

I. トンネル効果

通常の古典力学的状況で、質量 m の物体に初速 v を与えて、高さ h の壁を乗り越えさせることを考える。このとき、速度の鉛直方向成分 v_y からの運動エネルギーへの寄与 $E = \frac{1}{2}mv_y^2$ が、壁の高さでの物体の位置エネルギー $V_0 = mgh$ よりも小さい場合、つまり $E < V_0$ の場合には、物体が壁を乗り越えることは決して無い (図1)。

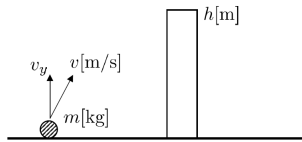


図1

しかし、量子力学の場合、粒子性と同時に波動性が現れるために、 $E < V_0$ の場合であっても「壁の幅が有限の場合には通り抜ける可能性」がある。これはトンネル効果とよばれ、古典力学では決して起こり得ない量子系特有の性質である。

トンネル効果を示す最もシンプルな量子系として、時間に依存しないポテンシャルエネルギー $V(x)$ の場の中を運動する量子力学的粒子の1次元系を取り上げる。この場合の粒子の振る舞いは、定常状態のシュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

に従って決定される。ここで $\psi(x)$ は波動関数であり、粒子の量子論的状態を表す。また \hbar はプランク定数、 E はエネルギー固有値を表す。いま、ポテンシャル $V(x)$ として中心が $x = 0$ で幅 $2a$ の矩形ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{領域 I } (x < -a) \\ V_0 & \text{領域 II } (-a < x < a) \\ 0 & \text{領域 III } (a < x) \end{cases}$$

をとり、 $E < V_0$ の場合を考える。ただし、 V_0 は実数であるとする。シュレーディンガー方程式 (1) の一般解は、各領域に対して次式で与えられる：

$$\psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (2)$$

$$\psi_{II}(x) = Ce^{-Kx} + De^{Kx}, \quad (3)$$

$$\psi_{III}(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}. \quad (4)$$

ここで $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, $K = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ である。また、 e^{ikx} は右向き、 e^{-ikx} は左向きの波を表す (図2)。

このように、シュレーディンガー方程式に従う粒子の状態は、一般には複数の波動の重ね合わせで表される。

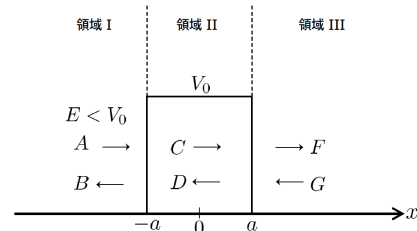


図2

但し、波動関数 $\psi_I, \psi_{II}, \psi_{III}$ は、各領域の境界において次の接続条件を満たさねばならない：

$$\psi_I(-a) = \psi_{II}(-a), \quad \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a), \quad (5)$$

$$\frac{d\psi_I}{dx}(-a) = \frac{d\psi_{II}}{dx}(-a), \quad \frac{d\psi_{II}}{dx}(a) = \frac{d\psi_{III}}{dx}(a). \quad (6)$$

標準的な量子力学の教科書では、これらの接続条件から導かれる係数間の関係と、確率保存の式を直接用いてトンネル効果を考察することになる。

本講演では、上述のような1次元系の定常状態が示すトンネル効果を調べる手法として、多くの教科書ではあまり解説されていない転送行列を用いた手法 [1] とその特徴を紹介する。

II. 確率保存則と時間反転不変性

領域 I と領域 III はどちらも $V(x) = 0$ であり物理的に全く同じ状態である。従って、この二つの領域での波動関数は一方が定まった時、相互の係数の間には線形関係がある：

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \mathbb{M} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}. \quad (7)$$

この行列 \mathbb{M} を転送行列という。上式は、外からポテンシャルへ向かう波の係数 A, G と、ポテンシャルから外に向く波の係数 B, F の間の線形関係として表すこともできる：

$$\begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix} = \mathbb{S} \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix}. \quad (8)$$

この行列 \mathbb{S} を散乱行列という。以下では、この系で成り立つ保存則と対称性が、 \mathbb{M} と \mathbb{S} に対してどのような制限を与えるか調べる。

まず、確率保存則に着目する。確率密度流 j は、 ψ とその複素共役 ψ^* を用いて

$$j(x) = \frac{\hbar}{2im} \left[\psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} - \frac{d\psi^*(x)}{dx} \psi(x) \right] \quad (9)$$

で与えられ、確率保存は $\partial(\psi^*\psi)/\partial t + \partial j/\partial x = 0$ と表される。定常状態の場合には $dj/dx = 0$ だから、 $j_I = j_{III}$ が成り立つ。このことから、 \mathbb{S} のユニタリー性

$$\mathbb{S}^\dagger \mathbb{S} = \mathbb{I}, \quad \mathbb{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (10)$$

が導かれる。ただし \mathbb{S}^\dagger は \mathbb{S} の複素共役転置

$$\mathbb{S}^\dagger = {}^t \mathbb{S}^* = \begin{pmatrix} S_{11}^* & S_{21}^* \\ S_{12}^* & S_{22}^* \end{pmatrix}$$

を表す。

次に、シュレーディンガー方程式 (1) の時間反転を考える。この操作は $t \rightarrow -t$ と置き換えると同時に複素共役を取る操作であるが、(1) は t を含まないので、単に複素共役を取る操作となる。今、 V_0 は実数だから解 ψ の時間反転

$$\psi_I^*(x) = A^* e^{-ikx} + B^* e^{ikx} \quad (11)$$

$$\psi_{II}^*(x) = C^* e^{-Kx} + D^* e^{Kx} \quad (12)$$

$$\psi_{III}^*(x) = F^* e^{-ikx} + G^* e^{ikx} \quad (13)$$

も ψ と同じシュレーディンガー方程式を満たす。これらと (2)~(4) を見比べると、時間反転操作は、係数に対する置き換え操作 $A \leftrightarrow B^*$ ($A^* \leftrightarrow B$) 及び $F \leftrightarrow G^*$ ($F^* \leftrightarrow G$) に対応している。この置き換えにより、係数間の関係 (8) は

$$\begin{pmatrix} A^* \\ G^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B^* \\ F^* \end{pmatrix} \quad (14)$$

に置き換わる。この式の複素共役を取り (8) に代入すれば、行列 \mathbb{S} に関する新たな条件

$$\mathbb{S}^* \mathbb{S} = \mathbb{I} \quad (15)$$

が導かれる。これと条件 (10) をあわせれば

$${}^t \mathbb{S} = \mathbb{S} \quad (16)$$

となり、定常状態で時間反転対称性をもつ 1 次元系の \mathbb{S} は対称行列であることが結論される。 \mathbb{S} の性質 (10), (16) を用いると、(7), (8) から \mathbb{M} が

$$\mathbb{M} = \begin{pmatrix} 1 & S_{11}^* \\ S_{12} & S_{12}^* \\ S_{11} & 1 \\ S_{12} & S_{12}^* \end{pmatrix}, \quad \det \mathbb{M} = \frac{1 - |S_{11}|^2}{|S_{12}|^2} = 1 \quad (17)$$

であることがわかる。

III. 透過確率の同等性

以上の準備のもと、透過確率を行列成分で表すことでその性質を調べる。まず、粒子が領域 I 側から右向きにポテンシャルへ入射する状況を考える。これは $G = 0$ の場

合に対応しており、このとき Ae^{ikx} は入射波を、 Be^{-ikx} は反射波を、 Fe^{ikx} は透過波を表す。(7) 及び (17) から、右向き入射の場合の透過確率 T_R は

$$T_R := \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \frac{1}{|M_{11}|^2} = |S_{12}|^2 \quad (18)$$

と求まる。次に、粒子が領域 III 側から左向きにポテンシャルへ入射する状況を考える。(2)~(4) で $k \rightarrow -k$ と置き換えると、 Fe^{-ikx} は入射波を、 Ge^{ikx} は反射波を、 Ae^{-ikx} は透過波を表す。(7) に対応する係数間の関係が

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{22} & -M_{12} \\ -M_{21} & M_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad (19)$$

となる。粒子が左向きに入射することは、領域 I における右向き波が存在しないこと ($B = 0$) に対応するから、左向き入射の場合の透過確率 T_L は

$$T_L := \left| \frac{A}{F} \right|^2 = \frac{1}{|M_{22}|^2} = |S_{12}|^2 = T_R \quad (20)$$

となり、透過確率が入射の向きによらない事がわかる。

上記の透過確率の同等性は、ポテンシャルが実関数であることに由来する時間反転対称性だけから結論されているために、ポテンシャルの形状に依らず成り立つ。つまり、同じことが $V(-x) \neq V(x)$ のポテンシャルの場合でも成り立つ。特定の非対称ポテンシャルのもとで透過確率の同等性を直接示す計算は例えば文献 [2, 3, 4] にみられるが、転送行列を用いる方法ではポテンシャルの関数形を参照した詳しい計算なしに、時間反転対称性を有する系に対して一般的に示すことができる。

行列 \mathbb{M} や \mathbb{S} を用いた解析手法のより現実的な系への応用として、超伝導接合系 [5, 6, 7] のように、系の波動関数が内部自由度をもつ場合への拡張がある [8]。

参考文献

- [1] E. Merzbacher, 「Quantum Mechanics 3rd Edition」 JOHN WILEY & SONS (1998).
- [2] M.R.A. Shegelski and C. Sample, Eur. J. Phys. Vol.41, (2020) no.035405.
- [3] P.L. Garrido, L. Goldstein, S. Lukkarinen, and R. Tumulka, Am. J. Phys. Vol.79, (2011) p.1218.
- [4] ランダウ-リフシッツ, 「量子力学 1」東京図書 (1983).
- [5] G. E. Blonder, M. Tinkham, and T. M. Klapwijk, Phys. Rev. **B** Vol.25, (1982) p.4515.
- [6] Y. Tanaka and S. Kashiwaya, Phys. Rev. Lett. Vol.74, (1995) p.3451.
- [7] 家泰弘, 「超伝導」朝倉書店 (2005).
- [8] A. Mills, D. Rainer, and J.A. Sauls, Phys. Rev. **B** Vol.51, (1988) p.4504.