階段型障壁 1:steppot1-qa110127.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 よりも低い（$0 < E < V_0$）場合以下の問に答えよ。ただし、プランク定数を h, ディラック定数を $\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}$ とする。

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

1. 領域 I($x \le 0$), 領域 II（$x > 0$）毎にシュレディンガー方程式を立て、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 $R \equiv -J_{ref}/J_{inc}$, 透過率 $T \equiv J_{trans}/J_{inc}$ および $R + T$ を計算せよ。
5. $0 < E < V_0$ の場合には、古典物理学的には禁止される領域 II($x > 0$) に進入できる確率が存在するどうか述べよ。

（解答例）

1. 領域 I($x \le 0$) におけるシュレディンガー方程式と一般解
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_I = E\psi_I \to \frac{d^2}{dx^2}\psi_I = -k^2\psi_I \tag{2}$$
$$k \equiv \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (k: \text{ 波数}) \tag{3}$$
$$\psi_I(x) = A\mathrm{e}^{ikx} + B\mathrm{e}^{-ikx}.(\mathrm{A, B}: \text{任意の積分定数}) \tag{4}$$
（最後の式の右辺の第一項は入射波に対応する。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
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_{II} + V_0\psi_{II} = E\psi_{II} \to \frac{d^2}{dx^2}\psi_{II} = \gamma^2\psi_{II} \tag{5}$$
$$\gamma \equiv \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \tag{6}$$
$$\psi_{II}(x) = C\mathrm{e}^{-\gamma x}.(\mathrm{C}: \text{任意の積分定数}) \tag{7}$$
（得られた結果は透過波に対応する。$\mathrm{e}^{+\gamma x}$ 型の解は、無限遠で発散するので、不適。）

2. 題意より

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \to A + B = C \tag{8}$$
$$\psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) \to ik(A - B) = -\gamma C \tag{9}$$
$$\to \frac{B}{A} = \frac{ik+\gamma}{ik-\gamma}, \frac{C}{A} = \frac{2ik}{ik-\gamma}. \tag{10}$$

(備考：係数 A, B, C は一般に複素数であることに注意する。)

3. 確率の流れ密度の計算 (inc 入射, ref 反射, trans 透過)

$$\begin{aligned} J_{inc} &\equiv \frac{\hbar}{2mi}[(A\mathrm{e}^{ikx})^* \frac{\partial}{\partial x}(A\mathrm{e}^{ikx}) - (A\mathrm{e}^{ikx})\frac{\partial}{\partial x}(A\mathrm{e}^{ikx})^*] \\ &= \frac{\hbar k}{m}|A|^2. \end{aligned} \tag{11}$$

$$\begin{aligned} J_{ref} &\equiv \frac{\hbar}{2mi}[(B\mathrm{e}^{-ikx})^* \frac{\partial}{\partial x}(B\mathrm{e}^{-ikx}) - (B\mathrm{e}^{-ikx})\frac{\partial}{\partial x}(B\mathrm{e}^{-ikx})^*] \\ &= -\frac{\hbar k}{m}|B|^2, \end{aligned} \tag{12}$$

$$J_{trans} \equiv \frac{\hbar}{2mi}[(C\mathrm{e}^{-\gamma x})^* \frac{\partial}{\partial x}(C\mathrm{e}^{-\gamma x}) - (C\mathrm{e}^{-\gamma x})\frac{\partial}{\partial x}(C\mathrm{e}^{-\gamma x})^*] = 0. \tag{13}$$

4. 題意より

$$R \equiv \frac{-J_{ref}}{J_{inc}} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{|ik+\gamma|^2}{|ik-\gamma|^2} = \frac{k^2+\gamma^2}{k^2+\gamma^2} = 1 \tag{14}$$
$$T \equiv \frac{J_{trans}}{J_{inc}} = 0. \tag{15}$$
$$\to R + T = 1.0. \tag{16}$$

5. 前問の結果より、反射率 $R = 1$ となり、全反射する。しかし、ポテンシャル障壁内部の確率密度は $|\psi_{II}(x)|^2 = |C|^2\mathrm{e}^{-2\gamma}$ であり、古典的粒子の描像とは異なって、量子的粒子はポテンシャル障壁内部に浸透する確率がある。浸透距離の目安は $1/\gamma$ であり、$1/\sqrt{V_0 - E}$ に比例する。