

新しい世界への挑戦

～量子力学と物性入門～

岡山大学大学院自然科学研究科 原田 勲 (2014.08.09)

1. 量子現象とは

量子とは何か。辞書(Wikipedia)では、量子とは1900年にドイツの物理学者マックス・プランクによって発見された“もの”の最小単位であり、その量子は波と粒子の両方の性質を兼ね備えていると書いてあります。即ち、量子の世界では、“もの”は2重の性質、即ち波動的性質と粒子的性質を併せ持つことが本質です。これは当時の人にとって（今の人の人にとって！）大きな驚きで、“もの”を記述する理論はこの事実を如何に取り入れるかが大変難しく、多くの人が悩み続けました。

注) ヤングの2重スリット：粒子性と波動性の確認

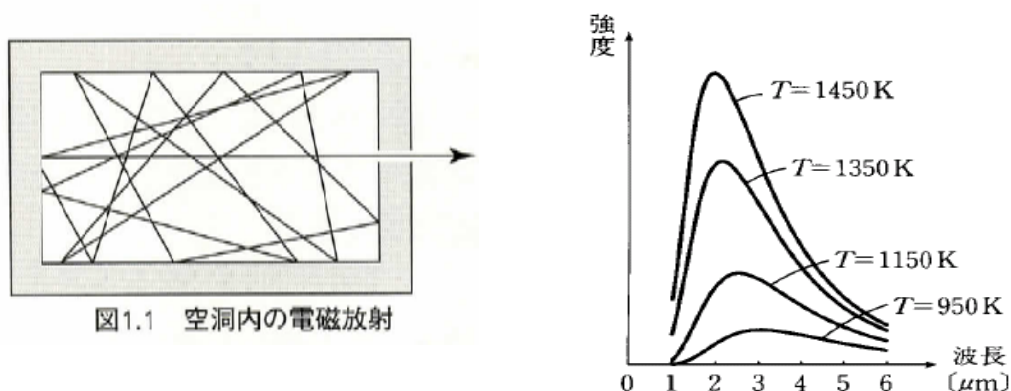
波動：波とは、空間的に状態が広がっているものであり、回折や干渉を伴う。波は空間的に状態が広がっているため、同時に別の場所にいることが可能である。

粒子：粒子はある空間の座標点にその位置や速さをもって定めることが出来るもので、1個2個と数えられ特定出来る存在である。運動量やエネルギーが塊となって移動する。

これら波と粒子の2重性という尋常でないことを考えねばならない実験結果が、当時測定器の発達とともに沢山見つかってきたのです。1905年アインシュタインは金属板に光を当てると内部から電子が飛び出す現象、“光電効果”をプランクに見習い光を量子と考える、即ち光に粒子的側面を与えることにより見事に説明しました。また、ある温度である黒い物体からは光（電磁波）が放射され、そのスペクトルは温度に依存することが発見されました。当時、ドイツでは産業革命が起こり、鉄の精錬が盛んで、精錬の良し悪しは鉄鋼炉の中の温度分布によって左右されます。プランクは鉄鋼炉の温度を制御する方法を考える過程で、鉄鋼炉から出る光のスペクトルから温度を測定する方法を考えつき、光のスペクトルと温度の関係式を導きましたが、その理論はプランクの量子仮説に基づいたものです。また、その他、特定の励起された原子から放射される放射光はボーアの量子条件を駆使して初めてそのスペクトルが説明されました。これらは全て、現代から見て**量子現象**と定義され、量子力学という1920年以降に構築された理論により初めて理解される現象です。ただ、残念なことに未だ量子力学は完全には完成していないというのが通説で、今も多くの研究者を魅了しています。

上記以外にも身近なところに量子現象が絡まっています。“人間の血は赤い”、“備前焼の表面には赤く焼けた部分がある”、“岡山特産のベンガラは赤くて綺麗”、“赤こんにやくは□

辛くなく、トウガラシの色ではない”。これらは、血に含まれるヘモグロビン中の鉄、備前焼やベンガラ、こんにゃくに含まれる酸化鉄などいずれも物質中の鉄イオンに起因する赤色です。物質中の鉄イオンの電子状態をミクロな立場から理解すれば、そして原子と光のやり取りを記述し、ミクロな世界を記述する『量子力学』を理解すれば、これらの現象がすべて統一的に理解できるのです。もっとも、この量子現象を記述する『量子力学』が前にも述べたように概念的に難解であり、量子現象は私たちの常識で考えると、とても非常識なのです[1]。以下、それらの例をもう少し丁寧に見てゆきましょう。



まず、黒体からの輻射を解析して温度の決定を提案し、その理論構成に大胆にも量子仮説を用いたのはプランク（上図参照）、金属表面に光を当てたとき飛び出す電子(光電子)について、量子論的考察を行ったのはアインシュタイン、量子条件を仮定して水素原子の電子状態を求め、元素の輝線を説明したのがボーアであり、彼らはこれらの現象を理解するためにいずれも“量子仮説”を用いたのです。量子仮説は、粒子のエネルギー状態が連続でなく飛び飛びのエネルギー準位を取ることを仮定するもので、一方では波と粒子の性質を併せ持つという古典物理学では考えられない奇妙な仮説に立たざるを得なかったのです。“もの”が飛び飛びのエネルギー値しか取れないのは、固定端の振動と同じようにその境界条件により特定の性質をもつ状態のみしか許されないからです。これらの現象は、1930年頃からボーア、シュレディンガー、ハイゼンベルグなどによって考察され、『量子力学』の理論構築へと向かい、これらの現象の基礎付けとその基礎理論の構築がなされたのです。

通常は、ミクロな世界において量子力学的効果が顕著であるのですが、時にはマクロなスケールでも量子現象が現れます。その典型が超伝導現象なのです。1911年に発見された超伝導現象はその意味で特異で、1958年にその原理が理論的に解明されましたが、それぞれの現象に対しては現在もお多くの人の興味を集めています。これは、その量子現象が、現代に見合った低エネルギー消費型のデバイスとして、また、完全導電性、完全反磁性などという際立った性質を持つからなのです。この性質は、最近話題のリニャーカーにも応用されています。超伝導はその応用面ばかりでなく、基礎的理論の観点からも大変重要で

今もなお多くの理論家を惹きつけてやまないのです。

2. シュレディンガー方程式 I

それでは、量子現象を説明するという「量子力学」を見てゆきましょう。量子力学の端緒を開いたのはド・ブロイで、彼の若き日の成果博士論文においてアインシュタインの光量子仮説”光は波動的性質と共に光子と呼ばれる粒子としての性質も合わせ持つ”を参考にし、”動いている粒子は全て波としての性質を併せ持つ”と主張しました。光量子仮説によれば、通常、波と思われてきた光が実は粒子、すなわち光子としての側面を持つのです。ド・ブロイは、光を粒子として考えた時の運動量 p およびエネルギー E を波と考えた時の振動数 ν 、波長 λ 、光速 c 、プランク定数 h 、及び $\hbar = h/2\pi$ を用いて

$$p = h\nu/c = h/\lambda = \hbar k \Rightarrow mv \quad (2.1)$$

$$E = h\nu = \hbar\omega \Rightarrow \frac{1}{2}mv^2 \quad (2.2)$$

の様にそれぞれの物理量を関連付けました。これで波動と粒子という相容れない物理量の対応は付きましたが、次はそれらをいかに理論的枠組みとして構築するかが問題です。

量子力学は、上に述べたド・ブロイの考え方を包括した理論として、次のような流れで定式化されてゆきました：

波動論において、自由な波の波動関数 ψ は次のような平面波で書かれることが知られています：

$$\psi = A \exp i(kx - \omega t). \quad (2.3)$$

この波の状態を表す波動関数において、ド・ブロイが定義した運動量 $p = \hbar k$ 、エネルギー $E = \hbar\omega$ を導くには、運動量、エネルギーにそれぞれ次の様な演算子を対応させ、波動関数に演算すればよいことは容易に推測できます：

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \quad (2.4)$$
$$E = -\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dt}$$

これらの考察を基に、量子力学では運動量 p やエネルギー E のような物理量は演算子として与え、それらの観測値とは区別します。物理量は観測される値ではなく、全て演算子で書かれるものとするのです。観測値は、それらの演算子を特定の状態に演算し、その結果を用いて平均した量と定義します。波動関数 ψ は、波動としての性質を持ち、“もの”の特定の状態の情報をすべて内包します。これらの理論構造により、“もの”は2重の性質、即ち波動的性質と粒子的性質を併せ持つことが可能となるのです。でも、“物理量は演算子”と言われても、なかなかピンとはきませんね。ゆっくり時間をかけて味わってください。1つ、この波動関数を記述するために複素数は本質的な役目を果たすことを注意しておきましょう。

“もの”の状態を表す波動関数 ψ およびエネルギー E はシュレディンガー方程式と呼ばれる次式を“固有値問題”として解くことにより求められます:

$$H\psi_n = E_n\psi_n \quad (2.5)$$

ただし、 H はハミルトニアンと呼ばれる演算子で、古典力学で定義される全エネルギー(=運動エネルギー $\frac{1}{2}mv^2$ +ポテンシャルエネルギー U の和)を先に示した演算子で書き換えたもので与えられます:

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x). \quad (2.6)$$

従って、“もの”の全エネルギーの観測値 E は、特定な状態を表す波動関数 ψ_n での平均として

$$E_n = \int \psi_n^* H \psi_n dv : 1 = \int \psi_n^* \psi_n dv \quad (2.7)$$

と書けます。ここで、 ψ_n^* は ψ_n の複素共役です。

このように、物理量を演算子と観測値に分離することにより、波動方程式(シュレディンガー方程式)を解いて求められる波動関数 ψ が常に波動的性質を受け持つこととなります。波動関数の絶対値の2乗は粒子の存在確立を表し、粒子の2重性はこのように理論の中に取り入れられました。

この様な『量子力学』により解釈可能な量子現象は、不確定性関係やエネルギー準位の離散性化など量子力学特有の様々な性質に起因し、私たちにとって、“超常”の世界です。物の性質を研究する物性と呼ばれる領域では、ミクロな電子の振る舞いが主役です。超伝導現象などはその典型なのです。今や電子一つ一つが制御できる時代となり、それらが演じる量子現象は空想の世界のお話ではなくなり、私たちの身近な生活に様々な形で関与しています。PCや携帯電話なども量子現象の塊です。

3. シュレディンガー方程式 II

シュレディンガー方程式の例として、1次元調和振動子に対するシュレディンガー方程式を例示し、その解を示そう。また、1次元調和振動子の零点振動エネルギーと不確定性原理の関係についても考える。

3.1 1次元調和振動子

この節では、古典力学でしばしば現れかつ応用例の多彩な調和振動子の問題を考えることにしよう。調和振動子というのは、ばねの弾性力を受けて単振動する粒子のことである。つり合いの位置からの変位を x とするとき、調和振動子には $f = -kx$ ($k > 0$: 復元力の定数, ばね定数など)のフックの力がはたらく。ここで、振動子の質量を m として $k = m\omega^2$ と

おくと、 $f = -m\omega^2 x$ となり、 $x=0$ の点を基準としたポテンシャルは、 $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ と表される。こうして、調和振動子に関する定常状態のシュレーディンガー方程式は、エネルギーを E として、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \varphi(x) = E\varphi(x) \quad (3.1)$$

と書ける。

さて、この方程式を解くことを考えよう。それには、次のように変数を置き換えると便利である。

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad \varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (3.2)$$

この置き換えにより、(3.1)式は、

$$\frac{d^2\varphi(\xi)}{d\xi^2} + (\varepsilon - \xi^2)\varphi(\xi) = 0 \quad (3.3)$$

のように簡単に書ける。

2階の常微分方程式(3.3)を解けばエネルギーと波動関数が求まり、問題が解けたことになる。しかしそこに到達するには、適度な数学が必要で、本講座の範囲を出ることになるので、ここではその結果のみを引用する。詳しく知りたい方は、拙著・教科書「量子力学I」[1]をご覧ください。

エネルギー固有値

波動関数の境界条件より(3.3)式の ε は

$$\varepsilon = 2n + 1 \quad (3.4)$$

と求まり、(3.2)式よりエネルギー固有値 E_n は、

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (3.5)$$

と求められる。このときの整数値 n は“もの”の状態を表す整数で**量子数**と呼ばれる。

調和振動子の波動関数

次に、調和振動子の各固有状態での波動関数を示そう：

$n=0$ ($\varepsilon=1$) のとき、 $\varphi_0(\xi) = c_0 e^{-\xi^2/2}$ (c_0 : 任意定数) : 基底状態

$n=1$ ($\varepsilon=3$) のとき、 $\varphi_1(\xi) = c_1 \xi e^{-\xi^2/2}$ (c_1 : 任意定数) : 第1励起状態

$n=2$ ($\varepsilon=5$) のとき、 $\varphi_2(\xi) = c_0(1-2\xi^2)e^{-\xi^2/2}$: 第2励起状態

$n=3$ ($\varepsilon=7$) のとき, $\varphi_3(\xi) = c_1 \left(\xi - \frac{2}{3}\xi^3 \right) e^{-\xi^2/2}$: 第3励起状態

...

任意定数 c_0 , c_1 は波動関数の規格化条件で決められる。

零点振動エネルギーと不確定性原理

エネルギー固有値(3.5)は, ボーア-ゾンマーフェルトの量子化条件を用いて得た調和振動子のエネルギー $E = nh\nu$ と比較してみると面白い。 $h\nu = \hbar\omega$ であるから, 基底状態 $n=0$ でエネルギーは0となるが, 量子力学の結果(3.5)式では $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ のエネルギーを持ち, ゼロにはなれない。これは, シュレーディンガー方程式が不確定性原理を含んでいるためであり, E_0 を零点エネルギーという。

零点エネルギーの意味を考えるために, 質量 m の調和振動子が位置 x で運動量 p をもつ場合を考えよう。その時, そのエネルギーを古典論で表せば,

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

となる。ここで, 不確定性原理を考慮すると, エネルギー最低状態でも, 粒子の位置と運動量には, それぞれ Δx および Δp 程度の不確定性があるはずである。そこで, $p = \Delta p$, $x = \Delta x$ とおいて, 位置と運動量の不確定性関係を用いると, 相加平均 \geq 相乗平均より,

$$E = \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2$$

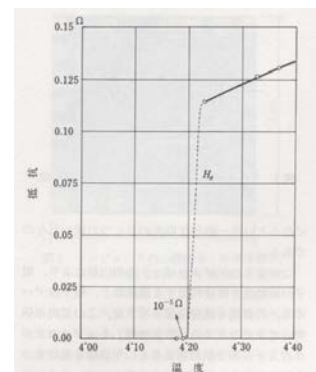
$$\geq 2\sqrt{\frac{(\Delta p)^2}{2m} \cdot \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2} = (\Delta p \cdot \Delta x)\omega \geq \frac{1}{2}\hbar\omega$$

となり, 上で求めた基底状態のエネルギーを得ることができる。

即ち, 零点エネルギーは単なるエネルギーの基準点の変更ではなく, 物理的に重要な意味をもっている。例えば, ^4He や ^3He は, 絶対零度になっても通常の外圧下では固体にならず, 液体のままである。これは, ヘリウムの原子間力が小さく, 質量も小さいため, 零点振動の振幅が大きくなるためである。 ^4He では 25 気圧以上, ^3He では 30 気圧以上の圧力をかけるとやっと固体になる。

7. 超伝導

量子力学が認識される 10 年以上も前の 1911 年, ライデンのカーマリン・オーネス博士は, ヘリウムガスの液化 (4.2K) に成功し, それを用いて研究室の大学院生に水銀(Hg)の電気抵抗の温度変化を測定するよう命じた。院生は早速, 図にあるような結果を提出しましたが, オーネス博士はしばらく “電気抵抗がゼロ



になる”という結果を信じず、何度も何度も測定の繰返しを命じたと言われています。それ位、“電気抵抗がゼロ”という結果は衝撃的であったことを物語っています。

でも、観測された電気抵抗 0 の状態は一体どのような状態なのでしょう？その理論的解釈を得るまでに、実に 50 年近くの歳月を要する物性の難問となったのです。1933 年には完全反磁性を示すマイスナー効果が発見され、1962 年には電子対が高いエネルギー状態をトンネルするジョセフソン効果が発見され、“超伝導”はマクロな系で起きる量子現象と確認され、華々しくデビューしたのです。

これらの超伝導現象を説明する BCS 理論が提出されたのは 1958 年で、バーディーン (B) を指導者とする、クーパー (C) と院生のシュリーファ (S) のグループです。この理論は、クーロン反発力を及ぼしあう電子 (フェルミオン粒子) 同士でさえ、格子振動を媒介すれば引力を及ぼすことが有り、それらの電子 (フェルミオン粒子) がペアーを組んでボソン粒子となり、それらのボソン粒子は巨視的な数 1 つの新しい巨視的量子状態 (超伝導状態) に落ち込んでエネルギーを安定化させることを解き明かしたのです。勿論、その基礎には「量子力学」とそれを包括した「量子統計力学」および多くの電子を扱う物性論が用いられています。その後、多くの研究者は実用的観点から超伝導状態を起こす臨界温度 (T_c : 超伝導状態になる温度) が高い様々な物質を探索し、超伝導の実社会への応用を夢見ましたが、1980 年頃まで特に際立った進歩は有りませんでした。

1987 年、スイスのベッドノルツとミュラーは銅酸化物の中から臨界温度が 30K に達する“高温”超伝導物質を発見、その後すぐにアメリカのチューは元素の組み合わせを少し変え臨界温度が 90K の物質を発見し (それでも室温 300K には程遠いが)、超伝導研究の新たな局面を切り開いたのです。ベッドノルツとミュラーの功績は、それまでの研究者が物質探索対象を金属群に置いたのに対し、彼らは酸化物**絶縁体群**の中にその可能性を求めたことに有ると言えます。“ガイシ”などに使われる典型的なセラミックの中に超伝導体を発見したのですから。超伝導体は金属導体としての性質の極限、即ち抵抗が 0 の導体です。その様な中で、絶縁体とその変形の中に超伝導体の可能性を求めたことには驚かされます。何時の時代も、通常概念に捕らわれていると新たな発見には出会えません。しかし、一方、通常概念に反したことばかり行っていると、結局小さな成果さえもあげられないことが十分あることを覚悟すべきです。残念ながら、現在も高温超伝導の機構が完全に解明されたとは言い難いし、室温で超伝導になる物質が発見されてもいません。最近では、これまで超伝導と相性が悪いと思われていた磁石になる元素、鉄を含む酸化物に新しいタイプの超伝導体が発見され、岡山大学でも研究されています。若い人たちのこれまでの概念にとらわれない新たな提案が待たれているのです。

超伝導現象がこれほど話題になるのは、やはり応用上の有益さでしょう。もし、室温で超伝導現象を示す物質が発見されれば、1. 送電線に応用。送電中のロス (熱となって消失する分) が回避出来、原発などは不要。2. リニャーモーターカーが安価かつ低エネルギー消費の輸送手段として実現され、リニャーモーターカーによる高速鉄道網が実現。3. メモリ

一やCPUに使用されれば、熱放出の問題が解決されると共に、演算のより早いチップが開発される等々、ぱっと思いつくだけでもきりがありません。

8. 磁性

磁石の歴史は古く、古代ギリシャの時代からその存在が知られており、プラトンが「マグネシアの石」として言及している。磁石は、私たちの身の回りでも大変活躍しており、日本人の佐川真人によって1982年発明された「ネオジム磁石」はそれまでの磁石の性能を一気に向上させ、モーターや記録メディアなどの製品の小型化に大いに貢献した。医療の分野での活躍やリニャーモーターカーの分野での活躍も忘れてはならない。

このような磁石の起源をたどってゆくと、電子の持つ“スピン”自由度と軌道を描いて運動するとき流れる電流により作られる磁場とに帰着する。特に、鉄などの磁石の主たる担い手は“スピン”である。しかし、このスピンは最も量子力学的自由度で、ディラックにより初めてその存在が理論的に示されたのである。

スピンのもっとも小さな単位が $S = 1/2$ であり、スピンは上向き、下向きという2つの自由度を持ち、2次元の空間を張るのである。古典的には3次元空間での大きさの決まったベクトルを思い描けば良い。このスピンについて少し見てみよう。

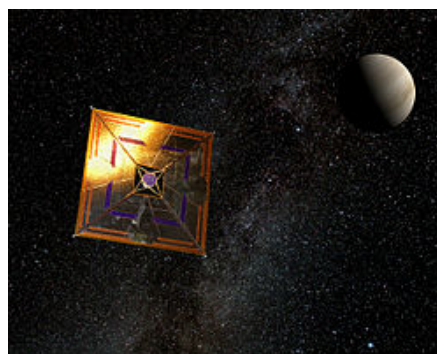
今、 $S = 1/2$ のスピンが2つあり、それらの間には、2つのスピンを平行に揃えようとする相互作用が働いていたとしよう。ベクトルであるスピンは互いの1成分が平行となり、全体としてどちらかを向く。この現象は古典的に考えても量子力学的に考えても差異は無い。一方、同様に $S = 1/2$ のスピンが2つあり、それらの間には今度は2つのスピンを反平行に揃えようとする相互作用が働いていた場合を考える。古典的に考えれば、ベクトルであるスピンは互いの1成分が反平行となり、その方向はどちらかを向く。しかし、量子力学が教えるところは、全く違ったものである。即ち、スピンベクトルの3成分がともに反平行となるというのである。常識では考えられない“3成分がともに反平行”の状態？そんなものが量子力学では可能で、それに相当して、エネルギーも1成分が反平行の場合に比べて3倍の利得となる。これらのことは、最近流行りの“量子力学的エンタングルメント”と深く関係し、量子コンピュータとも関係する事柄なのです。量子の世界はなんて不思議！

9. その他の量子現象の例

量子現象の例は数限りありません。私たちが普段使用している携帯電話の中身は量子現象で満ちています。例えば、メモリーは電子一個一個を制御し、電子が居るか居ないかで、0,1を判断し、記憶しています。

変わったところでは、宇宙船 IKAROS (イカロス) [2] があります。イカロスはソーラーセイル (太陽帆) を所持し、差し渡し 20mにも及ぶ超薄膜の帆を広げ“太陽光圧”を受けて進む宇宙船です。ここでイカロスの推進に用いられている“太陽光圧”とは、太陽から来る光の圧力のことで、

通常波と考えられている光ではその性能は発揮できませんが、光の粒子的側面をうまく利用しているのです。即ち、光がソーラーセルで跳ね返りその時光（光子と呼ぶ）の持つ運動量がソーラーセルに与えられイカロスが推進するというものです。これは、量子力学における光の波動性と粒子性の2重性を巧みに利用した考え方であり、イカロスの推進は量子論に裏打ちされていることとなります。



問：今衛星の質量を 300Kg、セイルは 14mX14m の一様で全面太陽光圧に有効であるとする。地球近くでの太陽光圧を $4.6 \times 10^{-6} \text{N/m}^2$ とし、セイルは太陽光圧を垂直に受けるとしたときの衛星に生じる加速度を求めよ。

10.まとめ

太陽のエネルギーをくみ上げる量子デバイスが出来れば、福島原発などにこれほど悩むことはなくなります。室温超伝導物質が発見されれば、現在の環境問題や地球温暖化問題解決にも大いに貢献できることは間違いありません。量子コンピュータが完成すれば……。他にも、自然界には私たちにとって“想定外”の有用な現象がまだまだ隠されているに違いありません。さあ、皆でロマンに満ちた“量子世界”の探検に旅立ちましょう！

[1] 量子力学I 講談社基礎物理学シリーズ6 原田 勲、杉山忠男

[2] ウィキペディア：<http://ja.wikipedia.org/wiki/IKAROS>