固有ベクトルと固有状態の正規直交性

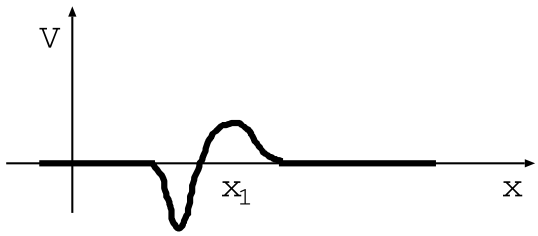
$$\sum_i v_{in'}^* v_{in} = \delta_{nn'} \qquad \Leftrightarrow \qquad \langle u_{n'}|u_n\rangle = \delta_{nn'}. \tag{B.35}$$

固有ベクトルと固有状態の完全性

$$\sum_n v_{in} v_{jn}^* = \delta_{ij} \qquad \Leftrightarrow \qquad \sum_n |u_n\rangle\langle u_n| = \hat{1}. \tag{B.36}$$

C 散乱行列 (S-行列) と転送行列 (M-行列)

1 次元量子力学での散乱について、散乱行列 (S-行列) と転送行列 (M-行列) を用いた計算手法を紹介しよう。



上図のようｒに $x = x_1$ の近傍に局在するポテンシャル V_1 を考える。つまり x_1 より十分左側あるいは十分右側の領域では、このポテンシャルは $V_1 = 0$ となっている。 1 次元量子力学の時間に依存しないシュレディンガー方程式

$$Eu = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right] u \tag{C.1}$$

を解いて、このように局在したポテンシャル $V = V_1$ による 1 次元量子力学での粒子散乱を考察してみよう。

点 $x = x_1$ より十分左側の領域ではポテンシャルは $V = 0$ であり、シュレディンガー方程式の解を

$$u = A_0 e^{ikx} + B_0 e^{-ikx}, \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{C.2}$$

と書くことができる。同様に点 $x = x_1$ より十分右側の領域でも

$$u = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \tag{C.3}$$

である。

$x = x_1$ 近傍のシュレディンガー方程式を解くことができれば、式 (C.2) の解に表れる係数 A_0, B_0 と、式 (C.3) の係数 A_1, B_1 との間に線形の関係

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = M_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \tag{C.4}$$

をつけることができる。この式に表れる行列 M_1 を転送行列と呼ぶ。

式 (C.4) はまた、

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_0 \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A_0 \\ B_1 \end{pmatrix} \tag{C.5}$$

の形に書き換えることができる。式 (C.5) において、右辺に表れる係数 A_0, B_1 は点 $x = x_1$ に向かって進行する波の係数であり、左辺に表れる A_1, B_0 は点 $x = x_1$ から外向きに拡がっていく波の係数であることに注意しよう。したがって、式 (C.5) で定義される行列 S は、$x = x_1$ 近傍のポテンシャルによって引き起こされる散乱を記述する行列であり、散乱行列 (S-行列) と呼ばれる。

実際、S-行列を次のように成分表記すると

$$S = \begin{pmatrix} S_{AA} & S_{AB} \\ S_{BA} & S_{BB} \end{pmatrix} \tag{C.6}$$

$x = x_1$ の左側から右側へ透過する粒子の透過率 $T_{l\to r}$ や、左側から入射した粒子が左側に跳ね返る反射率 $R_{l\to l}$、さらには右側からの透過率 $T_{r\to l}$ と反射率 $R_{r\to r}$ は、S-行列要素を用いて

$$T_{l\to r} = |S_{AA}|^2, \quad R_{l\to l} = |S_{BA}|^2, \quad T_{r\to l} = |S_{BB}|^2, \quad R_{r\to r} = |S_{AB}|^2 \tag{C.7}$$

と求められることがわかる。

さらに、散乱の前後での確率の保存

$$|A_1|^2 + |B_0|^2 = |A_0|^2 + |B_1|^2 \tag{C.8}$$

から、S-行列はユニタリー行列

$$S^\dagger S = SS^\dagger = 1 \tag{C.9}$$

であることが示される。このことより、S-行列の固有値の絶対値が 1 であることがわかり、したがって、適当なユニタリー行列 U を用いて S-行列を対角化して

$$S = U^\dagger \begin{pmatrix} e^{2i\delta_0} & 0 \\ 0 & e^{2i\delta_1} \end{pmatrix} U \tag{C.10}$$

と表すことができる。ここで、δ_0, δ_1 は、この散乱の「位相のずれ」と呼ばれる実数パラメータである。

特にポテンシャル V が原点 $x = 0$ を中心とするパリティー対称性 $V(x) = V(-x)$ を持つ場合は、U は

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \tag{C.11}$$

の形で与えられ、δ_0, δ_1 はそれぞれ、偶パリティ、奇パリティ散乱の「位相のずれ」となる。このときの S 行列は

$$\begin{aligned} S &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{2i\delta_0} + e^{2i\delta_1} & e^{2i\delta_0} - e^{2i\delta_1} \\ e^{2i\delta_0} - e^{2i\delta_1} & e^{2i\delta_0} + e^{2i\delta_1} \end{pmatrix} \\ &= e^{i(\delta_0+\delta_1)} \begin{pmatrix} \cos(\delta_0 - \delta_1) & i\sin(\delta_0 - \delta_1) \\ i\sin(\delta_0 - \delta_1) & \cos(\delta_0 - \delta_1) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

の形になり、透過率と反射率は、

$$T_{l\to r} = T_{r\to l} = \cos^2(\delta_0 - \delta_1), \qquad R_{l\to l} = R_{r\to r} = \sin^2(\delta_0 - \delta_1)$$

と位相のずれを用いて計算できることがわかる。

転送行列 M_1 が計算できたとき、具体的に S-行列を求めるには、

$$M_1 = \begin{pmatrix} M_{AA} & M_{AB} \\ M_{BA} & M_{BB} \end{pmatrix} \tag{C.12}$$

と成分表記しておくと便利である。この表記を用いて式 (C.4) の A_1, B_0 を、A_0 と B_1 について解き直すと、S-行列が

$$S = \frac{1}{M_{AA}} \begin{pmatrix} 1 & -M_{AB} \\ M_{BA} & M_{AA}M_{BB} - M_{BA}M_{AB} \end{pmatrix} \tag{C.13}$$

の形で与えられることがわかる。

次に、ポテンシャルが形を変えずに Δ だけ右に移動した場合

$$V(x) = V_1(x - \Delta) \tag{C.14}$$

に、転送行列 $M_{\Delta 1}$ がもとの M_1 からどのように変化するか考察しよう。そのためには、変数 $x_\Delta = x - \Delta$ を用いてシュレディンガー方程式を書き下すと、もとのポテンシャル $V_1(x)$ で変数を x としたときのシュレディンガー方程式と同一であることに着目すればよい。つまり、左側領域での波動関数を

$$u = A_{\Delta 0} e^{ikx_\Delta} + B_{\Delta 0} e^{-ikx_\Delta} \tag{C.15}$$

とし、右側領域での波動関数を

$$u = A_{\Delta 1} e^{ikx_\Delta} + B_{\Delta 1} e^{-ikx_\Delta} \tag{C.16}$$

とすると、係数間の関係は

$$\begin{pmatrix} A_{\Delta 0} \\ B_{\Delta 0} \end{pmatrix} = M_1 \begin{pmatrix} A_{\Delta 1} \\ B_{\Delta 1} \end{pmatrix} \tag{C.17}$$

で与えられる。一方、$x_\Delta = x - \Delta$ を用いて、解の形 (C.15) を、もともとの解の形と比較すると

$$A_{\Delta 0} = A_0 e^{ik\Delta}, \qquad B_{\Delta 0} = B_0 e^{-ik\Delta} \tag{C.18}$$

であることがわかる。同様に

$$A_{\Delta 1} = A_1 e^{ik\Delta}, \qquad B_{\Delta 1} = B_1 e^{-ik\Delta} \tag{C.19}$$

である。したがって、

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-ik\Delta} & 0 \\ 0 & e^{ik\Delta} \end{pmatrix} M_1 \begin{pmatrix} e^{ik\Delta} & 0 \\ 0 & e^{-ik\Delta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \tag{C.20}$$

となり、ポテンシャルが Δ だけ右に移動した場合の転送行列 $M_{\Delta 1}$ は、もとの転送行列 M_1 を用いて

$$M_{\Delta 1} = \begin{pmatrix} e^{-ik\Delta} & 0 \\ 0 & e^{ik\Delta} \end{pmatrix} M_1 \begin{pmatrix} e^{ik\Delta} & 0 \\ 0 & e^{-ik\Delta} \end{pmatrix} \tag{C.21}$$

で与えられることが分かる。

最後に、ポテンシャル V が $x = x_1$ と $x = x_2$ の 2 箇所 $(x_1 < x_2)$ にわかれて局在している場合を考察しよう。x_1 近傍でのポテンシャルによる転送行列を M_1 とし、x_2 近傍でのポテンシャルによる転送行列を M_2 とすると、この系全体の転送行列 M が

$$M = M_1 M_2 \tag{C.22}$$

で与えられることは明らかであろう。とくに同一の形の局在ポテンシャルが $x = 0$ と $x = \Delta > 0$ に存在する場合、つまり、Δ だけの距離をおいて局在ポテンシャルが繰り返される場合は

$$M = M_1 \begin{pmatrix} e^{-ik\Delta} & 0 \\ 0 & e^{ik\Delta} \end{pmatrix} M_1 \begin{pmatrix} e^{ik\Delta} & 0 \\ 0 & e^{-ik\Delta} \end{pmatrix} \tag{C.23}$$

となる。

D　ブロッホの定理

周期 a の周期的ポテンシャル

$$V(x+a) = V(x) \tag{D.1}$$

のもとでの 1 次元量子力学を考える。時間に依存しないシュレディンガー方程式

$$Eu(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] u(x) \tag{D.2}$$

の遠方で発散しない解 $u(x)$ は

$$u(x+a) = e^{iKa}u(x) \tag{D.3}$$

の形で表される周期性を持つことが知られている（ブロッホの定理)。ここで K は x に依らない実数である。

この定理を証明するには、波動関数を a だけ移動させる演算子

$$\begin{aligned} \hat{D} &= \exp\left(i\frac{a}{\hbar}\hat{p} \right) \\ &= 1 + i\frac{a}{\hbar}\hat{p} - \frac{1}{2!}\left(\frac{a}{\hbar}\right)^2 \hat{p}^2 + \cdots \end{aligned} \tag{D.4}$$

の状態

$$|u\rangle = \int dx |x\rangle u(x) \tag{D.5}$$

への作用を考察すればよい。実際に演算子 $\hat{D}$ が波動関数を a だけ移動させることは

$$\begin{aligned} \hat{D}|u\rangle &= \int dx|x\rangle \left(1 + a\frac{d}{dx} + \frac{1}{2!}a^2\frac{d^2}{dx^2} + \cdots \right) u(x) \\ &= \int dx|x\rangle \left(u(x) + au'(x) + \frac{1}{2!}a^2u''(x) + \frac{1}{3!}a^3u'''(x) + \cdots \right) \\ &= \int dx|x\rangle u(x+a) \end{aligned}$$

により示される。一方、ポテンシャル $V(x)$ が周期 a の周期関数であることから、

$$[\hat{D}, \hat{H}] = 0 \tag{D.6}$$

であることがわかり、エネルギー固有状態 $|u\rangle$ は演算子 $\hat{D}$ の固有状態でもあることが示される。

状態 $|u\rangle$ における $\hat{D}$ の固有値を κ とおくと

$$\hat{D}|u\rangle = \kappa|u\rangle. \tag{D.7}$$