

# 巨大障壁でのトンネル確率の挙動

蔵 琢 也<sup>2)</sup>  
京都大学理学部動物学研究室

蔵 研 也<sup>1)</sup>  
岐阜聖徳学園大学経済情報学部

Kenya Kura<sup>1)</sup> and Takuya Kura<sup>2)</sup>

- 1) Department of Economics and Information Science,  
Shotoku University, Gifu,  
1-38 Nakauzura, Gifu-city 500 Japan  
TEL: +81-582-72-4151  
E-mail: kkura@shotoku.ac.jp
- 2) Department of Zoology, Faculty of Science  
Kyoto University, Sakyo, Kyoto 606-8502, Japan  
TEL: +81-75-753-4073  
FAX: +81-75-753-4113  
E-mail: kura@ci.zool.kyoto-u.ac.jp

## 概 要

WKB 近似からトンネル確率を計算する方法は、物性から宇宙論までのひろい範囲でもっとも使われてきた手法である。この WKB 近似の障壁が大きい極限の挙動は、負の指数のオーダーでの減衰である。この近似（指数型近似と呼ぶ）を検討すると、トンネルすべき障壁の内部で一回でも反射すると、すべて透過せずに反射され、一度も反射に会わない場合のみ透過するというモデルに相当している。しかし、奇数回反射した場合に障壁を抜け、偶数回反射した場合は戻るという仮定の方が、より正確な近似である。我々は、この仮定に立つ新しい近似式を提案する。指数型近似と新しい近似（逆数型近似）は、障壁断面積に対する通過確率の0次と1次項が一致しており、障壁が小さいときの透過確率は、ほとんど変わらない。しかし、障壁が大きくと異なってくる。WKB 近似などでの透過率は障壁断面積に対して、負の指数が主要項になる。しかし、新しい近似式では、障壁が大きい極限で、ほぼ障壁断面積に反比例する。

さらに、指数型近似および新しい近似を、擬古典的にハール測度によって基礎づけ、構成した。この新しい近似は、少なくとも障壁に休息地点を多数入れれば、透過率が飛躍的に増大する可能性を示している。これらに付随する問題に関しても論じた。

## 1. WKB 近似の特徴

物性から原子核、宇宙にいたるまでトンネル確率の簡便な概算として、WKB 近似を線形ポテンシャルに適応した式が、極めて広く用いられている。これ以外の概算法は、特殊なケースに個別に適用される特殊な方法以外ほとんどない。しかし、これは障壁が大きくなった極限でどの程度、正確なのだろうか。

WKB 近似からのトンネル確率は以下のような式になる。一次元障壁の場合、粒子のエネルギーを  $E$  とし、質量を  $m$ 、障壁ポテンシャルを位置  $x$  の関数として  $V(x)$ 、古典的には侵入不可能な  $E < V(x)$  になる領域を  $D$  とおくと、トンネル確率（障壁透過確率） $p$  は

$$p = \frac{1}{A} \exp\left(-2 \int_D k(x) dx\right)$$

$$k(x) = (2m\{V(x) - E\})^{\frac{1}{2}} \hbar^{-1}$$

である。もし  $D$  が区間  $[a, b]$  で構成されているのなら、積分範囲もその区間になる。0 次の WKB 近似では  $A$  は定数である。WKB 近似ではあらかじめ対数を取って展開するので、1 次の補正項は 0 次の項に掛けることになる。さらに高次補正もやはり掛けることになる（この項の収束性は極めて悪い）。一次の補正項は  $A = \sqrt{k(x)}$  程度の関数である。この論文では、簡単のために障壁断面積  $S$  を

$$S = 2 \int_D k(x) dx$$

と定義する。この定義では障壁断面積は、障壁の高さ  $V(x) - E$  の平方根と障壁の長さに比例する。実のところ、ポテンシャルが線形であることはまったく重要ではなく簡単に拡張できる。すると、前式は

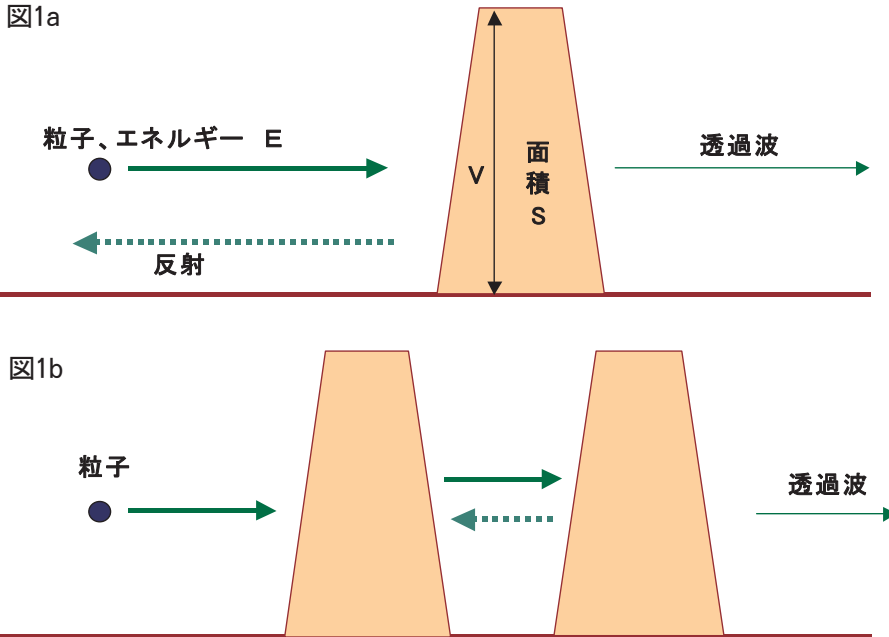
$$p = \frac{1}{A} \exp(-S)$$

の形になる。

この WKB 近似は、 $E = V(x)$  になる転回点で発散したりして、うまくいかない。そこで解析接続を取ってみたりして、適当につなぎ合わせると言うことになる。

もっとも初等的な教科書に出てくる高さが一定の矩形障壁での近似法（とりあえず矩形解法と呼ぶことにする）でも、障壁断面積  $S$  が小さいときの極限で少し異なるが、障壁の長さが長くなると、やはり障壁の長さの負の指数に比例して小さくなる。このように障壁の長さが長くなると負の指数に近い関数で減少する近似を、本稿では一括して「指数型近似」と呼ぶことにする。つまり指数型近似は WKB 近似やもっと初等的な透過率の計算の長距離における挙動を表している。

この WKB 近似や矩形近似のトンネル確率の計算特徴を端的に表す思考実験を考えて



みる。図1bのように同じ障壁が二つある場合、この二つを一つの障壁と見なして、トンネル確率を0次WKB近似によって計算してみよう。転回点が真ん中に出てくるのが不満なら、二つの障壁の間の平坦な部分のエネルギー順位が0に極めて小さいが正の値であるとしてみれば、同じことである。すると、0次WKB近似の計算は単純明快である。その確率は、最初の障壁を通る確率を0次WKB近似の計算によって出した値 $p_1$ に、次の障壁を通る確率 $p_2$ を書けた積 $p_1 p_2$ に等しくなる。この確率の乗法性が、障壁が長いときのWKB近似からのトンネル確率の計算の特徴なのである。よって、障壁の高さが一定で、長さを長くした極限では、長さの負の指数に比例してトンネル確率が低くなる。

## 2. 擬古典モデル

同じ通過確率の計算を、擬古典モデルというべきモデルで、簡単に計算してみよう(WKB近似が「準古典近似」と呼ばれるので、区別するために「擬古典」と呼ぶことにする)。

粒子があるエネルギー $E$ で入射してくる。古典モデルとの違いは、確率 $p$ で障壁を通過するとする。減衰はないし、通らない場合は反対側に跳ね返るとする。すべての障壁で確率は同じで、どちらの側から侵入しても同じとする。すると問題は、まず第一障壁を乗り越えて、かつ第二障壁に跳ね返ると、今度は第一障壁の反対側の壁から乗り越えるか、跳ね返るかになる。そして、第一障壁の反対側で跳ね返った場合、再び、第二の障壁を乗り越えるかどうかの再チャレンジになる。これを繰り返す。よって答えは、

$$p^2 + (1-p)^2 p^2 + (1-p)^4 p^2 \cdots = p / (2-p)$$

この確率は  $p/2$  より常に大きい。

かりに、第二障壁にぶつかって反射したとき、第一障壁を反対側からなら確率 1 で抜けられると言う仮定（一方向フリーパスの仮定）をおけば、確率は初項のみの  $p^2$  になる。これが指数型近似である。これは、跳ね返り確率  $1-p$  が 0 に十分に近いときの近似とも見なせる。つまり障壁が小さいときは良い近似なのである。この違いは大きい。例えば、一つの障壁の通過確率が  $p=0.1$  の時、指数型近似だと  $p=0.01$  になるが、通常の跳ね返りの仮定をおけば、 $p > 0.05$  になるのである。

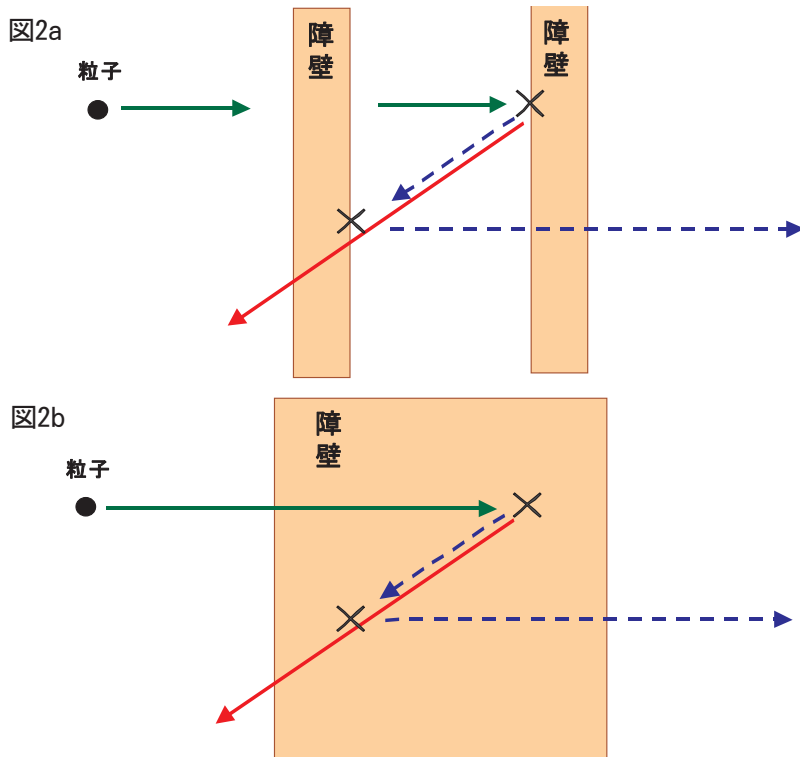
今の問題では 2 つの同じ障壁だけだったが、透過確率の異なる壁でも同じように計算できる。最初の障壁を乗り越える確率を  $p$ 、次を  $q$  とすると、答えは

$$pq + (1-p)(1-q)pq + \{(1-p)(1-q)\}^2 pq + \dots = pq / (p+q-pq) \quad (1)$$

左辺の式は重要である。あとで、これをハール測度によって微分化した尺度を創る。

$n$  個の障壁も全く同じである。障壁を二群に分ければよい。計算は面倒だが、帰納法を使うと、常に透過確率は  $p/n$  より大きい(後の節で正確な計算ができる)。これに対して、一方向フリーパスの仮定の仮定をおけば、自明のごとく  $p^n$  になる。しかし、反対方向の跳ね返りも考えると、ほぼ  $n$  に反比例することになるのである。以後、この近似を逆数型近似と呼ぶことにする。

このように指数型近似は、入射粒子は一回反射すると、すべて元に戻ってくるという仮定に基づいた近似といえる（図2a の経路実線）。偶数回の反射の経路（図2a の経路破線）



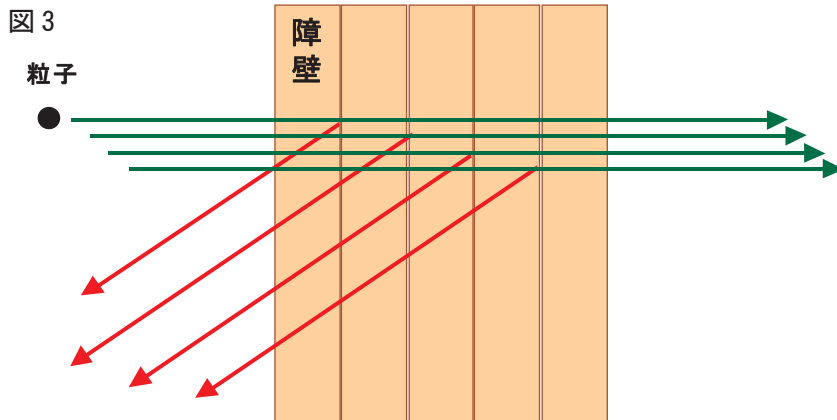
の部分が無視されている。それを補正すると、障壁が多くなれば障壁の数（長さ）に比例すると考えるほうが妥当である。

この違いはどこから現れるのだろうか。可能性として次の三つを上げる。

- I. トンネル確率は、トンネルの最中に休息ポイントを入れると大幅に変わる。
- II. 量子力学における長距離のトンネル確率は擬古典近似とは異なる。
- III. 指数型近似は障壁が大きな極限で合っていない。

仮説（I）の可能性も大いにある。このようなケースも大いに研究すべきである。（II）については、障壁の間隔を広げて、数を多くした極限では擬古典近似になるべきだから、この場合、量子補正と言うべき違いをきちんと考察すべきである。後述のようにWKB近似には欠点がある。よって仮説（III）の可能性も考えられる。そもそも障壁の長さが長くなった極限で波動関数が負の指数で減少するという指数型近似は、やはり障壁当たり一定の確率で、入射方向にだけ跳ね返るという仮定を基礎にした近似（図3）であると考えざるをえない。本当は、図2bのように内部でも跳ね返っているのではないのか。すると、やはり指数型近似では正しくなく、やはり逆数型近似が正しくなる。このように障壁内で何度も向きを変えるのは奇妙だろうか。障壁内で身震い運動（Zitterbewegung）していると考えれば自然なのである。

それでは障壁の高さに関してはどうだろうか。この単純なモデルでは即答できない。しかし、ここで細分可能仮定、つまり大きな障壁は、通過確率が1に近い十分多くの障壁の羅列に分解できるとすると同じことが成り立つ。この仮定では前の思考実験の透過確率を、微分化することができるからだ。もっとも、細分が細かいと成り立たなくなるかもしれな



いが、概ね障壁が大きいときの振る舞いとしては、やはり障壁断面積に反比例する項が主要項になる。細分可能仮定をおいたときの厳密な定式化は、次の節のハール測度を使って定式化するのが、数学的に厳密で明快である。

要するに指数型近似は、もっとも簡単な凸型反射を、並べて積分したものと一致する。これには致命的な欠点があって、障壁内部で反射した粒子は必ず戻ってしまうという仮定をしていることになる（図2bの経路実線）。障壁内部で一度反射して、また反射して反対側へ抜けるという偶数回の反射の経路（図2bの経路破線）の部分が無視されている。跳ね返りが無視できて、代わりに吸収が重要な障壁では、これは非常に良い近似である。また、障壁が小さい場合も良い近似かもしれない。しかし、跳ね返りが重要で、障壁での吸収が無視できる場合には、余り良い近似にはならない。つまり、WKB近似などからの長距離近似である指数型近似は、障壁の大きさに展開したときに最初の数項は一致するが、高次項では異なっており、障壁が大きくて跳ね返りの確率が大きいときの良い近似ではなくなる可能性があるということである。

しかしながら、図2bのような内部跳ね返りを想定する場合、シュレディンガーの方程式からは単純に導出できないかもしれない。その代わり、障壁ポテンシャルが一見ならだかに見えるが、その実、剣山のようにささくれているか、あるいは障壁ポテンシャルの形自体が量子力学的に浮動しているとの仮定や、あるいはそれと同等な形式が必要かもしれない。

## 2. ハール測度からの計算

先に式(1)で出てきた関係式を、二つの障壁の確率  $p$ ,  $q$  の間の二項演算

$$p \blacktriangledown q = pq / (p + q - pq)$$

で定義し、仮に三角積と呼ぶことにすると、この演算は結合法則を満たし、可換なので、1を単位元としたアーベル群になる。少なくとも(0, 1)区間と1の近傍では変数  $p, q$  に対して連続だから、この演算で不変なハール測度が定義できる。ハール測度とは、演算で不変な測度の総称であり、この場合、演算  $\blacktriangledown$  で集合の測度が不変なものを指す。この存在は位相群論の重要な定理である[1]。実数の和に関するハール測度は通常のリベグ測度だが、普通の積に対して不変なハール測度と指数関数は関係している。乗法単位元1から0側にハール測度で測って障壁断面積  $S$  だけ行った値  $p$  が、指数型近似でのトンネル確率になっている。つまり区間  $[p, 1]$  の乗法に関してのハール測度が  $S$  なのである（ハール測度の存在は位相群の基本定理である。ハール測度は常数倍だけの不定性がある）。正確に書こう。乗法のハール測度を  $\mu_{\times}$  とし、 $C$  を常数とすると

$$\mu_{\times}([p, 1]) = CS$$

である。

同じことは三角積でのハール測度でも行える。

$$\mu_{\blacktriangledown}([p, 1]) = CS$$

これが真のトンネル確率になっていると考えるべきだ。透過確率が1に近いときに一致するというのは、三角積でのハール測度を  $\mu_{\blacktriangledown}$  とすると、 $\mu_{\times}([p, 1])$  と  $\mu_{\blacktriangledown}([p, 1])$  が、 $p$  が1に近いときにほとんど一致することである。

三角積は微分可能であり、ハール測度と言っても一次元測度なので、微分幾何学を使えば厳密に計算できる。

1の近傍の微小長さの変化を計算すると、

$$\begin{aligned} G(p, q) &= \frac{pq}{p+q-pq} \\ \left. \frac{G(p, q)}{dp} \right|_{p=1} &= \left. \frac{q(p+q-pq) - pq(1-q)}{(p+q-pq)^2} \right|_{p=1} \\ &= \left. \frac{q^2}{(p+q-pq)^2} \right|_{p=1} = q^2 \end{aligned}$$

になる。不変測度はそれをキャンセルする必要があるので、この逆数をかけることなる。測度はその積分なので、

$$\begin{aligned} CS = \mu_{\blacktriangledown}([p, 1]) &= \int_p^1 \frac{dq}{q^2} = \frac{1}{p} - 1 \\ p &= \frac{1}{1+CS} \end{aligned} \tag{2}$$

が逆数型近似の最終的な答えになる。参考のため、同じことを通常の積のハール測度で行えば、

$$\begin{aligned} G(p, q) &= pq \\ \left. \frac{G(p, q)}{dp} \right|_{p=1} &= q \\ CS = \mu_{\blacktriangledown}([p, 1]) &= \int_p^1 \frac{dq}{q} = -\log p \\ p &= \exp(-CS) \end{aligned} \tag{3}$$

になり、障壁面積  $S$  の負の指数関数になり、指数型近似からのトンネル確率に一致する。どちらも  $S=0$  での値が1、微分値が  $-C$  になり、一致する。つまり、 $S$  が十分小さい場合、両式は0次と1次項が同じなのである。

#### 4. WKB 近似の正確さ

ところで指数型近似の元になる WKB 近似は、どの程度正確なのだろうか。半導体のトンネル電流の研究者のホームページ（大阪大学工学部、谷口研究室）で、明快に述べて



いるので引用する ([http://www6.eie.eng.osaka-u.ac.jp/oxide/html\\_leakagecurrents/node1.html](http://www6.eie.eng.osaka-u.ac.jp/oxide/html_leakagecurrents/node1.html))。

「しかしながら、{Esaki-Tsu の} 式、{Wentzel-Kramers-Brillouin(WKB)近似} を用いて計算される電流伝導特性は実験結果を十分に再現しない。これは2次元状態の反転層内電子を3次元状態で近似した事に基づく誤差、及びWKB近似を用いることによる誤差に起因している。このような問題を回避する方法としては、Airy関数を用いた方法、多重散乱理論を用いた方法、transverse-resonant法による方法、Green関数を用いた方法、ポテンシャル障壁を細かい矩形ポテンシャルの集合として近似することにより数値計算するtransfer-matrix法、{WKB近似}式に補正を加える方法、などがある。」

要するに、WKB近似は全然、実験結果を再現しないので別の近似が色々と考えられてきたのである。彼らがWKB近似の代わりに実験値と良く合うとして採用しているのは「ポテンシャル障壁を細かい矩形ポテンシャルの集合として近似することにより数値計算する」transfer-matrix法 [2,3] である。これは最も簡単な矩形解法を拡張したやり方であり、長距離の振る舞いは(一次の)WKB近似より、指数型近似に近いと思われる。

もともとWKB近似は恣意的にプランク定数の1次項で打ち切っている近似であり、0次以外の項が古典的転回点で発散するという奇妙な性質を持っている。だから、複素平面での解析接続などのトリックで回避して値を求めざるをえない。このようにWKB近似は様々な点で解析的な性質が良くないので、それを拡張したより複雑な近似が提案されている [4]。大障壁でのトンネル確率の概算としてWKB近似(の大障壁での近似)が使われてきたのは、それが正確だからでなく、式が簡単で計算しやすいという理由からだと思う。

ほとんどの初等的な教科書に載っているのは矩形解法、つまり高さが一定の障壁のトンネル確率の計算である。全体を三つの領域に分けて、領域の境界条件から解を求めるのである。しかし、前のように障壁を2つに分割して、5つの境界に分割してしまうと、答えが異なってくる。このように区分を多くすると答えが変わってくる可能性があるのである。言うまでもないが、この矩形解法は長距離では指数型近似に当たり、前節でハール測度から論じたように、近距離では指数型近似と逆数型近似は、ほとんど等しい。よって中距離では、矩形解法と逆数型近似は似た関数になる。

このようにWKB近似や矩形解法には多くの奇妙な点があり、長距離障壁に対して、良い概算を与えているとは限らないのである。

## 5. この近似の与える影響と他の応用

通常、「宇宙物理学」では星の内部でのトンネル効果による核融合反応の生起確率はWKB近似で見積もる。太陽の中心のように、温度による運動エネルギーで、核の核との



クーロン障壁を乗り越える核融合の場合、トンネル効果の寄与はわずかであり、核融合の計算やモデルの変化は余りないと考えるのが妥当である。しかし、木星の中心のように、運動エネルギーではクーロン障壁を乗り越えられないときの結果は決定的に異なる。我々が示した近似では、負の指数が主要項になる従来の近似に比べて、トンネル効果による核融合が飛躍的に増大する。

現在、木星の中心では核融合は起っておらず、木星が宇宙に発する熱は、ちょうど19世紀の物理学者が太陽について推測したように、初期からもっていた重力ポテンシャルが転化した熱に由来すると考えている [5, 6]。星のガスのゆっくりとした重力圧縮が熱に転化するケルビン-ヘルムホルツ機構である。しかし、木星の中心部でもトンネル効果によって核融合が起こるのなら、必ずしもそう考える必要はない。

この稿ではトンネル確率の計算について論じてきたが、この稿で導いた近似式(2)は、別の多くの状況にも応用できる。例えば、左側に薄いガスがあって、右側は真空、真ん中にわずかにガスを通す障壁がある、あるいは溶媒に解けた希薄な成分が左側にある、右側は単に溶媒だけがあり、真ん中にわずかにその成分を通す障壁があるという拡散過程のモデルでは、本稿で示した近似は、極めて高い妥当性をもって適用できる。

#### 参考文献

- [1] 壬生雅道「位相群論概説」 東京；岩波書店（1976）
- [2] Mizuta, H., H. Tanoue, and S. Takahashi, (1988) "A new triple-well resonant tunneling diode with controllable double-negative resistance", *IEEE Trans. Electron Device Lett.*, vol.35, pp.1951-1956.
- [3] Mizuta, H. and Tanoue, T. (1995) "The Physics and Applications of Resonant Tunneling Diodes", *Cambridge Studies In Semiconductors Physics And Microelectronic Engineering*.
- [4] 俵口 忠功 (2001) 「Divergence-free WKB method (3次方程式に基づくWKB法)」物性研究 vol.76, pp.746-775.
- [5] Ingersoll, A. P. (1981) "Jupiter and Saturn," *Scientific American*, vol. 245, December, p. 92.
- [6] Waldrop, M. M. (1981) "The Puzzle That Is Saturn," *Science*, 18 September, p. 1351.

