# 1次元ポテンシャル障壁問題 -透過率計算-

質量 $m$ の電子が $x$ 軸上を運動している。この電子の波動関数を $\psi(x)$、エネルギーを $E$ とする。次の 1 次元ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & (0 \leq x \leq a) \\ 0 & (\text{others}) \end{cases}$$

に $x = -\infty$ から入射する電子の透過率を計算する。ただし $V_0$ はある有限の値であり、$E < V_0$ を満たすものとする。

$\psi(x)$ が従うシュレーディンガー方程式は

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

で与えられる。上記の方程式の解は、0 以外の値をとる定数 $A, B, C, D, F$ を用いて、以下のように $x$ の各領域において積分することで求めることができる。

(i)$x < 0$ において (1) は、

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = -k^2\psi(x)$$

ここで、$k = \sqrt{2mE}/\hbar$ とおいた。両辺に $\psi(x)$ の $x$ に関する一階微分をかけ、式変形すると

$$\frac{d}{dx}\left\{ \frac{1}{2}\left(\frac{d\psi}{dx}\right)^2 \right\} = \frac{d}{dx}\left\{ -k^2\frac{1}{2}\psi^2 \right\}$$

$$\frac{d}{dx}\left\{ \left(\frac{d\psi}{dx}\right)^2 + k^2\psi^2 \right\} = 0$$

よって、$x$ に依らない定数 $l$ を用いて

$$\left(\frac{d\psi}{dx}\right)^2 + k^2\psi^2 = l$$

と表せることになる。両辺を $l$ で割って

$$\left(\frac{1}{\sqrt{l}}\frac{d\psi}{dx}\right)^2 + \left(\frac{k\psi}{\sqrt{l}}\right)^2 = 1$$

これより $\psi$ と $d\psi/dx$ はそれぞれ、$x$ に依存するパラメータ $\theta$ を用いて、

$$\frac{d\psi}{dx} = \sqrt{l}\cos\theta, \quad \psi = \frac{\sqrt{l}}{k}\sin\theta$$

と表せる。$\psi = \sqrt{l}\sin\theta/k$ の一階微分が $\sqrt{l}\cos\theta$ に一致することから、定数 $\delta$ を用いて

$$\theta = kx + \delta$$

と決まる。これより波動関数は

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{l}}{k}\sin(kx+\delta) = \frac{\sqrt{l}}{k}\left(\frac{e^{i\delta}}{2i}e^{ikx} - \frac{e^{-i\delta}}{2i}e^{-ikx}\right) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \tag{2}$$

のように得られる。ただし、複素定数 $A = \sqrt{l}e^{i\delta}/2ik$、$B = -\sqrt{l}e^{-i\delta}/2ik$ を用いて表した。(2) 式の右辺一項目は $x$ 軸正方向に進行する入射波、二項目は $x$ 軸負方向に進行する反射波を表していると考えることが

できる。
(ii)$0 \leq x \leq a$ において、(1) は

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = \kappa^2\psi(x)$$

となる。ただし $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ とおいた。(i) と同じ手順で上式を変形していくと、$\psi$ と $d\psi/dx$ が定数 $l'$ を用いて

$$\left(\frac{1}{\sqrt{l'}}\frac{d\psi}{dx}\right)^2 - \left(\frac{\kappa\psi}{\sqrt{l'}}\right)^2 = 1$$

と書けることが示される。これより $\psi$ と $d\psi/dx$ はそれぞれ、$x$ に依存するパラメータ $\theta'$ を用いて、

$$\frac{d\psi}{dx} = \sqrt{l'}\cosh\theta', \quad \psi = \frac{\sqrt{l'}}{\kappa}\sinh\theta'$$

と表せる。$\psi = \sqrt{l'}\sinh\theta'/\kappa$ の一階微分が $\sqrt{l'}\cosh\theta'$ に一致することから、定数 $\delta'$ を用いて

$$\theta' = \kappa x + \delta'$$

と決まる。これより波動関数は

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{l'}}{\kappa}\sinh(\kappa x + \delta') = \frac{\sqrt{l'}}{2\kappa}\left(e^{\delta'}e^{\kappa x} - e^{-\delta'}e^{-\kappa x}\right) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x} \tag{3}$$

のように得られる。ただし、複素定数 $C = \sqrt{l'}e^{\delta'}/2\kappa$、$D = -\sqrt{l'}e^{-\delta'}/2\kappa$ を用いて表した。
(iii)$x > a$ においても (i) と同様の手順を踏めば良いが、$x = \infty$ から進行してくる波は無いという条件から

$$\psi(x) = Fe^{ikx} \tag{4}$$

のようになる。

以上をまとめると、波動関数 $\psi(x)$ とその一階導関数は次のように与えられる。

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & (x < 0) \\ Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x} & (0 \leq x \leq a) \\ Fe^{ikx} & (x > a) \end{cases} \tag{5}$$

$$\frac{d}{dx}\psi(x) = \begin{cases} ik(Ae^{ikx} - Be^{-ikx}) & (x < 0) \\ \kappa(Ce^{\kappa x} - De^{-\kappa x}) & (0 \leq x \leq a) \\ ikFe^{ikx} & (x > a) \end{cases} \tag{6}$$

ここで、波動関数とその一階導関数についての、$x = 0$ での境界条件を考える。シュレーディンガー方程式 (1) の両辺を $[-\epsilon, \epsilon]$ の微小区間において積分する。波動関数が区間 $[-\epsilon, \epsilon]$ において有限の値を取り、最大値が $\psi_m \equiv \max_{x \in [-\epsilon, \epsilon]}\psi(x)$ で与えられるものと仮定する。

$$\begin{aligned} &\lim_{\epsilon\to 0}\left|\frac{d}{dx}\psi(\epsilon) - \frac{d}{dx}\psi(-\epsilon)\right| = \lim_{\epsilon\to 0}\left|\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)dx\right| = \lim_{\epsilon\to 0}\left|-\frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\epsilon}^{\epsilon}(E - V(x))\psi(x)dx\right| \\ &\leq \lim_{\epsilon\to 0}\frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\epsilon}^{\epsilon}|(E - V(x))\psi(x)|dx \leq \lim_{\epsilon\to 0}\frac{2m}{\hbar^2}|E - V_0|\int_{-\epsilon}^{\epsilon}|\psi(x)|dx \leq \lim_{\epsilon\to 0}\frac{4m\epsilon}{\hbar^2}|E - V_0||\psi_m| = 0 \end{aligned}$$

従って、$\epsilon \to 0$ において

$$\frac{d}{dx}\psi(\epsilon) = \frac{d}{dx}\psi(-\epsilon)$$

となるため、$\psi(x)$ の導関数が $x=0$ で一意に定まる（即ち、微分可能である）ことがわかった。従って、$x=0$ において $\psi(x)$ の連続性も成り立つ。$x=a$ においても同様なことが言える。以上より、波動関数とその一階導関数に関する境界条件は

$$\begin{cases} \psi(+0)=\psi(-0), \quad \frac{d}{dx}\psi(+0)=\frac{d}{dx}\psi(-0) \\ \psi(+a)=\psi(-a), \quad \frac{d}{dx}\psi(+a)=\frac{d}{dx}\psi(-a) \end{cases} \tag{7}$$

で与えられる。(5) と (6) を上の境界条件の等式に代入すると

$$A+B=C+D \tag{8}$$

$$A-B=\frac{\kappa}{ik}(C-D) \tag{9}$$

$$Ce^{\kappa a}+De^{-\kappa a}=Fe^{ika} \tag{10}$$

$$Ce^{\kappa a}-De^{-\kappa a}=\frac{ik}{\kappa}Fe^{ika} \tag{11}$$

(8)+(9) より、

$$2A=\left(\frac{k}{i\kappa}+1\right)C+\left(-\frac{\kappa}{ik}+1\right)D \tag{12}$$

(10)+(11) より、

$$2C=\left(\frac{ik}{\kappa}+1\right)e^{ika-\kappa a}F \tag{13}$$

(10)−(11) より、

$$2D=\left(-\frac{ik}{\kappa}+1\right)e^{ika+\kappa a}F \tag{14}$$

(12) に (13) と (14) を代入すると

$$\begin{aligned} 4A &= e^{ika}\left\{\left(\frac{\kappa}{ik}+1\right)\left(\frac{ik}{\kappa}+1\right)e^{-\kappa a}+\left(-\frac{\kappa}{ik}+1\right)\left(-\frac{ik}{\kappa}+1\right)e^{\kappa a}\right\}F \\ &= e^{ika}\left\{\left(\frac{\kappa}{ik}+\frac{ik}{\kappa}+2\right)e^{-\kappa a}+\left(-\frac{\kappa}{ik}-\frac{ik}{\kappa}+2\right)e^{\kappa a}\right\}F \\ &= e^{ika}\left\{4\cosh(\kappa a)+2i\left(\frac{\kappa}{k}-\frac{k}{\kappa}\right)\sinh(\kappa a)\right\}F \end{aligned}$$

これより、透過率 $T=|\frac{F}{A}|^2$ を計算すると

$$\begin{aligned} T &= \left(\cosh^2(\kappa a)+\frac{1}{4}\left(\frac{\kappa}{k}-\frac{k}{\kappa}\right)^2\sinh^2(\kappa a)\right)^{-1} \\ &= \left(\cosh^2(\kappa a)-\sinh^2(\kappa a)+\frac{1}{4}\left(\frac{\kappa}{k}+\frac{k}{\kappa}\right)^2\sinh^2(\kappa a)\right)^{-1} \\ &= \left(1+\frac{1}{4}\frac{V_0^2}{E(V_0-E)}\sinh^2(\kappa a)\right)^{-1} \\ &= \frac{4E(V_0-E)}{4E(V_0-E)+V_0^2\sinh^2(\kappa a)} \end{aligned}$$

となる。