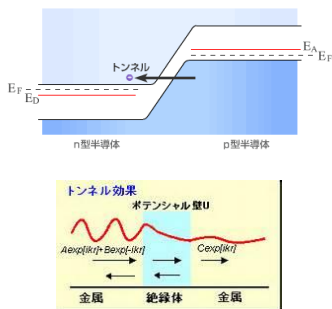


【有限の深さの量子井戸】



半導体のトンネル効果と
金属・絶縁体・金属のトンネル効果

先週は、一次元のシュレジンガー波動方程式を解く練習として、**無限に深く**、とても狭いポテンシャルの井戸（量子井戸）の中に閉じ込められた一個の電子の波動関数を具体的に求めました。一旦電子の波動関数が求まると、実際に観測できる運動エネルギーや位置の期待値が求められることを示しました。

今週は、無限に大きくはなく、中途半端な値を持ったポテンシャルに閉じ込められた一個の電子について考えてみます。今度はポテンシャルの高さが無限大ではないので、電子を見出す確率がポテンシャルの井戸の外にも出てきます。いわゆる「**トンネル効果**」です。

古典的なニュートン力学では、このポテンシャルの井戸の外にも電子が存在するという考えをすることは出来ません。量子力学的効果の典型的な例です。シュレジンガーの波動方程式を立てて、その微分方程式を解く手順は先週と同じです。つまり $(H-E)\Psi = 0$ で表されるシュレジンガーの波動方程式で、 H で表されるハミルトニアンは、運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの和で、電子の全エネルギーを表しますが、再びこの手順を具体的に書き表わすと次のようになります。

- ① シュレジンガーの波動方程式を立てる。
- ② ハミルトニアン H 中の運動エネルギーとポテンシャルエネルギーを定式化する。
- ③ 微分方程式を解いて、波動関数 Ψ を求める。一般解が得られる。
- ④ 境界条件と規格化条件から、一般解の定数項を決める。
- ⑤ 波動関数が決まる。

有限な深さの量子井戸では、以下のようなポテンシャルで電子1個の固有値を求めます。

$$U(x) = \begin{cases} -V_0 & |x| \leq a \\ 0 & |x| > a \end{cases} \quad \text{無限大のポテンシャル問題では、量子井戸の底をポテンシャルエネルギー} = \text{ゼロとして、}$$

無限大のポテンシャルを考えましたが、今回は量子井戸の底を $-V_0$ として、その外側のポテンシャルをゼロとします。ポテンシャルエネルギーは電圧や重力等と同じで相対的な値なので、どこを基準のゼロにしても構わないからです。これに対する1次元のシュレジン

ガー方程式は、 $\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - (E - U(x)) \right\} \psi(x) = 0$ となります。{}の中がハミルトニアン $H-U$ です。

運動エネルギー（マイナス）ポテンシャルエネルギーとなります。

ここで、電子が量子井戸の中に存在する場合ははじめに考えたいので、 $E < 0$ の場合を考えます。

【井戸に電子が束縛される解】

この問題は、

(a) $x < -a$, (b) $-a < x < a$, (c) $x > a$ の3つの場合に分けて考えます。(a)と(c)の場合は、先週行なった

$$U(x)=0 \text{ ですから、同じ方程式 } \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - E \right) \psi(x) = 0 \text{ を解けばよいので、}$$

$\kappa = \sqrt{\frac{2m(-E)}{\hbar^2}}$ において、(κ はギリシャ語のカッパーと読み、英語の k に相当する文字です。)

$\left(\frac{d^2}{dx^2} + \kappa^2\right)\psi(x) = 0$ の方程式と変形されますから、この一般解を同じように、(a)の $x < -a$ の部分

では

$$\psi_a(x) = C_1 e^{i\kappa x} + C_2 e^{-i\kappa x} \quad (C_1, C_2 \text{ は任意の定数}) \quad \text{数式 1}$$

そして(c)の $x > a$ の部分では

$$\psi_c(x) = C_3 e^{i\kappa x} + C_4 e^{-i\kappa x} \quad (C_3, C_4 \text{ は任意の定数}) \quad \text{数式 2}$$

となります。

(b)の $-a < x < a$ の部分では、つまり量子井戸の底の部分では、量子井戸の底から測ったエネルギーは $E + V_0$ が正の値になるので、 $k = \sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}}$ と改めて置き換えると

$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right)\psi(x) = 0$ のように同じ形の微分方程式に変形されますから、その一般解も

$$\psi_b(x) = C_5 e^{ikx} + C_6 e^{-ikx} \quad (C_5, C_6 \text{ は任意の定数}) \quad \text{と同じ形で得られます。}$$

次にこれらの一般解の定数を決めるわけですが、これは a, b, c の 3 つの領域で、**電子の波が連続している**・・・という条件を用います。しかも、ずっと遠くでも、電子の波動関数が有限の値を持つ**(発散しない・無限大にならない・収束すると言います)**という当たり前の事実を使います。まず、 $x = -\infty$ では Ψ_a が有限の値を持つという条件から Ψ_a の指数関数の $-kx$ 項が無限大になってはいけませんから、定数の C_2 がゼロであることが導かれます。同じように $x = +\infty$ でも Ψ_c が有限の値を持つ必要がありますから、 Ψ_c の指数関数の kx 項が有限の値になるために、定数 C_3 がゼロになる必要があります。これで、3 つの一般解の中の 6 つの定数は 4 つになりました。 $C_2 = C_3 = 0$ と決まりました。

【波動関数の連続性】

残りの定数は、電子の波動関数がつながっている・・・連続しているという条件で決めます。ある曲線と曲線が連続しているというのは、それぞれの曲線の値と微係数が同じ値を持つ、曲線の値が同じで、しかも傾きが等しくなると、曲線は連続しているという事です。これは、量子井戸の両端、 $-a$ と a で連続しているという条件です。

これを式で表すと、 $\psi_a(-a) = \psi_b(-a)$, $\psi'_a(-a) = \psi'_b(-a)$ です。

$$\begin{aligned} C_1 e^{-ika} &= C_5 e^{-ika} + C_6 e^{ika} \\ C_1 k e^{-ika} &= k(C_5 e^{-ika} - C_6 e^{ika}) \end{aligned} \quad \text{数式 3} \quad \text{となります。}$$

井戸のもう一方の端である $x = a$ でも同じように $\psi_b(a) = \psi_c(a)$, $\psi'_b(a) = \psi'_c(a)$ ですので、

$$C_4 e^{-ika} = C_5 e^{ika} + C_6 e^{-ika} \quad \text{数式 4 となります。}$$

$$-C_4 k e^{-ika} = k(C_5 e^{ika} - C_6 e^{-ika})$$

これは要するに、4つの未知数(C_1, C_4, C_5, C_6)に対して、4つの方程式がありますから、これは4つの未知数を定めることができます。

この4つの連立方程式を分かりやすいように 4×4 の行列の形で書くと、

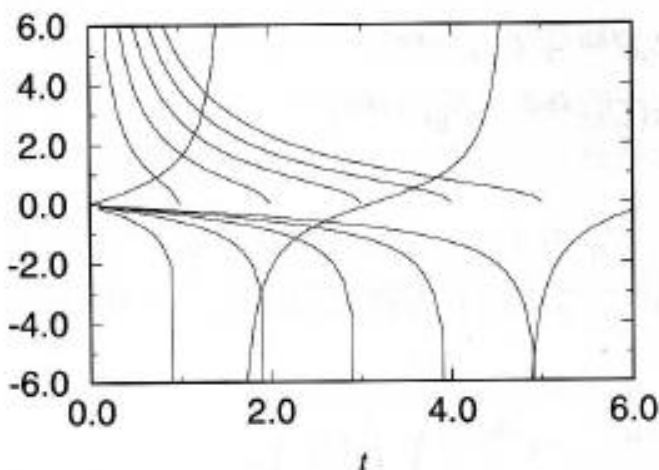
$$AC \equiv \begin{pmatrix} e^{-ika} & 0 & -e^{-ika} & -e^{ika} \\ k e^{-ika} & 0 & -k e^{-ika} & k e^{ika} \\ 0 & e^{-ika} & -e^{ika} & -e^{-ika} \\ 0 & -k e^{-ka} & -k e^{ika} & k e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_4 \\ C_5 \\ C_6 \end{pmatrix} = 0 \quad \text{と表されます。}$$

これを満たす最も簡単な解は、 C つまり波動関数の定数がすべてゼロであるものですが、それでは電子が全く存在しないことになってしまいますから、それは除きます。電子が存在する解、つまり C がゼロでない解を持つためには、行列 A の行列式がゼロになることが必要となります。この条件から、 $\det(A) = 4e^{-2ka} \{k \cos(ka) + \kappa \sin(ka)\} \{k \sin(ka) - \kappa \cos(ka)\}$ が求められます。

$\det(A) = 4e^{-2ka} \{k \cos(ka) + \kappa \sin(ka)\} \{k \sin(ka) - \kappa \cos(ka)\}$ で、指数関数の項はゼロになりませんから、残りの三角関数部分がゼロになる必要があります。従って

$$\tan(ka) = -\frac{k}{\kappa} \quad \text{または} \quad \tan(ka) = +\frac{\kappa}{k} \quad \text{数式 5 になる必要があります。}$$

しかしこれは、「**超越方程式**」と呼ばれ、解析的な解は得られません。数値的に解く必要があります。



$$\tan(ka) = -\frac{k}{\kappa} \quad \text{または} \quad \tan(ka) = +\frac{\kappa}{k} \quad \text{数式 5}$$

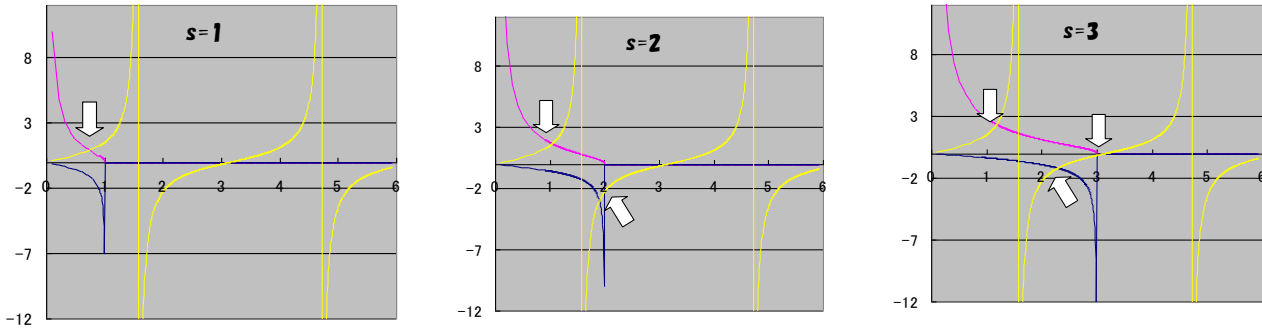
5 は、グラフで描くと、周期的にゼロから無限大まで変化する関数と、右辺との交点が解を与えるので、ここで言いたいことは、離散的なエネルギー準位を与え、そして、有限のポテンシャルエネルギーに閉じ込められた電子の波動は、ポテンシャルの壁の中にも浸み込んでいくということです。これを**トンネル現象**と言います。

【グラフによる解法】

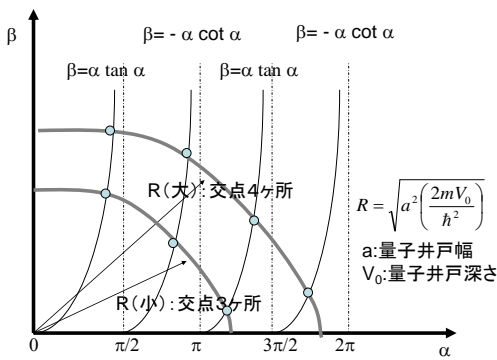
図には、 $t = ka$ において、上式 (数式 8) の左辺 $\tan(t)$ のグラフと、

$$s = \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}} \quad \text{において、右辺の} \quad -\frac{k}{\kappa} = -\frac{t}{\sqrt{s^2 - t^2}} \quad (\text{負の部分}) \quad \text{と} \quad \frac{\kappa}{k} = \frac{\sqrt{s^2 - t^2}}{t} \quad (\text{正の部分}) \quad \text{を示し}$$

ました。図では、右側のグラフは、 $s=1,2,3,4,5$ の場合を示しました。この、左辺と右辺の交点が求める解になる。この特徴は、 s の値が大きくなる ($s = \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}}$ だから、つまり量子井戸の深さ V_0 が深くなるか、あるいは量子井戸の幅 a が広がる) とともに、交点の数が増えていく・・・つまり解となる離散的な状態の数が増えていくという特徴が見て取れる。



【別の考え方】



$\cot(ka) = -\frac{\kappa}{k}$ または $\tan(ka) = +\frac{\kappa}{k}$ の性質について。

ここで、 $\alpha = ka$ 、 $\beta = \kappa a$ とすると、上の式は、

$\cot(\alpha) = -\frac{\beta}{a} \times \frac{a}{\alpha}, \Rightarrow \alpha \cot(\alpha) = -\beta$

$\tan(\alpha) = \frac{\beta}{a} \times \frac{a}{\alpha}, \Rightarrow \alpha \tan(\alpha) = \beta$

$\alpha^2 + \beta^2 = a^2(k^2 + \kappa^2) = a^2\left(\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2} + \frac{2m(-E)}{\hbar^2}\right) = a^2\left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)$

この最後の式は、 $x^2 + y^2 = R^2$ と同じ形であり、半径 R の円を表す。 α と β はどちらも正なので、

エネルギー固有値は、半径 $R = \sqrt{a^2\left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)}$ の円と、 $\alpha \cot(\alpha) = -\beta$ 、 $\alpha \tan(\alpha) = \beta$

の第一象限 (α も β も正の値のところ) での交点として与えられる。

$\alpha \cot(\alpha) = -\beta$ 、 $\alpha \tan(\alpha) = \beta$ は、 α が $0, \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}$ で値がゼロまたは無限大になる単調に増加する関

数ですから、半径 R が大きくなるほど交点の数、つまり存在可能なエネルギー固有値 (エネルギー準位) の数も増える。半径 R が大きいということは、量子井戸のポテンシャルが深い・・・あるいは量子井戸の幅が広い事に対応する。量子井戸のポテンシャルが深い程あるいは量子井戸の幅が広い程、多くのエネルギー準位が存在できることを意味する。その様子を図に示します。