量子力学への分布定数回路理論の応用
（確率密度は波動関数の絶対値の二乗でよいか？）

信号処理研究分野　永　井　信　夫，真　田　博　文，鈴　木　正　清

21 世紀を真近にひかえて現在の技術の限界が予測され，それを乗り越えるテクノロジーとして，電子や光子の量子機能を利用する技術が重要と考えられている。量子力学を工学に応用するにあたっては，古典物理学に立脚した理論では許されない現象の概念や性質を模索する必要がある，との考えもある。本文では，量子力学固有の現象であるトンネル現象を用いた共鳴トンネル現象について考察する。共鳴トンネル現象は，波動方程式の絶対値の二乗と定義される確率密度と関係する。この確率密度を導出する際に，確率の流れの密度が求まる。回路理論を量子力学に応用すると，この確率の流れの密度はエネルギーの伝送に係わる有効電力に一致する。そこで，この確率の流れの密度に基づいたエネルギーの伝送の理論展開をすることにより，共鳴トンネル現象と固有関数との違いを明確にし，また，共鳴トンネル現象を利用した素子の特長について述べている。

1．はじめに

21 世紀を真近にひかえて，20 世紀に誕生した量子力学の現象を利用する技術の確立が期待されている。本文では量子力学に回路理論を応用して，エネルギーの伝送に基づく理論展開により，共鳴トンネル現象と固有関数との違いなどを明確に示す。

2．物理学による量子力学の確率の定義

量子力学は物理学の記号で書かれることが多いので，文献(1)に基づいて確率の定義を述べる。

量子力学では，粒子が運動している状態は波動関数 $\Psi(r,t)$ で記述される。波動関数の絶対値の自乗は，時刻 t において位置 r に粒子が見出される確率密度を与えると解釈される。系の状態を表す波動関数の時間変化は次のシュレディンガー方程式で決定される。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(r)\right]\Psi(r,t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(r,t)}{\partial t} \quad (1)$$

ここに，$U(r)$ はポテンシャル，m は有効質量，$\hbar$ はプランク定数であり，∇ は次式を表す。

$$\nabla=\left(i_x\frac{\partial}{\partial x}+i_y\frac{\partial}{\partial y}+i_z\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

粒子を位置 r に見出す確率の解釈から，確率密度 ρ を次のように定義する。

$$\begin{aligned}\rho(r,t)&=|\Psi(r,t)|^2\\&=\Psi^*(r,t)\Psi(r,t)\end{aligned} \quad (2)$$

上の定義から，次の式が導かれる。

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho(r,t)}{\partial t}=\frac{\hbar}{2mi}div[&\Psi(r,t)\nabla\Psi^*(r,t)\\&-\Psi^*(r,t)\nabla\Psi(r,t)]\end{aligned} \quad (3)$$

古典的な電荷の保存則は，ρ を電荷密度，J を電流密度とすれば次のように表せる。

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+div\ \mathrm{J}=0 \quad (4)$$

この類推から「確率の流れ」を次のように定義する。

$$\begin{aligned}\mathrm{J}=\frac{\hbar}{2mi}[&\Psi(r,t)\nabla\Psi^*(r,t)\\&-\Psi^*(r,t)\nabla\Psi(r,t)]\end{aligned} \quad (5)$$

自由な粒子が一部反射された状態における空間 1 次元の定常状態の波動関数は，

$$\begin{aligned}\Psi(x,t)=&\mathrm{A}\ exp\,[i(kx-\omega t)]\\&+\mathrm{B}\ exp\,[-i(kx-\omega t)]\end{aligned} \quad (6)$$

と表される。ここに，k は波数，第 1 項は＋方向に，第 2 項は－方向に進む波である。

この場合，ρ および J は式(2)，(5)を用いて次のように求まる。

$$\rho=|A|^2+|B|^2 + Re(2AB^* exp[2i\,kx]) \tag{7a}$$

$$J=\frac{\hbar k}{m}(|A|^2-|B|^2) \tag{7b}$$

ところで，流体の理論によれば，流体がわき出すことがない場合の連続の方程式が式(4)と同じような次式で表される。

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+div\ f=0 \tag{8}$$

ここに，ρ は媒質の密度，f は流量密度であり，次のように表せる。

$$f=\rho v \tag{9}$$

ここに，v は流速を表す。

この流体の理論を考慮に入れるなら，式(7)の J が ρ とBが零でないとき異なることに気が付こう。そこで，シュレディンガー方程式に分布定数回路理論を応用して，確率の流れ J の意味付けを明確にしよう。

3．シュレディンガー方程式の回路理論

我々はシュレディンガー方程式を電信方程式の一つの拡張と仮定して複素等価回路を導出している[2,3]。そこで，回路理論で用いる記号でその等価回路について述べる。

3.1 複素等価回路

時間を含む有効質量近似された1次元シュレディンガー方程式は，回路理論では式(1)とは符号を一つ変えて次のように表される。

$$-j\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi+U\Psi \tag{10}$$

ここに，jは虚数単位を表す。

ポテンシャルの高さが異なるヘテロ界面の境界条件は，(1)波動関数が連続，(2)波動関数の一次導関数を有効質量で割ったものが連続である。したがって，波動関数 $\Psi(x,t)$ を用いて，電圧 $v(x,t)$ および電流 $i(x,t)$ を次のように定義する。

$$v(x,t)=\Psi(x,t) \tag{11a}$$

$$i(x,t)=j\frac{\hbar}{m}\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t) \tag{11b}$$

上に定義した $v(x,t)$ および $i(x,t)$ の二つの関数が共に式(10)を満足するように，次のように表す。

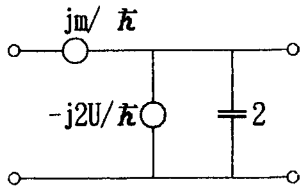


図1 単位長あたりの複素等価回路

$$-\frac{\partial}{\partial x}v(x,t)=j\frac{m}{\hbar}i(x,t) \tag{12a}$$

$$-\frac{\partial}{\partial x}i(x,t)=2\left(\frac{\partial}{\partial t}-j\frac{U}{\hbar}\right)v(x,t) \tag{12b}$$

したがって，単位長あたりの等価回路は図1のようになり，直列素子にインピーダンス $jm/\hbar$，並列素子の一つにアドミタンス $-j2U/\hbar$ なる虚数抵抗を用いている。

物理学では，エネルギーEの波動関数は

$$\Psi(x,t)=\phi(x)\ exp(-jt\ E/\hbar) \tag{13}$$

と表され，次のプランクの関係式を満たす。

$$E=\hbar\omega \tag{14}$$

このプランクの関係式による周波数変数 ω を用いて回路表現を求めよう。すなわち，回路理論では，電圧および電流を次のように表す。

$$v(x,t)=V(x)\ exp(j\omega t) \tag{15a}$$

$$i(x,t)=I(x)\ exp(j\omega t) \tag{15b}$$

この式を式(12)に代入して整理すると次式を得る。

$$\frac{d^2}{dx^2}V(x)=\gamma^2 V(x) \tag{16a}$$

$$\gamma^2=-2m(\hbar\omega-U)/\hbar^2 \tag{16b}$$

電流も定義から次式を満足する。

$$\frac{d^2}{dx^2}I(x)=\gamma^2 I(x) \tag{17}$$

量子力学では式（16 b）の γ^2 の正負の違いにより，井戸と障壁とに分けられる。一方，無損失線路では，γ^2 は必ず負になる。そこで，次に負になる場合と正になるときとを区別して検討しよう。

3.2 井戸の等価回路

量子力学的に井戸になる場合は次のときである。

$$m(\hbar\omega-U)>0 \tag{18}$$

このとき，伝搬定数 γ は純虚数となるので，位相定数と呼ばれ次のように表される。

$$\gamma = j\beta \tag{19}$$

電圧 $V(x)$ は次のように表される。

$$V(x) = \mathrm{A}\ exp[-j\,\beta x] + \mathrm{B}\ exp[j\,\beta x] \tag{20}$$

式(12)に代入して，電流 $I(x)$ は次式を満たす。

$$I(x) = \frac{\mathrm{A}}{R_0}\ exp\,[-j\,\beta x] - \frac{\mathrm{B}}{R_0}\ exp\,[j\,\beta x] \tag{21}$$

ここに，R_0 は特性抵抗と呼ばれ，次式を満たす。

$$R_0 = [m/2(\hbar\omega - U)]^{1/2}$$
$$= \frac{\beta\hbar}{m} \tag{22}$$

この量子現象としての井戸は，回路的にみれば位相定数と特性抵抗とで表されるから，通常の無損失線路の取扱いができる。ただし，特性抵抗と位相定数がエネルギーの関数となるということは無損失線路と異なるところである。量子現象としてみた場合，有効質量 m は正にも負にもできて，正の場合はエレクトロンの井戸を表し，負の場合はホールの井戸に相当するが，回路的扱いは同じである。

この量子井戸の式(5)で与えられる確率の流れとの関係を調べよう。式(11)の定義により，確率の流れ J は次のように表される。

$$\mathrm{J} = Re[v^*(x,t)\ i(x,t)] \tag{23}$$

これは回路における有効電力を表していて，位置 x におけるエネルギーを表しているといえる。

3.3 障壁の等価回路

量子力学的に障壁になる場合は次のときである。

$$m(\hbar\omega - U) < 0 \tag{24}$$

このとき，伝搬定数 γ は実数となるので，減衰定数と呼ばれ次のように表される。

$$\gamma = \alpha > 0 \tag{25a}$$

このときの特性インピーダンスを求めると，

$$Z_0 = jm/\hbar\alpha = jX_0 \tag{25b}$$

となり純虚数である。したがって，ここにおける複素電力は無効電力のみとなり，有効電力で表されるエネルギーが伝送されないところである。すなわち，量子現象としての禁制帯にあたり，薄い禁制帯によってトンネル現象の生じる極めて重要な所である。

トンネル現象は量子力学特有の現象ではあるが，すでに回路理論で用いられている。すなわち，影像パラメータ法の遮断域あるいはマイクロ波回路のエバネッセントモードの区間であり，窓としてフィルタ構成に用いられている。

この区間のエネルギーの伝送は縦続行列で扱われる。縦続行列は，$x=0$，$x=l$ の2点間でポテンシャルおよび有効質量が一定の場合，次のように求まる。

$$\begin{pmatrix} V_0 \\ I_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh\alpha l & Z_0\sinh\alpha l \\ Z_0^{-1}\sinh\alpha l & \cosh\alpha l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ I_1 \end{pmatrix} \tag{26}$$

上の縦続行列は減衰定数をもつにも係わらず，無損失回路となることに注意すべきである。また，l を大きくすれば，V_1 や I_1 がどのような値であっても，

$$\frac{V_0}{I_0} = Z_0 = jX_0 \tag{27}$$

となり，純虚数となる。この性質を用いて，後に固有関数の特徴を導く。

4. 共鳴トンネル現象

2つの量子障壁を用いて構成される対称2重バリヤ構造を用いると共鳴トンネル現象を作れることが知られている。ここでは，どのようにして共鳴トンネルが生じるかを示し，それを表すには確率の流れを用いるのが適当であることを示す。

図2には左からの入力が1として共鳴トンネルが生じているときの，(a)には確率密度 ρ を，(b)にはその確率の流れ J（すなわち，入射 $|\mathrm{A}|^2$，および反射 $|\mathrm{B}|^2$）を示している。

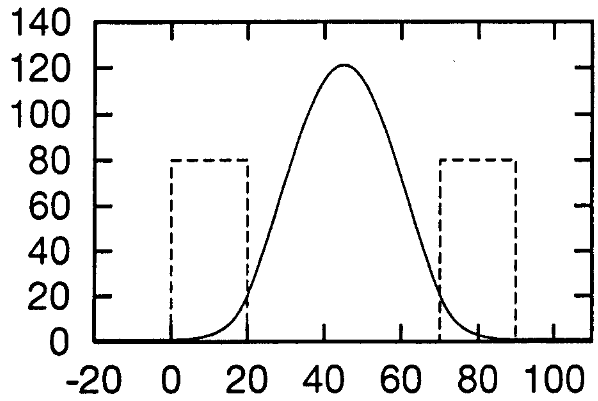
図2(a)の確率密度 ρ に対しては，2つの量子障壁に挟まれた井戸に閉じ込められた電子の存在確率を表しているというのが従来の解釈である。

一方，図2(b)における確率の流れに対する解釈は次のようにできよう。①右側の障壁における入力は，左からの $|\mathrm{A}|^2$ であり，その反射は $|\mathrm{B}|^2$，その透過は障壁の右側に1の出力として現れていて，$|\mathrm{A}|^2 = |\mathrm{B}|^2 + 1$ ②左側の障壁における入力は二つあり，一つは左側の入力1であり，もう一つは右側からの $|\mathrm{B}|^2$ である。出力は左側にはなく，右側に $|\mathrm{A}|^2$ が現れていて，$1 + |\mathrm{B}|^2 = |\mathrm{A}|^2$

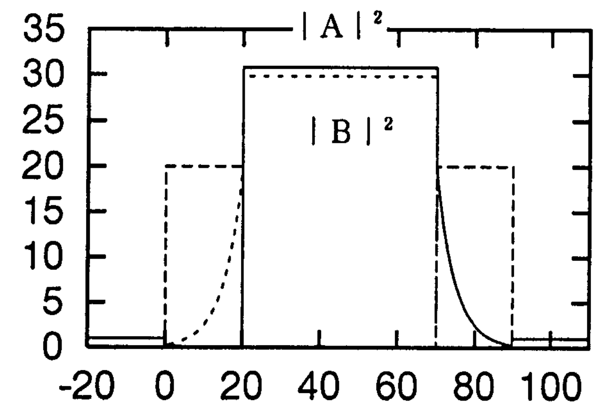
この解釈から，確率の流れがエネルギーの伝送の理論展開に利用でき，次のような特徴を表せる。

(1) 量子井戸においては，（入力および出力も含めて）エネルギー（有効電力）はすべて同じ値である。

これは共鳴トンネルが生じているいないに係わらずすべてのエネルギーで成り立つ。共鳴トンネルが生じているときはどのようになっているかというと，



(a)



(b)

図2　共鳴トンネル現象が生じているときの，(a)確率密度，(b)確率の流れ。

(2)　入力には反射が生じないで，入力がすべて透過しているとき共鳴トンネルが生じている。

また，共鳴トンネルの形成については：一つの障壁に対する反射・透過は図2(b)における右の障壁でわかるように，入力 $|A|^2$ に対して反射は $|B|^2$，その透過は障壁の右側に1の出力として現れていて，この対称2重バリヤ構造への入力は1であるから，全体として井戸内に $|A|^2$ をつくるには，少なくとも井戸の往復の長さの $|A|^2$ 倍のコヒーレントな波動が必要なことがわかる。

障壁の部分に目を移すと，そこには有効電力が入らず，障壁が一塊となって粒子の反射・透過に関係していて，この現象は障壁の時間的取扱には虚時間[4]が必要になることを意味している。

5．固有関数

確率の流れJを用いると固有関数の定義が次のように変わる。すなわち，固有関数を井戸内に作るには，左右を量子障壁で囲まれていなければならず，量子障壁のインピーダンスは純虚数である。したがって，固有関数を作っている井戸内の有効電力は零となる。その上で，波動関数が零でないものが求まるとき，その波動関数が固有関数である。

6．むすび

量子力学に用いられるシュレディンガー方程式を従来の物理学ではヒルベルト空間と結びつけるために，波動関数の絶対値の二乗を確率密度と定義しているが，これを導出する際に確率の流れを求めている。この確率の流れでエネルギーの伝送を考えることにより，(1)すべての井戸におけるエネルギー（有効電力）が同じ値であり，(2)共鳴トンネルは入力に反射が生じていないときであり，(3)共鳴トンネルを形成するにはコヒーレントな波動が必要で，(4)固有関数の定義を明確にできる，ことなどを示した。

【参考文献】

[1] 桜井捷海：〝コンピューターで学ぶ量子力学――数値計算による量子力学――〞，裳華房（1992）．

[2] 大谷，永井，鈴木，三木：〝複素等価回路による量子効果現象の定式化〞，信学論C-I，J73-C-I，No.11，pp. 683-689（1990）．

[3] 永井，大谷，真田，任：〝量子現象を用いた新しい物質設計への分布定数回路理論の応用〞，電子科学研究，1，pp. 14-19（1993）．

[4] S.W. ホーキング（林一訳）：〝ホーキング，宇宙を語る〞，早川書房（1989）．