4.4　有限の深さの井戸型ポテンシャル

コンピュータに搭載されるマイクロプロセッサなどの集積回路を構成する半導体素子としてよく用いられるものに，金属（metal）- 酸化膜（oxide）- 半導体（semiconductor）のサンドイッチ構造をもつ MOS トランジスタがある．このような素子の開発では，半導体と酸化膜の界面に発生する電子やホールをいかに制御するかが重要な課題となる．異なる物質を重ね合わせたヘテロ接合部は量子井戸を形成する．本節では，その最も基本的なモデルとして，図 4.4 に示すような有限の深さの井戸型ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (|x| < a) \\ V_0 & (|x| > a) \end{cases} \tag{4.18}$$

を考えることにしよう（$V_0 > 0$）．

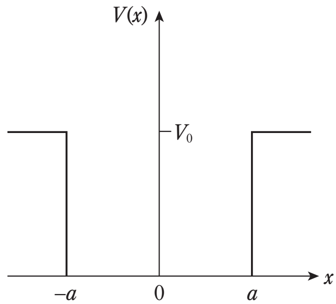

図 4.4　有限の深さの 1 次元井戸型ポテンシャル

ポテンシャルに有限の飛びがあるとき，シュレーディンガー方程式を解くためには，ポテンシャルの不連続点で波動関数 $\psi(x)$ およびその 1 次導関数 $\psi'(x)$ が連続となることを境界条件（連続条件）として課す．またはそれと同等なものとして，対数微分 $\dfrac{\psi'(x)}{\psi(x)}$ が連続となることを用いてもよい．

ポテンシャルの深さ V_0 が有限であるから，粒子のエネルギー E がそれより大

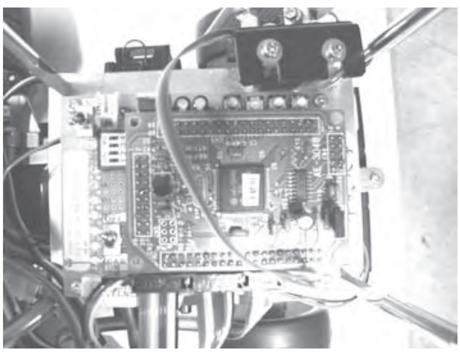

図 4.5　ロボットランサー競技大会参加のロボット制御に用いられた集積回路
（写真提供：中央大学理工学部大隈久教授）

きいか小さいかで場合が分かれる．$0 < E < V_0$ のとき束縛状態，$E > V_0 > 0$ のとき非束縛状態（散乱状態）になる．本節では前者を考え，後者については次章で取り扱うことにする．束縛状態では

$$\lim_{x \to \pm\infty} \psi(x) = 0 \tag{4.19}$$

となるような固有関数を選ばなければならない．

例 4.4　ポテンシャル (4.18) に束縛された質量 m の粒子のエネルギー固有値を決める方程式を求めよう．

粒子のエネルギーを E とすると，$0 < E < V_0$ のとき束縛状態になる．$|x| < a$ では，$k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ とおくと，シュレーディンガー方程式は

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

この解は $\cos kx$ または $\sin kx$ となる．$|x| > a$ では，$\alpha = \dfrac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$ とおくと，シュレーディンガー方程式は

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} = \alpha^2\psi(x)$$

この解は $\mathrm{e}^{\pm\alpha x}$ となる．ポテンシャルを原点対称（偶関数）にとっているから，$|x| < a$ では $\psi(x)$ は偶関数 $\cos kx$ または奇関数 $\sin kx$ のどちらかになる．$x \to \pm\infty$ で $\psi(x) \to 0$ となることを考慮すると，偶関数解は

$$\psi(x) = \begin{cases} A\mathrm{e}^{\alpha x} & (x < -a) \\ B\cos kx & (|x| < a) \\ C\mathrm{e}^{-\alpha x} & (x > a) \end{cases}$$

奇関数解は

$$\psi(x) = \begin{cases} A\mathrm{e}^{\alpha x} & (x < -a) \\ B\sin kx & (|x| < a) \\ C\mathrm{e}^{-\alpha x} & (x > a) \end{cases}$$

偶関数解について，$x = a$ で対数微分 $\dfrac{\psi'(x)}{\psi(x)}$ が連続となることから

$$k \tan ka = \alpha$$

$x = -a$ での連続条件からも同じ式が得られる．$ka = \xi$, $\alpha a = \eta$ とおくと

$$\xi \tan \xi = \eta \tag{4.20}$$

また $k^2 + \alpha^2 = \dfrac{2mV_0}{\hbar^2}$ から

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2 \tag{4.21}$$

式 (4.20) と式 (4.21) から ξ を求めると，エネルギー固有値は次式によって決まる．

$$E = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \xi^2$$

式 (4.20) の右辺に式 (4.21) から求めた η を代入して，ξ を求める方程式を 1 つにすると

$$\xi \tan \xi = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2 - \xi^2}$$

次に，奇関数解について，$x = a$（$x = -a$）で対数微分 $\dfrac{\psi'(x)}{\psi(x)}$ が連続となることから

$$k \cot ka = -\alpha$$

よって

$$\xi \cot \xi = -\eta \tag{4.22}$$

式 (4.22) と式 (4.21) が，エネルギー固有値 E を決める方程式となる．両式から η を消去すると

$$\xi \cot \xi = -\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2 - \xi^2}$$

解く!　例 4.4 にならって以下の空欄 (a) 〜 (q) を埋めよう．

◆図 4.6 に示すポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & (|x| < a) \\ 0 & (|x| > a) \end{cases}$$

答え

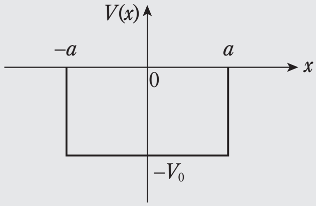

図 4.6　ポテンシャル

に束縛された質量 m の粒子のエネルギー固有値を決める方程式を求めよう．ただし，$V_0 > 0$ とする．◆

粒子のエネルギーを E とすると，$-V_0 < E < 0$ のとき束縛状態になる．$|x| < a$ では，$k =$ (a) とおくと，シュレーディンガー方程式は

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} = -\ \text{(b)}\ \psi(x)$$

この解は $\cos kx$ または $\sin kx$ となる．$|x| > a$ では，$\alpha =$ (c) とおくと，シュレーディンガー方程式は

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} = \text{(d)}\ \psi(x)$$

この解は $\mathrm{e}^{\pm\alpha x}$ となる．ポテンシャルを原点対称にとっているから，$|x| < a$ では $\psi(x)$ は偶関数 $\cos kx$ または奇関数 $\sin kx$ のどちらかになる．$x \to \pm\infty$ で $\psi(x) \to 0$ となることを考慮すると，偶関数解は

$$\psi(x) = \begin{cases} A\ \text{(e)} & (x < -a) \\ B\ \text{(f)} & (|x| < a) \\ C\ \text{(g)} & (x > a) \end{cases}$$

(a) $\dfrac{\sqrt{2m(V_0 + E)}}{\hbar}$

(b) k^2

(c) $\dfrac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$

(d) α^2

(e) $\mathrm{e}^{\alpha x}$

(f) $\cos kx$

(g) $\mathrm{e}^{-\alpha k}$

奇関数解は

$$
\psi(x)=\begin{cases} A\boxed{\text{(h)}} & (x<-a) \\ B\boxed{\text{(i)}} & (|x|<a) \\ C\boxed{\text{(j)}} & (x>a) \end{cases}
$$

(h) $e^{\alpha x}$

(i) $\sin kx$

(j) $e^{-\alpha x}$

偶関数解について，$x=a$（$x=-a$）で対数微分 $\dfrac{\psi'(x)}{\psi(x)}$ が連続となることから

$$k\tan ka=\boxed{\text{(k)}}$$

(k) α

$ka=\xi,\ \alpha a=\eta$ とおくと

$$\xi\tan\xi=\boxed{\text{(l)}} \tag{4.23}$$

(l) η

また $k^2+\alpha^2=\boxed{\text{(m)}}$ から

(m) $\dfrac{2mV_0}{\hbar^2}$

$$\xi^2+\eta^2=\boxed{\text{(n)}} \tag{4.24}$$

(n) $\dfrac{2mV_0}{\hbar^2}a^2$

式 (4.23) と式 (4.24) から ξ を求めると，エネルギー固有値は次式によって決まる．

$$E=\boxed{\text{(o)}}\ \xi^2-V_0$$

(o) $\dfrac{\hbar^2}{2ma^2}$

次に，奇関数解について，$x=a$（$x=-a$）で対数微分 $\dfrac{\psi'(x)}{\psi(x)}$ が連続となることから

$$k\cot ka=-\boxed{\text{(p)}}$$

(p) α

よって

$$\xi \cot \xi = -\ \boxed{\text{(q)}\quad} \tag{4.25}$$

式 (4.25) と式 (4.24) が，エネルギー固有値 E を決める方程式となる．

(q) η

ポテンシャル井戸の深さが有限の場合，無限に深いときのようにエネルギー固有値や固有関数を具体的な式で表すことができない．しかし，上で得られた方程式のグラフを描くことによって，エネルギー固有値をグラフ上で示すことができる．次の練習問題でトライしてみよう．

❖練習問題 4.4❖

ポテンシャル (4.18) に束縛された質量 m の粒子がある．

(1) エネルギー固有関数の概形をエネルギーの低いほうから 4 つ描け．

(2) エネルギー固有関数のパリティは偶または奇のどちらかである．ポテンシャルの深さ V_0 および幅 a の値によって取り得る固有状態の数は変わるが，エネルギー固有関数が偶関数となる状態は V_0 や a の値にかかわらず必ず 1 つは存在することを示せ．

(3) エネルギー固有関数が奇関数となる状態が少なくとも 1 つは存在するための条件を求めよ．

(4) $V_0 a^2$ の値によって取り得る固有状態の数を分類せよ．　詳解は 182 ページ

4.5　量子条件

ポテンシャルの値が一定でないとき，シュレーディンガー方程式の解は，特殊関数（例えば第 6 章の調和振動子で出てくるエルミート多項式）になったり，もっと一般には解析解がないなど複雑になる．前節の井戸型ポテンシャルの問題では，境界において進行波と減衰波を連続的に接続することによってエネルギー固有値および波動関数を定めた．このような手順で一般の場合に解を近似的に求める準古典論的方法として，Wentzel-Kramers-Brillouin 法（**WKB 法**）がある．

1.4 節で取り扱った水素原子の量子条件は，原子内電子の運動量を p，軌道半径を r とすると