

最近接2重ポテンシャル障壁による量子トンネル効果

松山 豊 樹 奈良教育大学理数教育研究センター
法村 恵 奈良教育大学大学院在学

Quantum Tunnel Effect by Nearest-Neighbor Double Potential Barriers

Toyoki MATSUYAMA

(Center for Educational Research of Science and Mathematics, Nara University of Education)

Megumi NORIMURA

(Graduate School of Education, Nara University of Education)

Abstract

We investigate the quantum tunnel effect by nearest-neighbor double potential barriers. An explicit expression of the transmit ratio is obtained by a theoretical analysis. We show that the rate is invariant under space reflection. This result proposes a principal problem what is a “quantum” meaning of acceleration. The transmit ration is extremely complicate so that we use also numerical analyses to understand typical aspects of the tunnel effect. We discover that there appear new peaks in an energy region where incident particles cannot pass through the barriers classically. These novel aspects give us new insights in investigating electron conduction and also a technology of preventing radioactive rays.

キーワード：量子力学，トンネル効果，鏡影反転対称性

Key Words: quantum mechanics, tunnel effect, reflection symmetry

1. はじめに

量子トンネル効果^{[1][2][3]}の研究は、集積回路の設計や半導体技術に利用され^[4]、現在の先端科学技術を支えている重要な分野の一つとなっている。江崎ダイオードやジョセフソン素子、最近では、量子コンピューターの基本素子の動作原理を与えるものとして^{[5][6]}、活発に研究が進められている。しかし、ミクロな世界での電子などの粒子の振舞いについてまだまだ未解明なことが多く、特に、ポテンシャル障壁が複合された場合の粒子の挙動には未知な部分が多い^{[7][8]}。

粒子の透過率はポテンシャル障壁の高さや幅、形によって変化するが、本研究は、図1に示している階段のような形をした最近接2重ポテンシャル障壁を扱う。シュレディンガー方程式に基づいて、理論計算でこの2重ポテンシャル障壁を通過する粒子の透過率を算出した。しかし、計算結果が複雑すぎるため、さらに数値解析を行い、1重ポテンシャルとの違いや最近接2重ポテンシャル障壁で新たに現れる特徴についての研究を行った。

特に興味深いのは、図1のポテンシャル障壁とそれを鏡影反転したポテンシャルで、透過率がどのように変化するかという点である。図1に示しているポテンシャル障壁の各部分の階段の高さを変え、鏡映反転したポテンシャル障壁に変換し、その透過率を

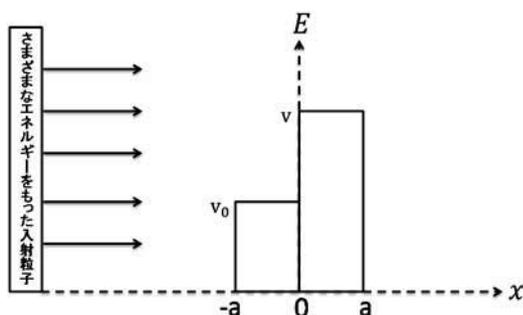


図1 最近接2重ポテンシャル障壁

元の透過率と比較した。そして、透過率が鏡影変換で不変であることを理論的に示し、それを数値計算でも確認した。さらに、粒子の入射エネルギーを変化させたとき、古典的には粒子が透過できないエネルギー領域で、透過率に粒子が透過しやすいピークが現れた。これらの結果は、今までの研究では、知られていない本研究の最も大きな成果である。

2. 透過率の理論的導出

エネルギーが E の量子状態にある (時間に依存しない) シュレディンガー方程式の一般形は以下の式となる。

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right\} \psi(x) = E\psi(x)$$

\hbar はプランク定数, m は粒子の質量, $U(x)$ はポテンシャルエネルギー, $\psi(x)$ は波動関数で, $|\psi(x)|^2$ は粒子の存在確率の分布である。

ポテンシャル $U(x)$ は図 1 で示されている。このポテンシャルを 4 つの領域に分け, I ~ IV とする。I は $x < -a$ の領域, II は $-a < x < 0$ の領域, III は $0 < x < a$ の領域, IV は $a < x$ の領域である。領域 I と IV における波数を k , 領域 II と III における減衰定数をそれぞれ k' , k'' とする。まず, $E < V$ に対して考える。シュレディンガー方程式から各領域の一般解は以下のようになった。

領域 I	$\psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$	$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$
領域 II	$\psi_{II}(x) = Fe^{ik'x} + Ge^{-ik'x}$	$k' = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$
領域 III	$\psi_{III}(x) = Me^{ik''x} + Ne^{-ik''x}$	$k'' = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}$
領域 IV	$\psi_{IV}(x) = Ce^{ikx}$	$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

波動関数およびその微分は各領域の端において連続でなければならない。従って、境界条件は、具体的に、以下のようになる。

$$\begin{aligned} Ae^{-ika} + Be^{ika} &= Fe^{-ik'a} + Ge^{ik'a}, & kAe^{-ika} - kB e^{ika} &= k'Fe^{-ik'a} - k'G e^{ik'a}, \\ F + G &= M + N, & k'F - k'G &= k''M - k''N \\ Me^{ik'a} + Ne^{-ik'a} &= Ce^{ika}, & k''Me^{ik'a} - k''Ne^{-ik'a} &= kCe^{ika} \end{aligned}$$

この 6 つの式から係数 A と C の比率を求めると以下の結果となった。

$$\frac{C}{A} = \frac{8kk'k''}{e^{2ika}(pe^{-i(k'+k'')a} + qe^{-i(k'-k'')a} + re^{i(k'-k'')a} + te^{i(k'+k'')a})}$$

ただし、

$$\begin{aligned} p &= (k+k')(k'+k'')(k''+k), & q &= (k+k')(k'-k'')(k''-k) \\ r &= (k-k')(k'-k'')(k''+k), & t &= (k-k')(k'+k'')(k''-k) \end{aligned}$$

と定義した。係数 C と A の比の絶対値の二乗である透過率は以下のようになる。

$$T = \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \frac{16k^2k'^2k''^2}{XYZ + 8k^2k'^2k''^2 + X'Y'Z'P + XY'Z'U + X'Y'Z'PU - 2k'k''X'Z'QW}$$

ただし、

$$\begin{aligned} P &= \cos 2k'a, & P' &= \cosh 2k'a, & Q &= \sin 2k'a, & Q' &= \sinh 2k'a, & U &= \cos 2k''a \\ U' &= \cosh 2k''a, & W &= \sin 2k''a, & W' &= \sinh 2k''a, & X &= k^2 + k'^2, & X' &= k^2 - k'^2 \\ Y &= k'^2 + k''^2, & Y' &= k'^2 - k''^2, & Z &= k''^2 + k^2, & Z' &= k''^2 - k^2 \end{aligned}$$

と定義した。さらに、 $V_0 < E < V$ のとき、 $k'' = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}$ であるが⁵、ここで、 $E - V < 0$ より、 k'' を ik'' へ置き換えて、計算し直すと以下のようになった。

$$T = \frac{16k^2k'^2k''^2}{XY'Z' + 8k^2k'^2k''^2 + X'Y'Z'P + XYZ'U' + X'Y'Z'PU' + 2k'k''X'Z'QW'}$$

同様に $0 < E < V_0$ のときは、以下のようになる。

$$T = \frac{16k^2k'^2k''^2}{X'Y'Z' + 8k^2k'^2k''^2 + XY'Z'P' + X'Y'Z'U' + XYZP'U' + 2k'k''XZQ'W'}$$

また、 $E = V$ のとき、 $k'' \rightarrow 0$ の時であるので、その極限を求めると以下のようになった。

$$T = \frac{8k^2k'^2}{X^2 + 4k^2k'^2 + a^2k^2k'^2X - X'^2P + a^2k^2k'^2X'P + 2ak^2k'X'Q}$$

$E = V_0$ のときも同様を求めると、以下の結果が得られた。

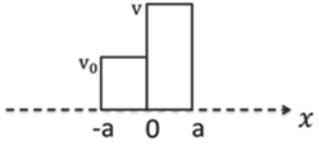
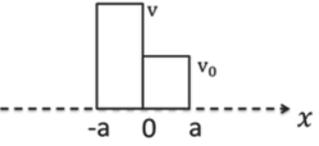
$$T = \frac{8k^2k''^2}{-Z'^2 + 4k^2k''^2 - a^2k^2k''^2Z' + Z^2U' + a^2k^2k''^2ZU' + 2ak^2k''Z'W'}$$

以上で、取り得るすべての入射エネルギー E に対して、透過率がすべて理論的に求まった。

3. 鏡映反転

ポテンシャル障壁の階段の高さを変えることで、はじめの形を鏡映反転したポテンシャル障壁を得ることができる。その透過率の理論計算は、もとのモデルと比べて、 k' と k'' の定義が変化することになり、それを表1にまとめている。

表1. もとのモデルと鏡映反転モデルにおける k' と k'' の違い

	 もともとのモデル	 鏡映対称モデル
$V_0 < V < E$	$k' = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$ $k'' = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}$	$k' = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}$ $k'' = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$
$E = V$	$k' = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$ $k'' = 0$	$k' = 0$ $k'' = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$
$V_0 < E < V$	$k' = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$ $k'' = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}$	$k' = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}$ $k'' = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$
$E = V_0$	$k' = 0$ $k'' = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}$	$k' = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}$ $k'' = 0$
$0 < E < V_0 < V$	$k' = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$ $k'' = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}$	$k' = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}$ $k'' = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$

この表を用いた読み換えによって、鏡影変換したポテンシャル障壁での透過率が求められる。しかし、透過率の表式は極めて複雑であるため、数値シミュレーションによる解析も併用し、相互に結果を検証することにする。

4. 数値シミュレーション

理論計算では多くのパラメーターを使用しているが、本質的なパラメーターを無次元化の手法によって絞り込むことができる。具体的には、プランク定数 $\hbar = 1$ 、粒子の質量 $m = 1/2$ と置いて、計算を行う。理論計算で使った記号、無次元化した記号、それらをシミュレーションで置き換えた記号を表2にまとめておく。

表2. 簡略化と無次元化の記号

理論計算の記号	シミュレーションの記号	無次元化した後の値
k	k	\sqrt{E}
k'	$k1$	$\sqrt{(E - V_0)}$
k''	$k2$	$\sqrt{(E - V)}$
V_0	$v0$	変化なし
V	v	変化なし
P'	$P1$	変化なし
Q'	$Q1$	変化なし
U'	$U1$	変化なし
W'	$W1$	変化なし
X'	$X1$	変化なし
Y'	$Y1$	変化なし
Z'	$Z1$	変化なし

ここで、最初に、本研究で導出した理論計算、シミュレーションのプログラムが正しいかどうかを確認するため、1重ポテンシャルのシミュレーション結果との比較を行った。すなわち、最近接2重ポテンシャル障壁で $V_0 \rightarrow 0$ としたものが、1重ポテンシャルでの既知の透過率を再現するかを調べた。

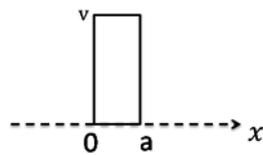


図2. 1重ポテンシャル障壁

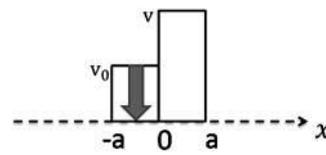


図3. 2重ポテンシャル障壁 ($V_0 \rightarrow 0$)

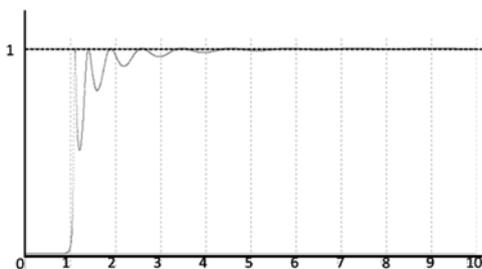


図4. 1重ポテンシャル障壁の透過率
 $a=10, V=1.0$

1重ポテンシャルで求められた透過率を無次元化した後の式は以下ようになる。ただし、 $(k2)$ は2重ポテンシャル障壁の無次元化記号 $k2$ と対応している。

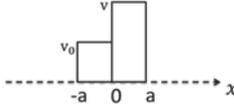
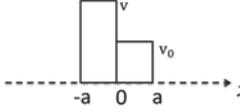
$$T = \frac{4k^2(k2)^2}{(k^2 - (k2)^2) \sin^2(k2)a + 4k^2(k2)^2}$$

最近接2重ポテンシャル障壁の透過率で $V_0 \rightarrow 0$ と極限をとると、1重ポテンシャル障壁の透過率と確かに一致する。さらに、シミュレーション上も両者を比較すると図4のようになり、計算が正しいことが確認された。これらのグラフの横軸は入射粒子のエネルギーで、縦軸は透過率を表す。透過率の最大値は1であり、このときすべての粒子が透過することを意味する。以下に出てくる同様な図も同じ意味である。

5. 鏡影反転対称性

粒子のエネルギーが $0 < E < V_0$, $V_0 < E < V$, $V < E$ の間での透過率の理論計算の結果を見比べると、もとのモデルと鏡映反転モデルの間には、表3に示すように k' と k'' の交換に関してルールがあることがわかった。

表3 最近接2重ポテンシャル障壁における鏡影反転と k' と k'' の交換ルール

	 もととのモデル	 鏡映反転モデル
$V_0 < V < E$	$k' = \sqrt{E - V_0}, k'' = \sqrt{E - V}$	$k' = \sqrt{E - V}, k'' = \sqrt{E - V_0}$ $k' \rightarrow k'', k'' \rightarrow k'$
$V_0 < E < V$	$k' = \sqrt{E - V_0}, k'' = \sqrt{V - E}$ $k' \rightarrow k', k'' \rightarrow ik''$	$k' \rightarrow k'' = \sqrt{E - V} = ik''$ $k'' \rightarrow k' = \sqrt{V_0 - E} = ik'$
$0 < E < V_0 < V$	$k' = \sqrt{V_0 - E}, k'' = \sqrt{V - E}$ $k' \rightarrow ik', k'' \rightarrow ik''$	$k' \rightarrow k'' = \sqrt{V - E} = k''$ $k'' \rightarrow k' = \sqrt{V_0 - E} = k'$

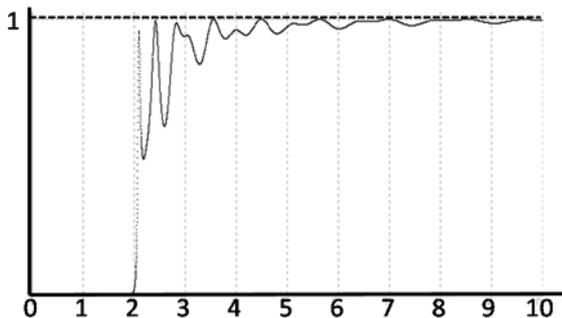


図5. 鏡映反転モデルの結果
 $a=10, V=2.0, V_0=1.0$

このルールを用いると、最近接2重ポテンシャル障壁の透過率は鏡影反転のもとで不変であることが証明される。すなわち、鏡影反転対称である。具体的に、数値シミュレーションを行うと、両者のシミュレーションの結果は、共に以下のように鏡影反転対称性が確認できる。

6. 新しいピークの出現

ポテンシャルエネルギーが V の1重障壁なら、粒子のエネルギー E が V になった時に上がり始め、何回か振動してから1に近づいていく。しかし、図6や図7からわかるように2重ポテンシャル障壁のシミュレーションでは、粒子のエネルギーが V_0 になっても1に近づくことなく、 V に近づいたときに上がり始めることがわかった。

さらに、ある特定の値で、 V_0 と V 間に1重では現れなかったピークが現れた。これは V_0 と V の間で粒子が透過し易いエネルギー領域が存在することを意味している。原因としては、2枚のポテンシャル障壁で、一種の共鳴現象が起きていると考えられる。

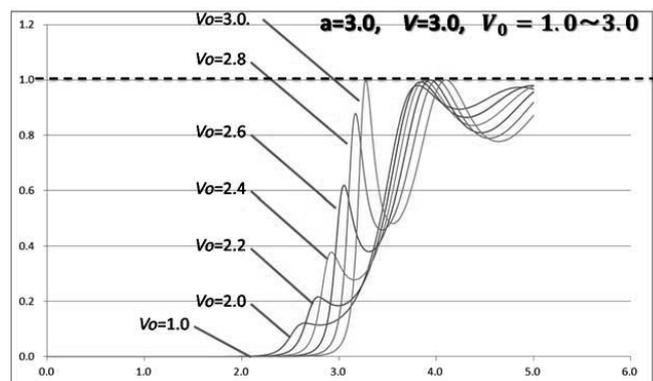


図6 ピークの出現と V_0 と V の値との関係

ピークの出現の傾向は次の様にまとめられる。

(1) V_0 と V の値の関係

図8からわかるように、 V_0 と V の値が近いほど、ピークが現れやすい。なお、そのピークが右に移りながら高くなることわかる。 V_0 と V の値が近ければそれぞれの透過率の共鳴の影響が大きく、逆に離れば、それぞれが影響し合う力が弱くなるのではないかと考えられる。

(2) 障壁の厚み a との関係

一方、図6と図7を見比べるとわかるように、 a を大きくすると、障壁の厚みが大きくなるほど、ピーク全体が低くなり、鋭くなることわかった。これもまた障壁が厚くなるにつれ、粒子が透過しにくくなっていることをあらわしている。また、図8からわかるように、障壁の厚さが小さいとき、透過率がすぐに上昇し、全体的には上に凸のような形を描いている。つまり粒子が透過しやすいことを示している。この時は新ピークが見られない。しかし障壁の厚みを上げていくと、上に凸だったグラフの形がどんどん下に凸のようなグラフになり、新しいピークが現れるようになった。

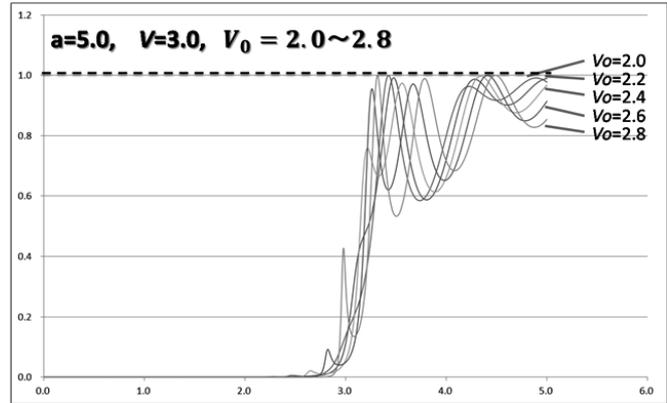


図7 新ピークの出現と a の関係 (1)

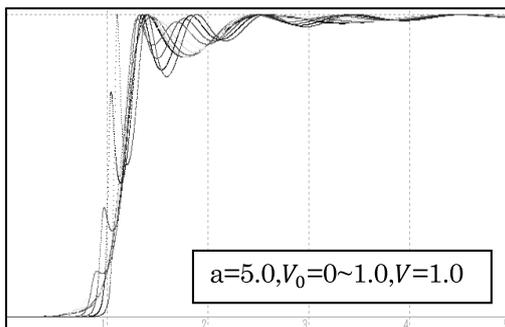
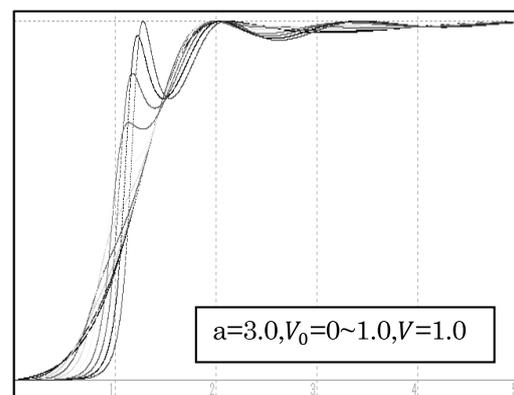
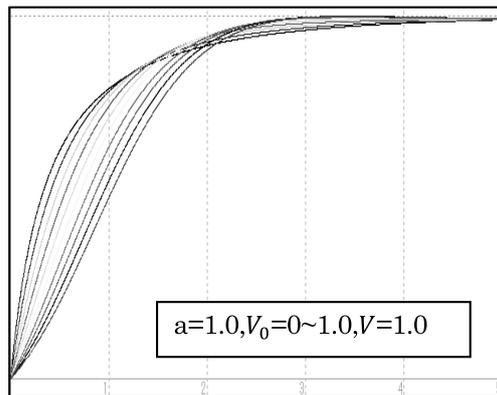


図8 新ピークの出現と a の関係 (2)

7. まとめと今後の課題

まず、最近接2重ポテンシャルの透過率が、鏡影反転の下で不変であることが明らかになった。最近接2重ポテンシャル障壁には鏡映対称性があることがわかった。この鏡影反転対称性は、透過率（または反射率）に関する限り、古典的な加速と減速に区別が無いことを意味する。今回は、定常的に粒子を入射させた定常散乱の定式化を用いたが、一個一個の波束を入射させるパケット（波束）定式化を用いた解析の結果が興味深い。量子論的な加速と減速の意味は何かという新しい研究の展開が予見される今後の課題である。

1重ポテンシャル障壁の場合と決定的に異なる最近接2重ポテンシャル障壁の透過率の特性は、古典的には透過が許されないエネルギー領域で、透過率に新しいピークが出現したことである。ポテンシャルに下に凸な領域がある場合は、

そのへこみでの共鳴散乱によりピークが現れる場合があった。しかし、本研究で考えたすべて上に凸なポテンシャルでのピーク出現は、非常に興味深い。具体的な応用を考えたとき、粒子を半導体中の電子としてみなすと、ある特定のエネルギー値で選択的に電流を流すことができることを意味する。

一方で、粒子を放射線としてみなすと、 V_0 と V の間のピークでは放射線が透過しやすくなる。放射線の遮断を目的とした場合、特定のエネルギー値に対して1重ポテンシャル障壁より2重障壁の方がより放射線が通り抜けやすくなってしまう。放射線遮断ポテンシャルを設定するとき、慎重に設計しなければならないことを意味する。

今後もさらにパラメーター領域を広げた解析が望まれる。また、本研究で明らかとなった結果は、理論および数値解析によるものであり、これを確かめるためには実際に実験が必要となってくる。そういった実験が待望される。

8. 謝 辞

本研究において、松山研究室の後藤田洋介氏、そのほかの皆様から議論をいただきましたことに深く感謝を申し上げます。

参考文献

- [1] L. I. Schiff (1972) 量子力学(下), 井上健 訳, 吉岡書店
- [2] Neil W. Ashcroft and N. David Mermin (1981) 固体物理の基礎, 松原武生 他訳, 吉岡書店
- [3] 小出昭一郎 (1990) 量子力学 (I), 裳華房
- [4] David K. Ferry (1996) デバイス物理のための量子力学, 丹慶勝市 他訳, 丸善株式会社
- [5] Richard Turton (1998) 量子ドットへの誘い, 川村清 他訳, シュプリンガー・フェアラーク東京
- [6] Edward L. Wolf (2011) ナノ構造の科学とナノテクノロジー, 吉村雅満 他訳, 共立出版
- [7] 松山豊樹, 松本祥一, 2重有限障壁に束縛された電子の量子論的振る舞い, 奈良教育大学紀要, 第61巻, 第2号(自然), 29-39 (2012)
- [8] 松山豊樹, 大久保和則, 2重ポテンシャル障壁による量子トンネル効果の研究, 奈良教育大学紀要, 第61巻, 第2号(自然), 41-60 (2012)

