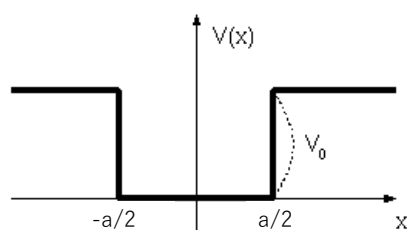


4-3-3. 有限の深さの井戸型ポテンシャル（束縛状態）

4-3-1, 4-3-2節では、「無限の障壁を持つ井戸型ポテンシャルの場合」について詳しく調べてきた。そこではエネルギーの量子化、不確定性関係によるゼロ点エネルギー、波動関数が節を持つ（粒子が観測されない場所ができる）など、古典力学では起こり得ないようなことが、いくつか現れた。これに加えて、「有限の深さの井戸型」の場合は、運動エネルギー T が負になる領域において粒子が観測されるようなことが起きる。



左図のような「有限の深さ ($V_0 > 0$) の井戸型ポテンシャル」 $V(x)$ を考えよう。

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| \leq \frac{a}{2} \\ V_0 & |x| > \frac{a}{2} \end{cases} \quad (4-3-34)$$

$V(x) = V(-x)$ なので、全力的エネルギー E が $E < V_0$ （束縛状態）の場合¹、波動関数 $\varphi(x)$ は偶関数（偶パリティ）か奇関数（奇パリティ）となる（4-2-1 (7), 4-2-2節）。 $|x| \leq a/2$ では無限の障壁井戸と同じ $V(x) = 0$ であるから、 $\varphi(x)$ は V_0 が有限でも井戸の内部で $\cos$ 、 $\sin$ 、 $\cos$ 、 $\sin \dots$ のような形となり、エネルギーは量子化すると思われる。ただし、 V_0 が有限なので 4-2-1節の (5) の $|x| > a/2$ で「 $\varphi(x) = 0$ 」なる条件は課されなくなるので、 $|x| > a/2$ で $\varphi(x)$ はゼロにならなくても良くなる。さらに、4-2-1節の (4) の「 $d\varphi(x)/dx$ が不連続でも良い」という条件も外れるので、 $x = \pm a/2$ で井戸内外の $\varphi(x)$, $d\varphi(x)/dx$ は連続とならねばならない（内外で $\varphi(x)$ は滑らかにつながる）。

これらのことを考慮しつつ、井戸内外の波動関数を求める。

[領域1: $|x| \leq a/2$] この領域では $V(x) = 0$ なので

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = E \varphi(x). \quad (4-3-35)$$

ここで、無限大井戸と同様に $k^2 \equiv 2mE/\hbar^2$ とおくと (4-3-35) 式は $\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = -k^2 \varphi(x)$ となるから、その一般解（実数解）は

$$\varphi(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad (4-3-36)$$

となる。

偶パリティの解の条件（4-2-6）式 $d\varphi(x)/dx|_{x=0} = 0$ より、

$$\varphi_{\text{even}}(x) = B \cos kx \quad (4-3-37)$$

奇パリティの解の条件（4-2-7）式 $\varphi(0) = 0$ より、

$$\varphi_{\text{odd}}(x) = A \sin kx \quad (4-3-38)$$

となる²。

¹ $E > 0$ の場合は非束縛状態。4-4節を見よ。

² これらの条件がつく理由は4-2-2節で述べた。

[領域2: $x < -a/2$] [領域3: $x > a/2$]

これらの領域では $V(x) = V_0$ かつ $V_0 > E$ なので

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + V_0 \varphi(x) = E \varphi(x). \quad (4-3-39)$$

これを变形して、

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} &= \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \varphi(x) \\ &= \alpha^2 \varphi(x) \end{aligned} \quad (4-3-40)$$

ここで、 α は³

$$\alpha^2 \equiv \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \quad (> 0) \quad (4-3-41)$$

式(4-3-40)の一般解は α (実数) を使って、

$$\varphi(x) = C e^{-\alpha x} + D e^{+\alpha x} \quad (4-3-42)$$

$x > a/2$ の場合、 $\varphi(x)$ が $x \rightarrow +\infty$ で $\varphi(x) \rightarrow 0$ (有界であるという条件) より、 $D = 0$ でなくてはならない。

$x < -a/2$ の場合、 $\varphi(x)$ が $x \rightarrow -\infty$ で $\varphi(x) \rightarrow 0$ (有界であるという条件) より、 $C = 0$ でなくてはならない。

よって、

$$\varphi(x) = \begin{cases} C e^{-\alpha x} & (x > a/2) \\ D e^{+\alpha x} & (x < -a/2) \end{cases} \quad (4-3-43)$$

この結果は、指数関数で減衰するものの、壁の内側(井戸の外側)でも、「波動関数がゼロでない値を持ち得る」ことを示している。すなわち、この場合、古典力学と異なり、運動エネルギーが負になる領域でも粒子が観測される確率はゼロでない⁴。さらに、 $\alpha = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ なので、 E が大きいほど α は小さくなり、壁の中での減衰は小さくなる。

[$x = \pm a/2$ での接続条件]

上で求めた領域1と領域2あるいは領域3の $\varphi(x)$ 及びその位置微分 $d\varphi(x)/dx$ は $x = \pm a/2$ で連続とならねばならない(井戸内外で $\varphi(x)$ は滑らかにつながる)。

これらの条件より、

$$\text{(偶パリティの場合)} \quad k \tan(ka/2) = \alpha \quad (4-3-44)$$

$$\text{(奇パリティの場合)} \quad -k \cot(ka/2) = \alpha \quad (4-3-45)$$

³ κ (ギリシア文字のカップ) を使う事も多いが、 k と混同しやすいので α の記号を使った。

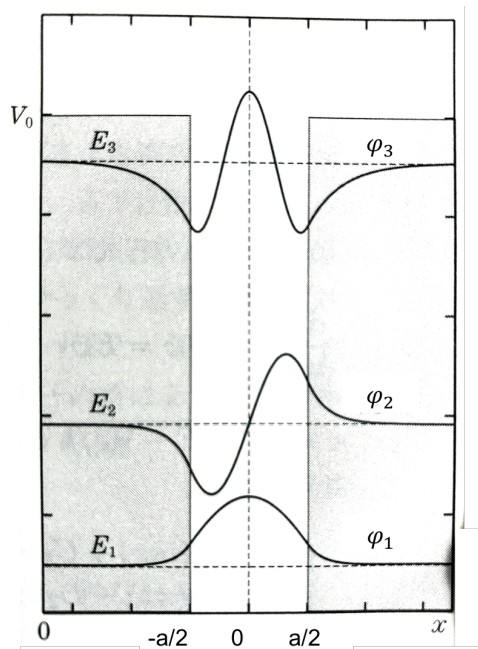
⁴ 浸み出した領域で運動エネルギーが負(運動量が虚数?)になっても、それは運動エネルギーの固有値ではなく、また、全領域での運動エネルギーの期待値は正になる(負になることな無い)事を示せる。

なる式が求まる(演習)。 k, α 共に E を含み、 $k = k(E), \alpha = \alpha(E)$ なので、**これらの式はエネルギー固有値 E_n を求める方程式**になっている。

これらの方程式(4-3-44)(4-3-45)は解析的には解けないので、一般にグラフ解や数値計算⁵により求める方法がある。詳細は本講義では述べないが、グラフ解の場合は、 k, α の定義 ((4-3-3)(4-3-41)式) より出てくる式

$$k^2 + \alpha^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (4-3-46)$$

のグラフ(円のグラフ)と式(4-3-44)あるいは式(4-3-45)のグラフを書いて、その交点から求まる⁶。その結果、エネルギーは量子化され、その離散的な固有状態の数は少なくとも1個はあり、 $V_0 a^2$ の値が増大する(井戸が深くなるか、井戸幅が大きくなる)とその固有状態の数は増えていくことを示せる。井戸が浅いとき($V_0 < \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ のとき)は奇パリティの解は無くなり、束縛状態はただ一つになる。逆に井戸が十分深いときは無限壁井戸の場合に近づく。



ここで、波動関数の形と、エネルギー固有値について、無限障壁井戸と比較しながら定性的な考察をしてみる。

左図には、有限井戸で3個の固有状態 ($n = 1, 2, 3$) が存在する場合の固有関数とエネルギー固有値を示している。4-3節の無限障壁井戸の場合の図と比べてわかることは、

1) 無限障壁井戸と同様に、井戸中では、基底状態から、 $\cos, \sin, \cos, \dots$ と交互に現れる(ただし、**有限個**。その数は $V_0 a^2$ が増大すると増えていく)。量子数 n (エネルギー E_n) の波動関数は $n - 1$ 個の節を持つ。

2) しかし、**波動関数の壁の中への浸み出しがある**。 E_n が大きくなるほど壁の中での減衰は小さくなっていく(染み出しの領域が増えていく)。これは、 E_n が大きくなるほど、(4-3-41)式より α が小さくなるためである。 $V_0 \rightarrow \infty$ の場合(無限障壁井戸の場合)は $\alpha \rightarrow 0$ となり、 $|x| > a/2$ で $\varphi(x)$ の浸み出しが起こらず、常に $\varphi(x)$ ゼロになる。

3) E_n は無限障壁井戸の場合の E_n より小さなっている。例えば、

有限障壁井戸の基底状態の $E_1 < \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 =$ 無限障壁井戸の基底状態の E_1 。この理由は、波動関数の浸み出しにより無限障壁の場合に比べて波動関数が空間的に広がり、運動エネルギーが減少したため(すなわち、波動関数の空間変化が小さくなったため)と考えられる(4-3-1節の一般の n の場合の議論を読み返せ)。

$E > V_0$ の場合は、非束縛状態になるので自由粒子の場合と同様に連続固有値(連続スペクトル)を持つようになる。非束縛状態については4-4節で取り扱う。

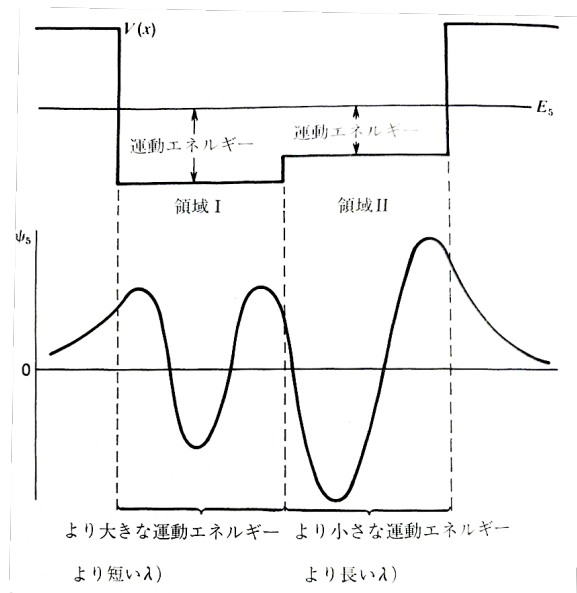
⁵ Schrödinger方程式の1次元ポテンシャルの束縛状態をコンピューターにより求める(差分方程式に直して計算する)方法の原理は、フレンチら著「MIT物理 量子力学入門I」(培風館)4.5節などに述べられている。また、簡単なプログラムコードも示されている。

⁶ 多くの標準的な教科書で扱っている。例えば、猪木ら 著の「量子力学I」(講談社)3-5節参照。

4-3-4. ポテンシャルの深さが位置で変化する場合の束縛状態の波動関数

前節でわかったことの応用として、ポテンシャルの深さが位置で変化する場合の波動関数の形を定性的に考察する⁷。

簡単な場合として、図のような2ステップ型の変形井戸ポテンシャル $V(x)$ を考える。例えば、第4励起状態 ($n=5$)に対応する波動関数 $\psi_5(x)$ はどのような形をしているであろうか⁸。



まず、節の数は $n-1$ なので4個ある。しかし、節は領域1と領域2で均等にならんでいるわけではない。領域1の方が運動エネルギーが大きいので k は大きくなる (波長は短くなる)。また、領域2では運動エネルギーがより小さいので k はより小さくなる (波長は長くなる)。

波動関数の大きさはどうなるであろうか。運動エネルギーが大きい領域1では粒子の滞在時間がより短いと考えると、 $|\psi(x)|^2$ はより小さくなる (従って、 $\psi(x)$ も小さくなる)。また、運動エネルギーが小さい領域2では粒子の滞在時間がより長いと考えると、 $|\psi(x)|^2$ はより大きくなる (従って、 $\psi(x)$ も大きくなる)。

また、井戸の外では波動関数は浸み出し、指数関数的に減衰していく。減衰の程度は $\alpha \propto \sqrt{(V_0 - E)}$ によるので、今の場合は両端で同じ程度となる。ただし、井戸の内外では波動関数は滑らかにつながる必要がある。

これらのことを考慮すると、図のような波動関数になることが予想される。

もっと一般的に、井戸の中で連続的にポテンシャルが変化している場合は、Schrödinger方程式を直接解くのが難しくなる。しかし、多くのステップからそのポテンシャル変化ができてい
ると近似的に考えるならば、上の2ステップ型の場合と同様に定性的にその形を予想できるであ
ろう。

⁷ フレンチら著「MIT物理 量子力学I」(培風館) 3-11節

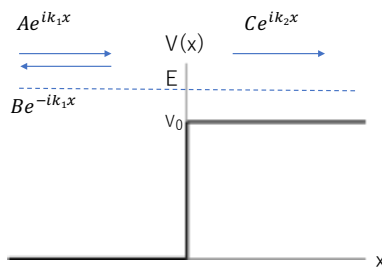
⁸ 座標軸(縦軸)を井戸の中央の x に移動しても $V(x)$ は偶関数ではないが、偶関数からのズレがごく小さいと考えれば、パリティの考え方が定性的(近似的)には使えるだろう。

4-4. 非束縛状態（散乱状態）

前節の「有限の深さの井戸型ポテンシャル」において、 $E > V_0$ の場合、古典的な粒子であれば、無限遠方よりやってきて無限遠方に去っていく。途中、ポテンシャルの大きさが変わるので、その速度は変化するものの、反射する粒子は無く、入射した粒子は全て通過する。量子力学では、この場合でも反射する粒子の確率が存在する。また、高さ V_0 の箱型（矩形型）ポテンシャルがあって $E < V_0$ の場合、波動関数は前節で見たとおりポテンシャル内に染み出すが、壁の幅がごく狭い時は減衰仕切らずにポテンシャルの反対側に現れることがある（トンネル効果）。この節ではこれら非束縛状態の現象をシンプルな階段型や箱型のポテンシャルの場合に見ていく。

4-4-1 階段型ポテンシャル ($E > V_0$)

左図のような階段型のポテンシャル、



$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x \geq 0 \end{cases} \quad (4-4-1)$$

の中を $-\infty$ からエネルギー $E (> V_0 > 0)$ の粒子がやってくる場合を考える。

波動関数

領域 1 ($x < 0$)

この領域では $V(x) = 0$ なので

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = -k_1^2 \varphi(x), \quad k_1 \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (4-4-2)$$

この一般解は、
$$\varphi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad (4-4-3)$$

領域 1 の一般解 $\varphi_1(x)$ を井戸のときのように $\sin, \cos$ の和の形にしなかったのは、非束縛状態なので自由粒子の波動関数の形（運動量の固有状態）になると考え、「入射波」を Ae^{ik_1x} 、（あるとしたら）「反射波」を Be^{-ik_1x} の波動関数の形で表現したかったからである（図を見よ）⁹。反射波が存在しないなら、 $B = 0$ となるはずである。領域 1 では全領域で $V(x) = 0$ なので (4-4-2) の k の定義より、入射波も反射も進行方向が異なる（ k の符号が異なる）だけで同じ波数の大きさを持つ。

領域 2 ($x \geq 0$)

この領域では $V(x) = V_0 (< E)$ なので $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + V_0 \varphi(x) = E \varphi(x)$ より、

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = -k_2^2 \varphi(x), \quad k_2 \equiv \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}. \quad (4-4-4)$$

この一般解は領域 1 の場合と同様に、

$$\varphi_2(x) = Ce^{ik_2x} + (De^{-ik_2x}) \quad (4-4-5)$$

となる。

⁹ すでに述べているように、一般解を $\sin, \cos$ の和で表しても、 e^{ikx} と e^{-ikx} の和で表しても、もちろん数学的には同等である。

式(4-4-5)の右辺の第1項は「透過波」と呼ばれる。第2項は領域2での「反射波」を表すが、今、粒子は $-\infty$ からやってくるという条件をつけているので、領域2に入った波が反射される要因は全くない。したがって、右辺第2項の反射波は不要なので $D = 0$ とおく。また、波数 k_2 は 式(4-4-4)からわかるように、 V_0 があるので、領域1の k_1 より小さくなる（領域2の波長は領域1の波長より長くなる）。これは領域2では運動エネルギーが $T = E - V_0$ となって領域1 ($T = E$) より減るため、運動量が領域1のものより小さくなることに対応している。

以上から、領域1と領域2の波動関数は、それぞれ、

$$\begin{array}{c} \text{入射波} \quad \text{反射波} \\ \left\{ \begin{array}{l} \varphi_1(x) = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} \quad (x < 0) \\ \varphi_2(x) = C e^{ik_2 x} \quad (x \geq 0) \end{array} \right. \quad (4-4-6) \end{array}$$

透過波

$$k_1 \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k_2 \equiv \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \quad (4-4-7)$$

となる。係数は次の接続条件より決める。

接続条件

4-2-1節で述べたように、領域1の波動関数 $\varphi_1(x)$ と領域2の波動関数 $\varphi_2(x)$ は $x = 0$ で連続でなければならない。また、 $x = 0$ でポテンシャルの跳び V_0 があっても有限なので、波動関数の一階微分も $x = 0$ で連続でなければならない。すなわち、 $x = 0$ で両領域の波動関数は滑らかに接続されなければならない。

これらの接続条件を書き出すと、

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0) \text{ より、} \quad A + B = C \quad (4-4-8)$$

$$d\varphi_1(x)/dx|_{x=0} = d\varphi_2(x)/dx|_{x=0} \text{ より、} \quad ik_1 A - ik_1 B = ik_2 C \quad (4-4-9)$$

式 (4-4-8)、(4-4-9)の和と差を作ることにより、

$$\frac{B}{A} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \quad (4-4-10)$$

$$\frac{C}{A} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \quad (4-4-11)$$

が得られる。今、入射波の振幅 A を決めると、 B, C も決まり、全体の波動関数は定まる。

式(4-4-10)より、 $E \gg V_0$ でポテンシャルの影響を無視できる場合 (式(4-4-7)より $k_2 \approx k_1$) でない限り、 $B/A \neq 0$ なので反射波は存在することがわかる。古典的な粒子の場合はポテンシャルの階段があっても $E > V_0$ ならば、運動量 (速度) が変化するだけで 100 % 透過するのに対し、今の場合は反射する粒子が存在する (量子反射)。

ここで、反射率 (R) を

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 \quad (4-4-12)$$

のように入射波と反射波の確率密度の比とすると、透過した割合 (透過率 (T)) は) 反射されない部分の割合であるから

$$T = 1 - R = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{k_2|C|^2}{k_1|A|^2} \quad (4-4-13)$$

のようになる。(透過率を表すのに運動エネルギーと同じ記号 T を使ったので注意)

式(4-4-13)で、透過率 T が単なる入射波と透過波の確率密度の比 $|C|^2/|A|^2$ になっていないことに注意しよう。これは、たとえば、定常的な電荷の流れがあった場合、ある断面を 1 秒間に通過する電荷量は、単に電荷密度 ρ だけでは決まらず ρ と電荷流の速度 v との積、 $j = \rho v$ (流れの密度) で決まっていることと同じである。今、「**確率の流れ**」を考え、その「**流れの密度**」を電荷流の場合と同じように、「**確率密度と流れの速度の積**」と考えると、式(4-4-13)で、分母、分子にそれぞれ k_1, k_2 がかかっている理由がわかる。すなわち、入射波の速度は $v_1 = p_1/m = \hbar k_1/m$ 、透過波の速度は $v_2 = p_2/m = \hbar k_2/m$ なので、 $T = j_2/j_1 = (\rho_2 v_2)/(\rho_1 v_1) = (k_2 \rho_2)/(k_1 \rho_1) = (k_2 |C|^2)/(k_1 |A|^2)$ となり、式(4-4-13) が得られる。

確率の流れの密度

ここで、一般的に 1 次元の場合の「確率の流れの密度」 j を定義しておく。

$$j(x, t) \equiv \frac{\hbar}{2im} \left(\psi^*(x, t) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial x} \psi(x, t) \right) \quad (4-4-14)$$

このように j を定義すると、時間に依存する 1 次元の Schrödinger 方程式から、次のような 1 次元の「連続の式」 という局所的な確率保存の式が得られる¹⁰。

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial j(x, t)}{\partial x} = 0 \quad (4-4-15)$$

この式は、電荷流での電荷保存や流体での質量保存を表す、いわゆる「**連続の式**」と呼ばれる式と同じ形であり、ある領域で積分すると、電荷、質量などの物理量は、その領域の境界から流れ込む量と出て行く量の差になっている (つまり、勝手にその物理量が生成されたり消滅されたりしないという保存を表す) ということがわかる¹¹。今の場合は、「(局所的な) 確率保存」を意味している。

さて、 $\psi(x, t) = A \varphi(x) e^{-i\omega t}$ (ここで $\varphi(x) = e^{ikx}$ と置く) を式 (4-4-14) に代入してみると

$j = |A|^2 (\hbar k / m) = \rho v$ となることがわかり (演習)、式(4-4-13)に対して上で述べた解釈が正しいことを裏付けている。

¹⁰演習. 3次元の場合は、 $\partial \rho / \partial t + \text{div } \mathbf{j} = 0$ となる。 $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$ 。

¹¹ 演習

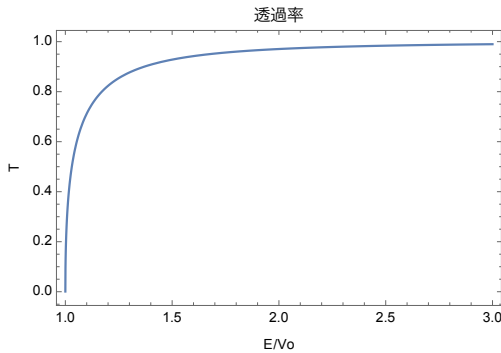
そこで、

$$j_I = |A|^2 (\hbar k_1 / m), \quad j_R = |B|^2 (\hbar k_1 / m), \quad j_T = |C|^2 (\hbar k_2 / m) \quad (4-4-16)$$

と定義すると、

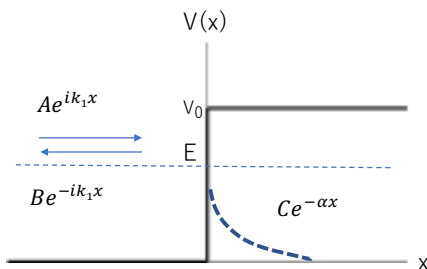
$$R = \frac{j_R}{j_I} = \frac{k_1 |B|^2}{k_1 |A|^2} = \frac{|B|^2}{|A|^2}, \quad T = \frac{j_T}{j_I} = \frac{k_2 |C|^2}{k_1 |A|^2} \quad (4-4-17)$$

となり、式(4-4-12)、(4-4-13)が得られる。また、透過率 $T = 1 - R$ は $j_T = j_I - j_R$ に対応している。



左の図は透過率 $T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$ を (4-4-7) を使って E/V_0 の関数として表し、プロットしたものである。 $E/V_0 = 1$ の時は全反射が起き透過率が0になる。 $E/V_0 > 1$ では古典的粒子の場合と異なり、透過率はすぐには1にならない。 E/V_0 が大きくなるとしだいに透過率が増え、 $E/V_0 \gg 1$ では、ほとんどすべてが透過するようになる。

4-4-2 階段型ポテンシャル ($E < V_0$)¹²



前節と同じ階段型のポテンシャルの中を $-\infty$ からエネルギー $E < V_0$ の粒子がやってくる場合を考える。古典力学では、 $x \geq 0$ で運動エネルギーは負になってしまうので、 $x = 0$ で完全に反射され $-\infty$ まで戻って行く。量子力学では、4-4-3節の有限障壁井戸で扱ったように、 $x \geq 0$ の領域にも波動関数が浸み出して行く。

$E < V_0$ でのSchrödinger方程式の一般解は、

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} & (x < 0) \\ \varphi_2(x) = C e^{-\alpha x} + (D e^{+\alpha x}) & (x \geq 0) \end{cases} \quad (4-4-18)$$

となるが、 $x \rightarrow +\infty$ で $\varphi_2(x) \rightarrow 0$ とならなければならないので、 $D = 0$ となる。

また、 $x = 0$ で $\varphi_1(0) = \varphi_2(0)$ 、 $d\varphi_1(x)/dx|_{x=0} = d\varphi_2(x)/dx|_{x=0}$ の連続の条件（なめらかに接続する条件）をつけると、

$$\frac{B}{A} = \frac{k_1 - i\alpha}{k_1 + i\alpha}, \quad \frac{C}{A} = \frac{2k_1}{k_1 + i\alpha} \quad (4-4-19)$$

が得られる。したがって、入射波の振幅Aを決めると、B、Cも決まり、全体の波動関数は定まる。

¹² 講義の補足

前節と同様に、反射率を求めると、

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1 \quad (4-4-21)$$

となる。すなわち、波動関数の染み出しはあるものの、完全に反射され、透過波は無い ($T = 1 - R = 0$)。

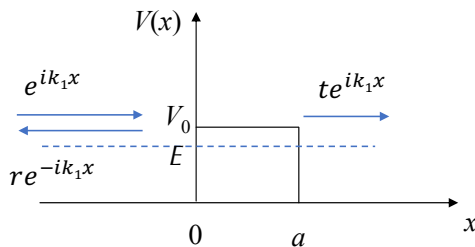
実際、 j_T を

$$\varphi_2(x) = A \left(\frac{2k_1}{k_1 + i\alpha} \right) e^{-\alpha x} \quad (4-4-22)$$

を使って 式 (4-4-14) から計算すると $j_T = 0$ となる¹³。よって、透過率 $T = j_T/j_I = 0$ が得られる。 $\varphi_2(x)$ は $x \geq 0$ の領域に浸み出しているのだが、確率の流れの密度 j_T としては0になっている。

4-4-3 箱型ポテンシャル（トンネル効果）¹⁴

次のような幅 a の箱型ポテンシャルの中を $-\infty$ からエネルギー $E < V_0$ の粒子がやってくる場合を考える（左図）。



$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0) \\ V_0 & (0 \leq x \leq a) \\ 0 & (x > a) \end{cases} \quad (4-4-23)$$

それぞれの領域で波動関数は、

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = e^{ik_1x} + re^{-ik_1x} & (x < 0) \\ \varphi_2(x) = Ae^{\alpha x} + Be^{-\alpha x} & (0 \leq x \leq a) \\ \varphi_3(x) = te^{ik_1x} & (x > a) \end{cases} \quad (4-4-24)$$

とおける。ただし、入射波の係数は1、反射波の係数をr、透過波の係数をtとおいた。 $0 \leq x \leq a$ の領域では (4-4-24) のように、係数をA, Bとおいた（箱は有限の幅なので、 $A = 0$ とはならないことに注意）。

$x = 0$, $x = a$ での波動関数とその1次微分が連続である条件をつけて、透過率を求めると¹⁵、

$$T = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2 \left(\sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} a \right)} \quad (4-4-25)$$

が得られる。

今、 $\alpha a \gg 1$ の場合、(4-4-25)は

$$T \simeq \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\alpha a} \quad (4-4-26)$$

と近似される。

¹³ 演習

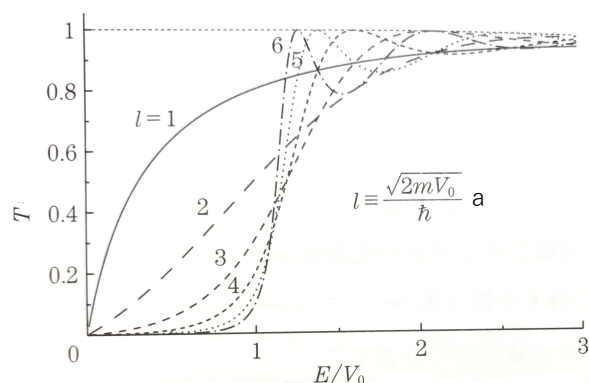
¹⁴ 講義の補足

¹⁵ 猪木、川合 著「量子力学Ⅰ」（講談社）3-3節

ただし、

$$\alpha \equiv \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}. \quad (4-4-27)$$

$E < V_0$ の場合、古典論では粒子はポテンシャル障壁を通り抜けないが、(4-4-25)のように透過率は0にならないので、透過する確率が存在する。このような効果を「トンネル効果」という。 $V_0 - E$ や 箱の幅 a が増加すると、(4-4-26)からわかるように、透過率は急速に減少する。



左図は、透過率を $l \equiv (\sqrt{2mV_0}/\hbar)a$ でどうなるかを表したものである¹⁶。この図には $E > V_0$ の場合も入っている¹⁷。 l が小さい時 (V_0 か a が小さい時) は、ポテンシャル障壁を通り抜ける確率はかなり大きくなる。また、興味深いのは、 $E > V_0$ において、特別な E/V_0 の時 ($k_2 a = n\pi$ ($n = 1, 2, \dots$)) に透過率が1、反射率が0になることである。ただし、 k_2 は $E > V_0$ の時の、 $0 \leq x \leq a$ での波数である。これは $0 \leq x \leq a$ で干渉による反射波の抑制が起きて一種の「共鳴」現象が起きている為である¹⁸。

トンネル効果は、実験的には、原子核の α 崩壊、電場による金属からの電子の放出、江崎ダイオード、ジョセフソン効果、核融合¹⁹など多くの現象で知られている。

¹⁶ 勝本 著 「量子の匠、実験量子力学」 4-3節

¹⁷ 本講義では詳しい計算は省略する。前出の猪木、川合 著 「量子力学Ⅰ」 3-3節参照

¹⁸ 脚注15,16の教科書参照

¹⁹ 古典力学的には、陽子どうしはクーロンポテンシャルにより衝突できないが、量子力学ではトンネル効果により陽子と陽子が接触する確率が存在し核融合が生じる。

演習11

1. 4-3-3節の有限深さの井戸型ポテンシャル $V(x) = \begin{cases} 0 & |x| \leq \frac{a}{2} \\ V_0 & |x| > \frac{a}{2} \end{cases}$ において、 $E < V_0$ の時、 $x = \pm a/2$ で波動関数

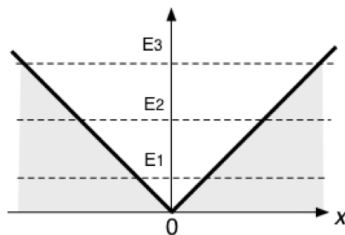
とその1次微分が連続となる条件より、

$$\text{偶パリティの場合} \quad k \tan(ka/2) = \alpha, \quad \text{奇パリティの場合} \quad -k \cot(ka/2) = \alpha$$

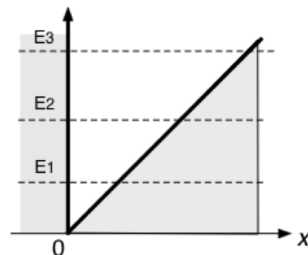
なるエネルギー固有値を求める式が得られることを示しなさい。ただし、 $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ 。

2. 次のようなポテンシャル $V(x)$ がある時、固有関数 $\varphi_n(x)$ はどのような形となるか。定性的に考察し、量子数が $n=1, 2, 3$ に対応する固有関数の概略の形を描け。図中の E_1, E_2, E_3 は固有エネルギーを表すとする。

(1) $V(x) = a|x|$



(2) $V(x) = ax \ (x > 0), \ V(x) = \infty \ (x < 0)$



3. 時間に依存する1次元Schrödinger方程式から、局所的な確率保存を表す1次元の「連続の式」

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial j(x, t)}{\partial x} = 0 \text{ が導けることを示せ。}$$

ただし、 ρ は確率密度 $|\psi(x, t)|^2$ 、また、 $j(x, t)$ は確率の流れの密度、

$$j(x, t) \equiv \frac{\hbar}{2im} \left(\psi^*(x, t) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial x} \psi(x, t) \right)$$

である。また、 $\psi(x, t) = A e^{ikx} e^{-i\omega t}$ (ここで $\varphi(x) = e^{ikx}$ と置く) の時、 $j = |A|^2 (\hbar k / m) = \rho v$ となることを示せ。

さらに、「連続の式」を狭い範囲で積分し、確率保存を表すことを示しなさい。

4. 4-4-1, 4-4-2節の階段型ポテンシャル $V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x \geq 0 \end{cases}$ において、粒子が $-\infty$ から $E < V_0$ のエネルギーでやってくる時、

- 1) $x \geq 0$ の波動関数が $\varphi_2(x) = A \left(\frac{2k_1}{k_1 + i\alpha} \right) e^{-\alpha x}$ となることを示せ。ただし、 $\alpha = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar, k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$

- 2) 反射率が1になることを示しなさい。

- 3) φ_2 で 確率の流れの密度 j_T を計算し0となることを示せ。

- 4) V_0 が 10 eV の時、 E が 6 eV の電子を $x < 0$ から入射した。 $x > 0$ に浸み出す波動関数の距離がどの程度か計算せよ。ただし、浸み出す波動関数の距離は、電子を見出す確率が $x = 0$ での値の $1/e$ になる距離とする。