T、およびそれらの和を計算せよ。
5. $E > V_0$ の場合には、古典物理学的な粒子は領域 I($x \leq 0$) には反射されないはずであるが、今の場合にはどうか。

（解答例）

1. 領域 I($x \leq 0$) におけるシュレディンガー方程式と一般解
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_I = E\psi_I. \tag{2}$$
$$\rightarrow \frac{d^2}{dx^2}\psi_I = -k^2\psi_I \tag{3}$$
$$k \equiv \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (k: \text{波数}) \tag{4}$$
$$\psi_I(x) = A\mathrm{e}^{ikx} + B\mathrm{e}^{-ikx}.(\mathrm{A}, \mathrm{B} : \text{任意の積分定数}) \tag{5}$$
（最後の式の右辺の第一項は右向き平面波、すなわち入射波に対応する。同様に、第二項は反射波に対応する。）領域 II($x > 0$) におけるシュレディンガー方程式と一般解
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_{II} + V_0\psi_{II} = E\psi_{II} \tag{6}$$
$$\rightarrow \frac{d^2}{dx^2}\psi_{II} = -k'^2\psi_{II} \tag{7}$$
$$k' \equiv \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}} \tag{8}$$
$$\psi_{II}(x) = C\mathrm{e}^{ik'x}.(\mathrm{C} : \text{任意の積分定数}) \tag{9}$$
（同様に、透過波に対応する。）

2. 題意より

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \to A + B = C \tag{10}$$

$$\psi_I'(0) = \psi_{II}'(0) \to k(A - B) = k'C \tag{11}$$

$$\text{これらの式より}\frac{B}{A} = \frac{k - k'}{k + k'},\ \frac{C}{A} = \frac{2k}{k + k'} \tag{12}$$

(13)

3. 確率流れ密度の計算 (inc 入射,ref 反射,trans 透過)

$$\begin{aligned}
J_{\mathrm{inc}} &\equiv \frac{\hbar}{2mi}[(A\mathrm{e}^{ikx})^* \frac{\partial}{\partial x}(A\mathrm{e}^{ikx}) - (A\mathrm{e}^{ikx})\frac{\partial}{\partial x}(A\mathrm{e}^{ikx})^*] \\
&= \frac{\hbar k}{m}|A|^2. && (14) \\
J_{\mathrm{ref}} &\equiv \frac{\hbar}{2mi}[(B\mathrm{e}^{-ikx})^* \frac{\partial}{\partial x}(B\mathrm{e}^{-ikx}) - (B\mathrm{e}^{-ikx})\frac{\partial}{\partial x}(B\mathrm{e}^{-ikx})^*] \\
&= -\frac{\hbar k}{m}|B|^2, && (15) \\
J_{trans} &\equiv \frac{\hbar}{2mi}[(C\mathrm{e}^{ik'x})^* \frac{\partial}{\partial x}(C\mathrm{e}^{ik'x}) - (C\mathrm{e}^{ik'x})\frac{\partial}{\partial x}(C\mathrm{e}^{ik'x})^*] && (16) \\
&= \frac{\hbar k'}{m}|C|^2. && (17)
\end{aligned}$$

4. 反射率 R と透過率 T の計算 (ref 反射,trans 透過)

$$\begin{aligned}
R &\equiv \frac{-J_{\mathrm{ref}}}{J_{\mathrm{inc}}} \\
&= |\frac{B}{A}|^2 \\
&= \left(\frac{k - k'}{k + k'}\right)^2, && (18) \\
T &\equiv \frac{J_{\mathrm{trans}}}{J_{\mathrm{inc}}} \\
&= \frac{k'}{k}|\frac{C}{A}|^2 \\
&= \frac{4kk'}{(k + k')^2}. && (19) \\
\to R + T &= 1.0. && (20)
\end{aligned}$$

5. 　前問の結果より、反射率 $R < 1$ となり、古典的粒子描像とは異なり、部分的に反射する。対応して、透過率 $T < 1$ となり、透過率も 1.0 より減少する。