今回選んだトピックス

(1) 箱型ポテンシャルに対する 1 次元量子の散乱
(2) 箱型ポテンシャルに対する 2 次元量子の散乱
(3) 定磁場の中での電子の波動関数
(4) アハラノフーボーム効果
(5) スピンを持った量子の波動関数

いずれにおいてもシュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{x},t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})\right]\psi(\vec{x},t)$$

を数値的に解き、波動関数$\psi(\vec{x},t)$ そのもの、又は波動関数の絶対値自乗 $\mid\psi(vecx,t)\mid^2$ を明暗のある色、又は白黒に対応させ、その時間発展を録画したものです。

色と波動関数の対応について簡単に説明いたします。波動関数が複素数なのでこれを白黒だけで表現できません。そこで複素数 z に対して、$z = r(r > 0)$ を赤に $z = r\exp(i2\pi/3)(r > 0)$ を青に $z = r\exp(i4\pi/3)(r > 0)$ を緑に対応させ、その明るさを r の大きさに対応させます。

直観的理解としては同じ色の部分が波面にあたり、同じ色から同じ色までが 1 波長、赤黄緑青と変化する方向が運動量の方向です。

単位についても簡単に述べておきます。具体的にはプランク定数$\hbar$ と質量 m を 1 におきます。このままでは尺度が一つ足りず任意性が残りますのでもう一つ、エネルギー、長さ、時間等の尺度を定めて解釈してください。例はビデオ中に示してあります。

(1) 箱型ポテンシャルに対する 1 次元量子の散乱

ポテンシャル

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

の場合の波動関数の時間発展を録画してあります。初期状態はガウス型です。

$$\psi(x,0) = \frac{1}{(\pi\sigma)^{1/4}} exp(-x^2/2\sigma - ipx/\hbar)$$

具体的なテープの内容に関してですが、波動関数の形と色の変化速度は一致しておらず、色の変化速度のほうが早く進みます。

始めの三つは一重障壁の壁の厚さを変えて 3 パターン。壁が薄くなるほどたくさん抜けています。次の 3 つは二重障壁 (ポテンシャルが一重の場合と見分けがつきませんが縦線が引いてある部分二箇所に薄い壁がある) の場合です、一回目、二回目、三回目と次第に運動量を大きくしています (縦縞の間隔が次第にせまくなっている)。そうしますと透過率は二回目の方が三回目よりも高くなります (ポテンシャル井戸の間隔がほぼ波動関数の半波長で共鳴状態に近い)。

(2) 箱型ポテンシャルに対する 2 次元量子の散乱

ポテンシャル

$$V(r) = \begin{cases} V_0 & 0 \leq r \leq a \\ 0 & a < r \end{cases}$$

の場合の 2 次元波動関数$\psi(x,y,t)$ の時間発展を録画してあります。初期状態はガウス型です。

量子の散乱は光の反射、透過からの類推で理解しやすいと思いますが、ポテンシャルが言わばレンズと同じような働きをしているのが視覚的に理解出来るのではないかと思います。

(3) 定磁場の中での電子の波動関数

数値計算の方法をベクター ポテンシャルがある場合に拡張して磁場の中の電子 (電荷をもった量子) の波動関数の数値計算結果です。つま

り、ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla - e\vec{A}(\vec{x}))^2 + V(\vec{x})$$

です。 ここでの話題は定磁場つまり $\vec{B} = rot\vec{A}$ =const での波動関数の時間発展です。

磁場は

$$\vec{B} = (0, 0, B_z)$$

$$B_z(r) = B_0(\ constant\ )$$

ランダウによって解析的に解かれいます。この場合波動関数は初期状態がなんであっても古典的周期で初めの波動関数にもどります。数値計算でもこの周期性をよく表しております。

(はじめ状態 $|a>$にあった系が t 時間後も $|a>$である振幅は。エネルギー表示で、

$$<a|U|a> = \sum_n |<En|a>|^2 exp(-iE_n/\hbar t) - -(1)$$

確率は、

$$W = |<a|U|a>|^2$$
$$= \sum_{n,m} |<E_n|a>|^2 |<En|a>|^2 exp[-i(E_n - E_m)/\hbar t] - -(2)$$

ここで、エネルギー固有値が調和振動子の場合同様等間隔。この場合 $E_n - E_m$は n, m が隣どうしのとき周期最長で、この成分が一周期たってもとに戻れば他の成分もこの整数倍ですべてもとに戻るという仕掛けです。)

またシュレンディンガー方程式を磁場ではなくベクターポテンシャルで記述する意味としてのゲージの不定性も理解出来ると思います。通常量子力学の教科書では固有値問題としての議論がほとんどでゲージの不定性に関しては触れず縮退していて重ね合わせれば特別な方向はない等の議論をしますが、ここではそのまま系の時間発展を計算しゲージ不変性を示しています。位相はどう入れてもつじつまを合わせられるんだと言うところを実感できればと思います。

と言うわけで実例として 2 種類のベクターポテンシャル

$$\vec{A} = (A_x, A_y, 0)$$

$$A_x = -B_0 y/2, A_y = B_0 x/2$$

と

$$A_x = B_0 y, A_y = 0$$

を計算しています。

(4) アハラノフーボーム効果

量子力学でベクターポテンシャルの実在性について論争があり、実在性の検証としてアハラノフーボーム効果があります。この効果において外村氏らの検証実験がよく知られています。

ビデオの結果はアハラノフーボーム効果のシュミレーションを波束を用い行ったものです。

磁場は

$$\vec{B} = (0, 0, B_z)$$

$$B_z(r) = \begin{cases} B_0 & 0 \geq r \geq a \\ 0 & r \geq a \end{cases}$$

前式で与えられ磁場を生じさせるベクターポテンシャルは無数に存在しますがここでは以下の様なベクターポテンシャルを取ります。

$$\vec{A} = (A_x, A_y, A_z),\ \ A_r = A_x \cos(\theta) + A_y \sin(\theta),\ \ A_\theta = -A_x \sin(\theta) + A_y \sin(\theta)$$

$$A_\theta = \begin{cases} B_0 r/2 & 0 \geq r \geq a \\ B_0 a^2/r/2 & r \geq a \end{cases}$$

磁場がゼロの領域でもベクターポテンシャルがあり、これが波動関数に影響を与えます。

x 軸プラス方向に電子が流れ、y 軸方向は y ＝-L、L で領域が限られています。つまり、そこで完全反射します。中心付近にポテンシャルは無限大でかつ磁場がある領域が存在します。もちろん、この領域には電子は流れ込みません。

x 軸負の領域から流入した電子は x 軸正の領域で干渉します。電子のいる領域では磁場がゼロでありますが、ベクトルポテンシャルが電子の位相に影響し、その結果が干渉のズレとして観測にかかります。

(5) スピン１／２をもつ粒子の波動関数の時間発展

波動関数のスピン成分を色に対応させ、波動関数の時間発展を動画化しています。

$$\Psi(\vec{x},t) = \begin{bmatrix} \psi_\uparrow(\vec{x},t) \\ \psi_\downarrow(\vec{x},t) \end{bmatrix}.$$

つまり、｜ $\psi_\uparrow(\vec{x},t)$ ｜^{2}の大きさを 青の明暗に｜ $\psi_\downarrow(\vec{x},t)$ ｜^{2}の大きさ を赤の明暗に対応させます。具体的には、$\Psi(\vec{x},t) = [\psi,0]^T$のときには赤色、$\Psi(\vec{x},t) = [0,\psi]^T$のときには青色、$\Psi(\vec{x},t) = \psi\ [1,1]^T$のときには紫色になります。

ハミルトニアンは

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \vec{B}\vec{\sigma},$$

$$\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)\ \ : Pauli\ matrix,$$

です。

初期状態を$\Psi(\vec{x},t) = \psi\ [1,1]^T$つまり紫色とすれば、磁場が$\vec{B} = (0,0,B_0)$ならば、ハミルトニアンのスピン部分は各成分の位相を変えますが、絶対値は変えず、紫色のまま、磁場が$\vec{B} = (B_0,0,0)$ならば、各成分の大きさの変化し、紫、赤、青、紫と変化します。

磁場が空間的に変化している場合、波動関数の空間的形に影響を与え、その時間変化は磁気モーメントを持った古典的粒子の運動から類推できます (もちろんどちらの方向から見ても上向きと下向きしかないと言うの

は古典的類推からは理解不能ですが)。いわゆるシュテルン・ゲルラッハの実験です。この場合、上向きスピン成分と下向きスピン成分が空間的に別れます。

最後の三つのシミュレーションは、z 方向の固有状態は x 方向固有状態半々の重ね合わせであるとか、二つに分けてから片方せき止めてもう一度別の固有状態で分けるともとにはなかった成分が出てくると言うところを見てもらおうと作っています。(ファインマン物理学 V 参照)