

クレジット:

UTokyo Online Education 学術俯瞰講義 2017 田中雅明

ライセンス:

利用者は、本講義資料を、教育的な目的に限ってページ単位で利用することができます。特に記載のない限り、本講義資料はページ単位でクリエイティブ・コモンズ 表示-非営利-改変禁止 ライセンスの下に提供されています。

<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>

本講義資料内には、東京大学が第三者より許諾を得て利用している画像等や、各種ライセンスによって提供されている画像等が含まれています。個々の画像等を本講義資料から切り離して利用することはできません。個々の画像等の利用については、それぞれの権利者の定めるところに従ってください。

学術俯瞰講義

物質のはじまりとはたらきーフェムト、ナノ、エクサの世界

物質科学の基礎と工学

Fundamentals of materials science and engineering

田中 雅明

東京大学 大学院工学系研究科

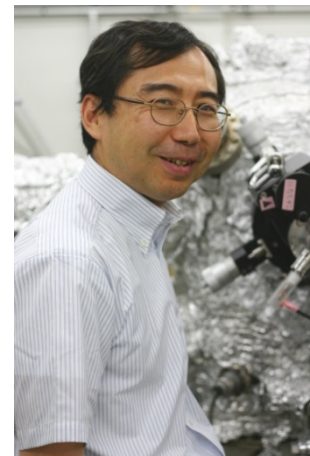
スピントロニクス学術連携研究教育センター長

電気系工学専攻、電気電子工学科 教授

<http://www.cryst.t.u-tokyo.ac.jp/>

<http://www.csrn.t.u-tokyo.ac.jp/>

自己紹介 田中 雅明
東京大学 大学院工学系研究科
スピントロニクス学術連携研究教育センター長
電気系工学専攻、電気電子工学科 教授



昭和36年(1961年)生まれ

学歴

昭和59年(1984年) 3月 東京大学工学部電子工学科卒業

平成元年(1989年) 3月 東京大学大学院工学系研究科電子工学専攻博士課程修了

学位 工学博士 (平成元年(1989年) 3月)

職歴

平成元年(1989年) 東京大学工学部電子工学科・助手、1990年電気工学科・講師

平成4年(1992年)～平成6年(1994年) 米国ベル通信研究所 (Bellcore) Research Scientist

平成6年(1994年) 東京大学工学部電子情報工学科・助教授

平成7年(1995年) 東京大学大学院工学系研究科 電子工学専攻・助教授

平成16年(2004年) 東京大学大学院工学系研究科 電子工学専攻・教授

平成20年(2008年) 東京大学大学院工学系研究科 電気系工学専攻・教授(改組による)

平成28年(2016年)～ 同 スピントロニクス学術連携研究教育センター・センター長

この間に 平成7年～平成10年 科学技術振興事業団さきがけ研究21「場と反応」領域研究者

平成13年～19年 科学技術振興機構さきがけ研究「光と制御」領域研究者

半導体低次元量子ヘテロ構造から始まって、金属・半金属・磁性金属・磁性半導体を含む電子材料のエピタキシャル薄膜や多層膜・ヘテロ構造・ナノ構造の結晶成長、物性探索、デバイス応用の研究に従事。1990年代初めから二十数年にわたってスピン機能材料とスピントロニクスの開拓研究を行っている。Science(知的好奇心)とEngineering(社会のニーズ)の両方の視点を持ちつつ研究を進めています。

「スピントロニクス学術研究基盤と連携ネットワーク」拠点整備

【背景】 文部科学省「学術研究の大型プロジェクトロードマップ2014」、日本学術会議マスタープラン2014重点大型計画に採択

【必要性】 世界をリードする日本のスピントロニクス研究の国際競争力強化
⇒ イノベーションを通じ社会に貢献

大阪大学
スピントロニクス材料・デバイスデザイン

**スピントロニクス学術連携
研究教育センター**
(中核拠点4大学) H28年度～

九州大学 広島大学 京都大学 名古屋大学
AIST NIMS 東京工業大学 早稲田大学 理化学研究所

東北大学
スピントロニクス
素子・集積回路創製

東京大学
スピントロニクス
材料・素子創製

慶応義塾大学
量子スピントロニクス
創製

【目的】

- ①連携機関との共同研究の促進
- ②異分野横断型科学技術の創造
- ③イノベーションの創出
- ④国際的若手人材の育成

【波及効果】

- ・情報通信技術の革新
- ・既存産業の活性化・新産業の創出
- ・省エネルギー・環境調和型社会の実現

物質科学の基礎と工学

Fundamentals of materials science and engineering

第7回 11月9日(木)

物質科学の基礎と現代社会

Fundamentals of materials science and modern society

第8回 11月15日(水)(補講日)

物質科学から工学へー半導体の爆発的发展と情報化社会ー

From materials science to engineering — Explosive developments of semiconductor technology and information society

第9回 11月30日(木)

物質科学と先端研究の世界

Advanced research in materials science

物質科学で扱う内容とその意義

物理学的世界像（2つのとらえ方）

還元主義 (reductionism)

ある階層の系のふるまいを、より基本的な階層の法則に還元して理解する。

究極の構成要素と力とは何か ⇒ 素粒子物理学

しかし、自然界の各階層にはそれぞれの物理学がある

創発現象 (emergence)

互いに相互作用する「個」の集団が、「個」の性質からは予測できないような質的に新しいふるまいを示す

多体系のふるまい：相転移

例：強磁性、超伝導、生命現象

More is different. (P. W. Anderson)

物質（非常に多数の原子、電子から成る）の性質はきわめて豊かで多様性に富んでいる。それらのある程度普遍的、統一的に理解できるところもある（物性物理学、物質科学）。

理学と工学

昔は...

理学は基礎研究をして、真理の発見、現象の解明を目指す

工学は応用研究をして、発明、技術革新、価値の創造を目指す

理学者は神と語らい、工学者は社会と語らう

→ 現在は、理学も工学も神と語らい、社会とも語らう

理学 (Science)

工学 (Engineering)

境界・融合領域

基礎研究

応用研究

真理の発見

発明、技術革新

現象の解明

社会的価値の創造

物質科学

物性物理学、物質工学

化学とその応用

物性物理学、物質科学の意義

物質の性質を物理学の基本原理に基づいて理解したいという知的欲求

⇒ 物質観の構築、人類の知的財産になる

物性を理解し利用する、有用な機能の開拓と制御

⇒ 工学的応用につながる、実用化、社会にインパクト

2つのアプローチがある

Curiosity-Driven Research (学術研究)と

Mission-Oriented Research (目的志向型研究)

しかし、これらの間に明確な境界はなく、1人の研究者の意識の中でも、ある割合で共存する(割合は人によってもテーマによっても異なる)

対象となる物質系

- 固体(単結晶, 多結晶)
- 乱れた結晶(不純物, 欠陥, ...)
- アモルファス, ガラス, 準結晶
- 液体, 量子液体
- 微粒子, クラスター
- 表面, 界面 (→吉信先生)
- 人工結晶(超格子), ナノ構造
- ソフトマター(高分子, 液晶, ゲル)
- 原子気体(ボース凝縮体)
- etc...

物質の性質（→様々な用途）

■構造的性質

- ・結晶構造（固体，液体，ガラス，・・・）
- ・組成

■力学的性質

- ・鋼鉄は硬く，金は柔らかい
- ・ガラスは硬いが脆い
- ・ダイヤモンドは硬い，グラファイト（黒鉛）はへき開しやすい（はがれやすい）

■熱的性質

- ・銅は熱伝導が良く，ステンレス鋼は悪い

■電氣的性質

- ・電気伝導（金属，絶縁体，半導体）→ 様々な情報処理デバイス
- ・強誘電性
- ・超伝導

■磁氣的性質

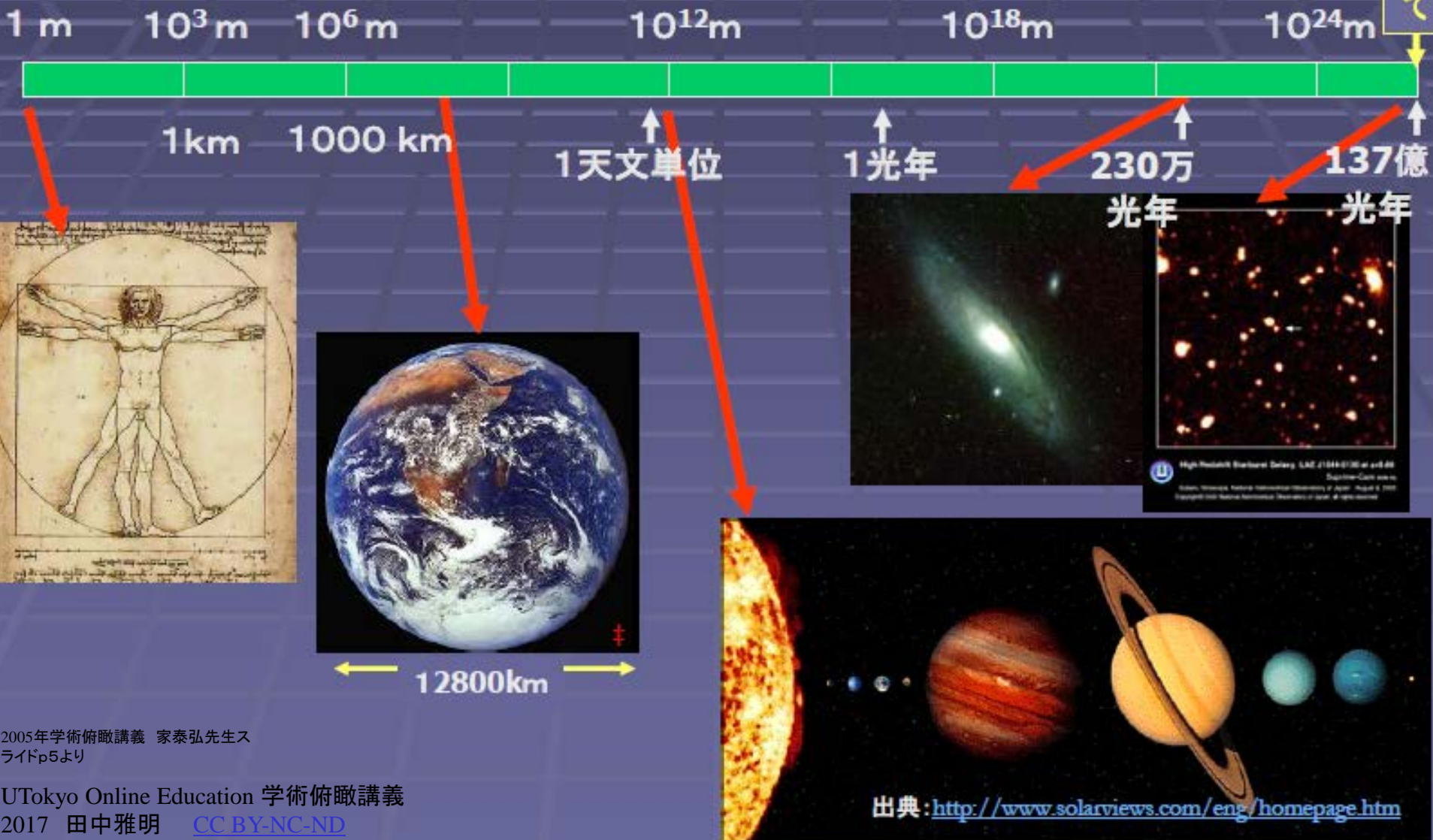
- ・強磁性（鉄はなぜ磁石になる？）→ モーターなど電気機器、情報記録デバイス

■光学的性質

- ・宝石の色，金属光沢，透明（→ 光ファイバー）
- ・光吸収（→ 光検出器）
- ・発光（→ 発光ダイオード，半導体レーザー）

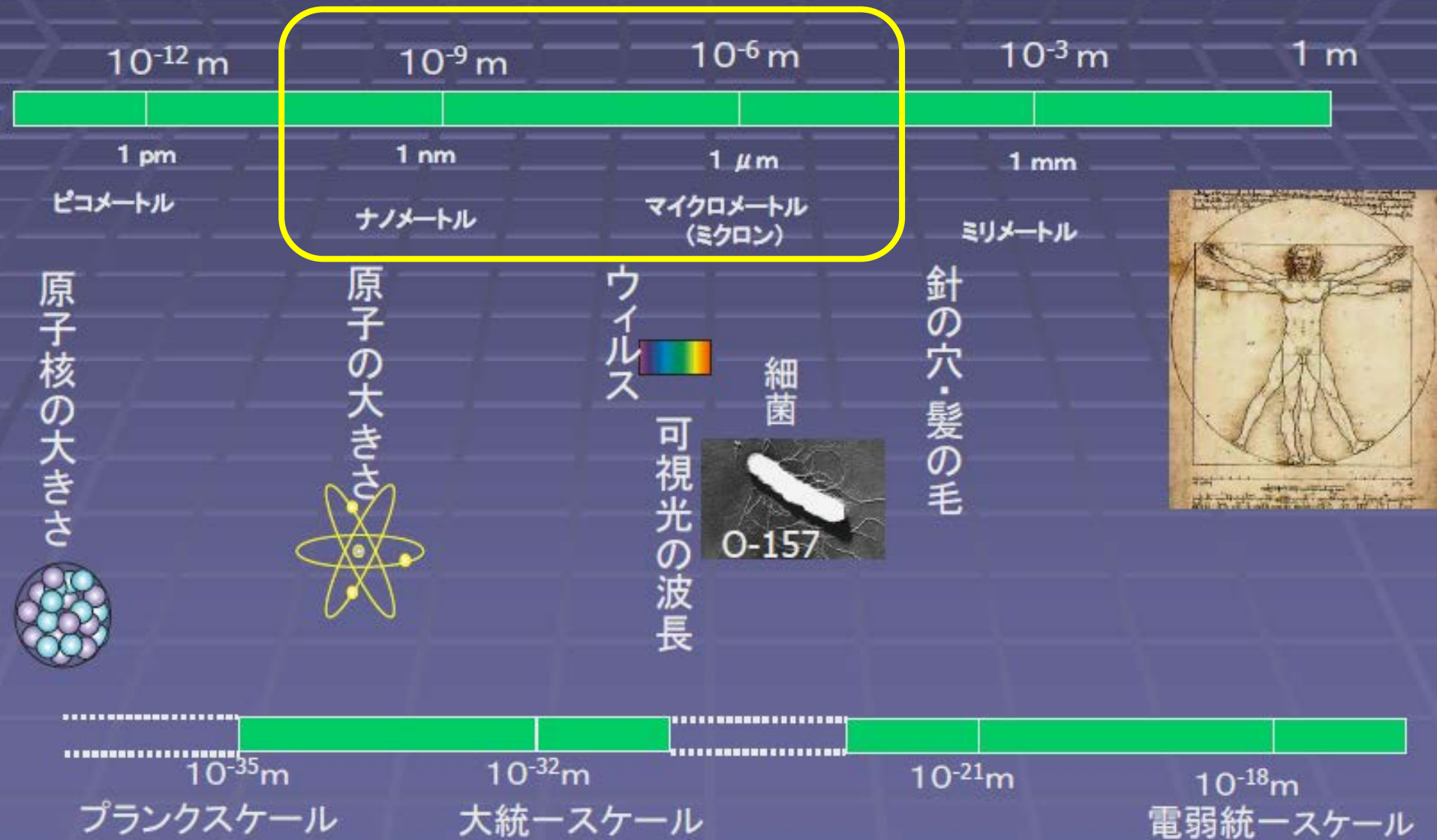
スケールについて(1): 大きなスケール

宇宙の果て



スケールについて(2): 小さなスケール

2005年学術俯瞰講義 家泰弘先生スライドp5より



新しい重要な物質（物質機能）の発見と応用

20世紀に開発されたIV族半導体、III-V族化合物半導体

- Si, Ge → トランジスタ、LSI、CCD、太陽電池...
- GaAs, InP, GaN → 高速電子デバイス、光デバイス
(HEMT, HBT, LED, 半導体レーザ, 光検出器)

→ **大きなインパクトを社会にもたらしている**

最近では

- 酸化物高温超伝導体(ペロブスカイト系その他)
 - ナイトライド(窒化物)系半導体 → 青色LED, レーザ
 - 液晶 → 表示デバイス、ディスプレイ
 - VLSIにおける新材料: ゲート絶縁膜、シリサイド、配線材料
 - ダイヤモンド、SiC → 耐環境電子デバイス
 - 強誘電体、強磁性体 → 高密度不揮発性メモリ
 - カーボンナノチューブ、フラーレン → ディスプレイその他
 - 金属人工格子、強磁性半導体、スピントロニクス材料
- スピン自由度を生かしたエレクトロニクス: スピントロニクス

◆物質の設計：人工物質をつくる

半導体超格子・量子井戸構造、低次元量子構造

→ 次世代の光電子デバイス

金属人工格子、強磁性トンネル接合

→ GMR, TMRデバイス

酸化物ヘテロ接合系

新しい混晶半導体、合金

スピニエレクトロニクス材料

"現代の錬金術"

原子レベルで物質を制御しながら作製し、
構造、膜厚、物性、機能を制御・設計。

ナノテクノロジーを駆使。

More than Moore, Beyond CMOS → 次世代デバイス
エレクトロニクス、情報・通信、医療、ヘルスケア、福祉、
省エネ、センシング（環境、極限計測）、など広範な応用。

Nobel Prize in Physics 2014

Invention of efficient **blue light-emitting diodes** which has enabled bright and energy-saving white light sources



Photo by 研究振興局振興企画課 from Wikimedia Commons ref. 20171129 CC BY 4.0 https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Isamu_Akasaki_20141211.jpg CC BY 4.0

Photo by 研究振興局振興企画課 from Wikimedia Commons ref. 20171129 https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Hiroshi_Amano_20141211.jpg CC BY 4.0



天野浩教授(54)
名古屋大学

赤崎勇教授(85)
名城大学

名古屋大学電気系で窒化物半導体の研究



Photo by Ladislav Markuš from Wikimedia Commons ref. 20171129 <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Shiju.jpg> CC BY-SA 4.0

中村修二教授(60)
米カリフォルニア大学
サンタバーバラ校

Their inventions were revolutionary. Incandescent light bulbs lit the 20th century; **the 21st century will be lit by LED lamps.**

21世紀はLEDによって照らされるだろう (ノーベル賞委員会, October 7, 2014)

結晶成長国際会議(ICCG-18)、赤崎先生を囲む昼食会

2016年8月8日



2010年 ノーベル物理学賞

2次元物質グラフェンに関する革新的実験研究



Photo by Holger Motzkau 2010 from Wikimedia Commons ref. 20171129
https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Andre_Geim_2010-1.jpg
CC BY-SA 3.0



Photo by Zp2010 from Wikimedia Commons ref. 20171129
https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Konstantin_Novoselov_portrait.jpg
CC BY-SA 3.0

Andre Geim教授

Konstantin Novoselov教授

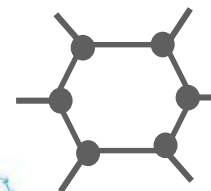
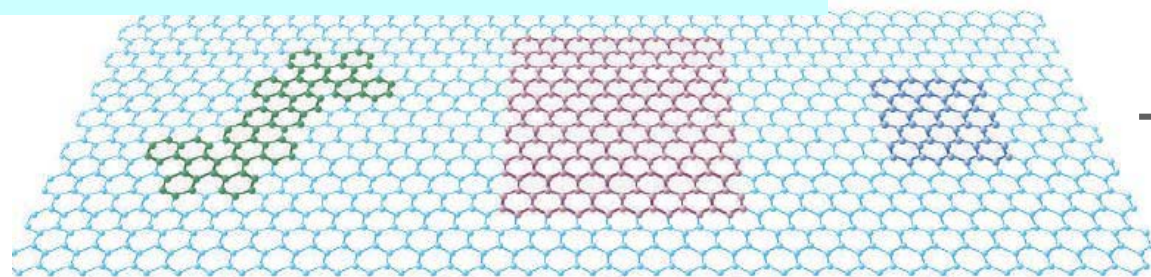
University of Manchester, UK

2010年 ノーベル物理学賞

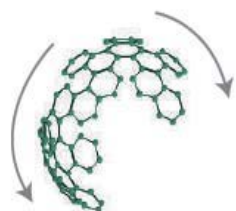
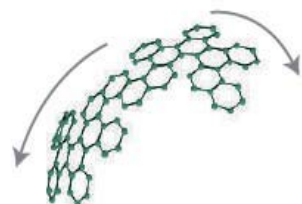
A. K. Geim and K. S. Novoselov, Nature
Materials 6, 183 (2007).
<https://www.nature.com/articles/nmat1849>
fig1

グラフェン (Graphene)

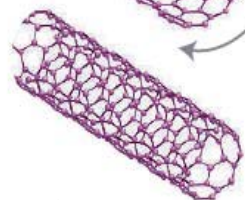
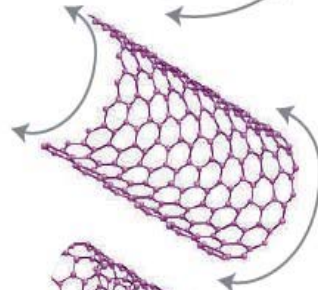
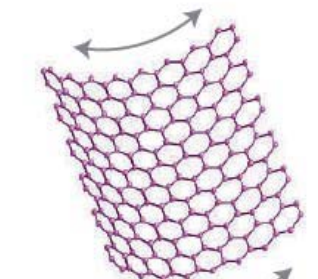
グラフェンの結晶構造(実空間)



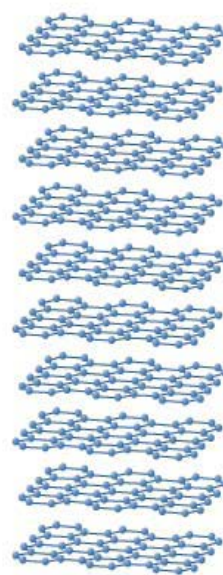
C(炭素原子)
一原子層からなる
シート状の物質



C60



カーボンナノチューブ



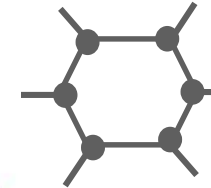
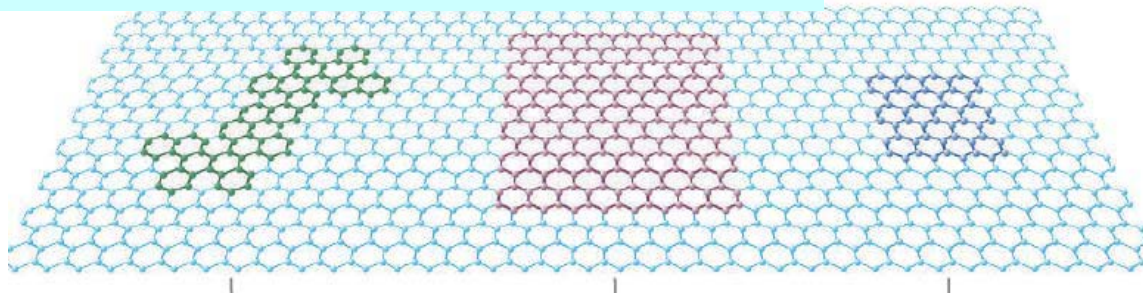
グラファイト

2010年 ノーベル物理学賞 グラフェン (Graphene)

A. K. Geim and K. S. Novoselov, Nature
Materials 6, 183 (2007).
<https://www.nature.com/articles/nmat1849>
fig1

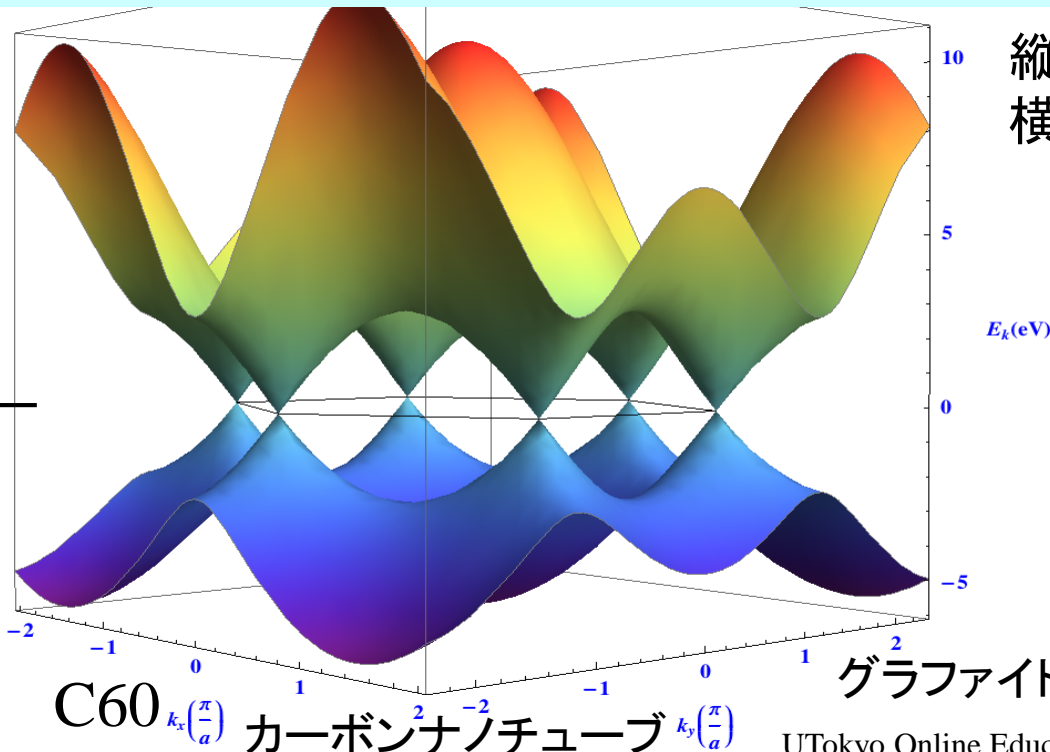
(c) Per Delsing, The Royal Swedish
Academy of Sciences Graphene – the perfect
atomic lattice
https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2010/press.html
Scientific Background
https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2010/advanced-physicsprize2010.pdf
p. 3 Figure 2

グラフェンの結晶構造(実空間)



C(炭素原子)
一原子層からなる
シート状の物質

バンド構造(電子のエネルギー E と波数ベクトル k の関係)



縦軸: 電子のエネルギー E
横軸: 電子の波数ベクトル k

- 鉄の100倍の機械的強度
- 様々な新しい性質(有効質量がゼロの電子と正孔)
- 透明で伝導性に優れる
- 将来のエレクトロニクスを担うかもしれない革新的材料

2007 Nobel Prize in Physics

Discovery of Giant Magneto-Resistance (GMR)



Photo by Eurobas from
Wikimedia Commons ref.
20171129
https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Albert_fert_15_janvier_2009_Spintronique_Paris_Descartes.JPG
CC BY-SA 3.0

Prof. Albert Fert
アルベール・フェール教授
(フランス・パリ南大学)



Photo by Kuebi from Wikimedia Commons
ref. 20171129
https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Peter_Gruenberg_01.jpg
CC BY-SA 3.0

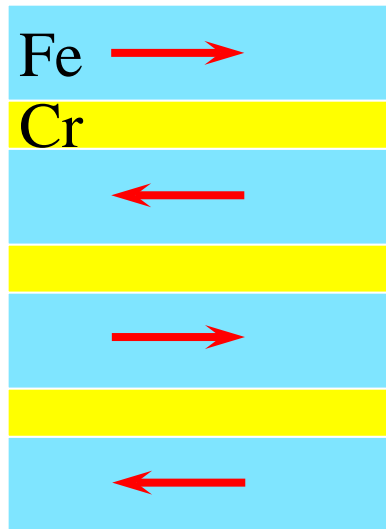
Dr. Peter Grünberg
ペーター・グリュンベルク博士
(ドイツ・ユーリッヒ研究所)

強磁性体と非磁性体の超薄膜からなる金属多層膜における
巨大磁気抵抗効果(GMR)の発見
→ ハードディスクの磁気記録容量の大幅な増大に貢献

巨大磁気抵抗効果(GMR)とは...

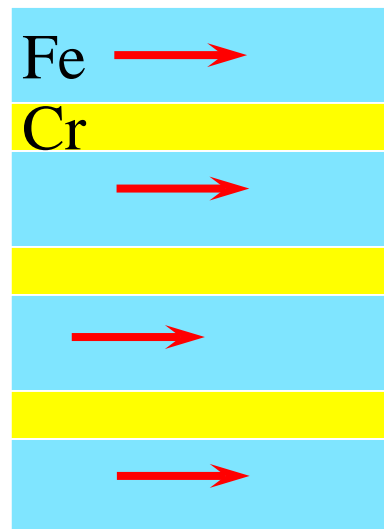
Giant Magneto-Resistance in metallic multilayers

Spin dependent scattering



$H = 0$

Anti-parallel
magnetization
→ High R

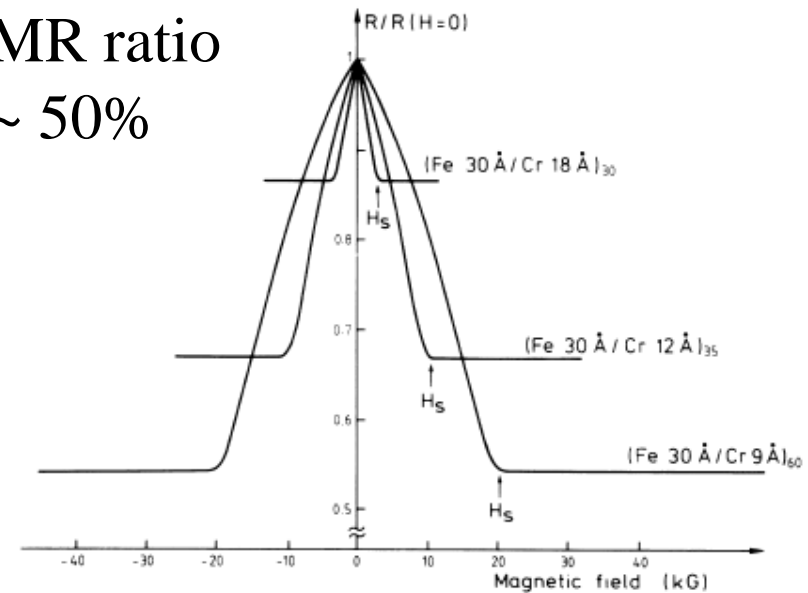


$H > 0$

Parallel
magnetization
→ Low R

MR ratio
 $R(H)/R(0)$

MR ratio
~ 50%



Magnetic field H (kOe)

M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas,
"Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices"
Phys. Rev. Lett. 61, 2472 – Published 21 November 1988
p. 2473 FIG. 3 Magnetoresistance of three Fe/Cr superlattices at 4.2 K.
<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.61.2472>

電子の電荷＋スピンを利用したエレクトロニクス スピントロニクス (spintronics) の発展

巨大磁気抵抗 (GMR) 効果の発見 (1986-1988) Fert, Grunberg



大容量ハードディスク (HDD) の実現



Photo by Takobou from Wikipedia
Commons ref. 20171129
https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%83%95%E3%82%A1%E3%82%A4%E3%83%AB:HDD_inside.jpg
GFDL



室温トンネル磁気抵抗 (TMR) 効果の発見 (1994) 東北大, MIT



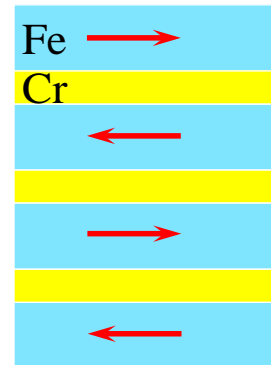
MRAMの実用化 HDDの超高密度化



ファラデーからティラックへ！

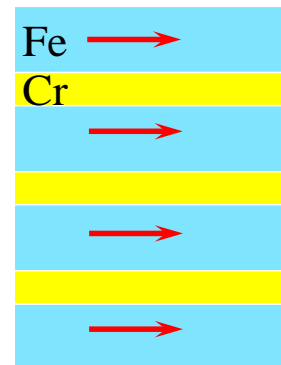
Photo by portal gda, from flickr ref. 20171205
<https://www.flickr.com/photos/135518748@N08/33462546114/in/photolist-SYYi9f-5qGh3k-bHwb3c-aXEgix-qwwE4o-aXEgez-7itQxv-pSiVZi-qwvKyw-8LBE1J-qwvJTd-buzV47-aXEgnV-qwwDT3-qLN4jd-aXEgbn-dcyTRE-qLN4Lq-9ptuTc-qwwDQY-pS5QxU-afUhCu-S97jR9-a4GxFe-5ml5mi-bqILcQ-dChUeE-5qW9Qa-9t6aGJ-6TreDj-qP1DEh-aeJDRJ-bt68Ba-7MnMQM-aeFQBg-eaJSPN-9t6aGC-dPSq1Z-4QzGbB-4YjffZ-T2Kbrz-aeFQuz-aeFQqF-6TndUc-enmLAz-bkNYUi-dm29pD-7jFANG-aeFQnR-ovhzaD>
CC BY-NC-SA 2.0

金属人工格子 (各層の厚さ: 数nm)
スピンに依存した電子伝導



$H = 0$

反平行磁化
→ 高抵抗



$H > 0$

平行磁化
→ 低抵抗



次世代デバイス

スピンRAM

スピントランジスタ

超大容量ストレージ

スピン流

スピン光メモリ

量子コンピュータ

スピントロニクスの科学とエンジニアリングの構築

UTokyo Online Education 学術俯瞰講義 2017 田中雅明

CC BY-NC-ND

- 2017 レーザー干渉計LIGOを用いた重力波観測への多大なる貢献
 - 2016 トポロジカル相転移と物質のトポロジカル相の理論的発見
 - 2015 ニュートリノが質量を持つことを示すニュートリノ振動の発見
 - 2014 高輝度・低消費電力白色光源を可能にした高効率青色発光ダイオードの発明
 - 2013 ヒッグス粒子に基づく、質量の起源を説明するメカニズムの理論的発見
 - 2012 個別の量子系に対する計測と制御を可能にする画期的な実験的手法
 - 2011 遠距離の超新星観測を通じた宇宙の膨張加速の発見
 - 2010 二次元物質グラフェンに関する先駆的実験
 - 2009 光ファイバーの低損失化とCCDの発明
 - 2008 対称性の破れ(南部、小林、益川)
 - 2007 巨大磁気抵抗効果の発見 (Fert, Grunberg)
 - 2006 宇宙マイクロ波背景放射の揺らぎの発見
 - 2005 光のコヒーレンスの量子理論への貢献、光周波数コム技術
 - 2004 強い相互作用の理論における漸近的自由の発見
 - 2003 超伝導と超流動の理論に関する先駆的貢献
 - 2002 天体物理学、宇宙ニュートリノの検出(小柴)、宇宙X線源の発見
 - 2001 ボーズ・アインシュタイン凝縮の実現と基礎的な研究
 - 2000 集積回路の発明、高速/光エレクトロニクスに利用される半導体ヘテロ構造の開発
- 純粋物理学への貢献のみならず、工学、社会へ大きな波及効果をもたらした(もたらしつつある)研究、工学的応用に結びつく基礎研究が対象になる例が増えている。

赤字は物質科学、
工学に関連が深い
受賞

社会を支えるコンピュータとネットワーク

Computers



Image from GATAG



Image from GATAG



Image by いらすとや

Image by buysellgraphic.com, from GATAG
<http://free-illustrations.gatag.net/2014/11/23/230000.html>
CC BY



光ファイバー
無線(電磁波)

コンピュータの心臓部＝CPU＋メモリ

CPU = Central Processing Unit

中央処理装置

メモリ: SRAM, DRAMなど

コンピュータは半導体の塊である



<https://www.flickr.com/photos/ichibod/2073251155/>
Image by Ryan Jones, from Flickr
CC BY-NC-SA 2.0



Image from GATAG

COMPUTING FOR THE SOCIO-
TECHNO WEB
A History of Computing through
Representation
4th Generation: Very Large Scale
Integrated (VLSI) circuits
<https://cs.wellesley.edu/~cs110/reading/history/>
CC BY-NC-SA 1.0 ref. 20171205

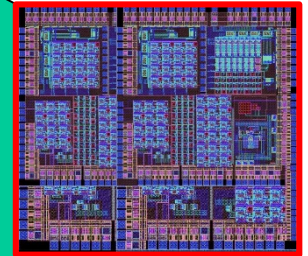
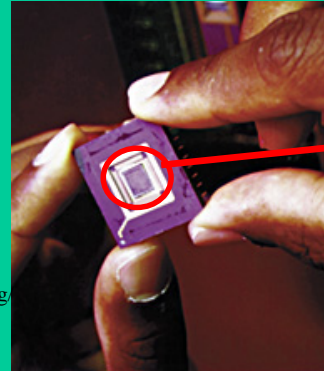


Photo by Angeloleithold from
Wikimedia Commons ref. 20171205
<https://commons.wikimedia.org/wiki/File:InternalIntegratedCircuit2.JPG>
CC BY-SA 3.0

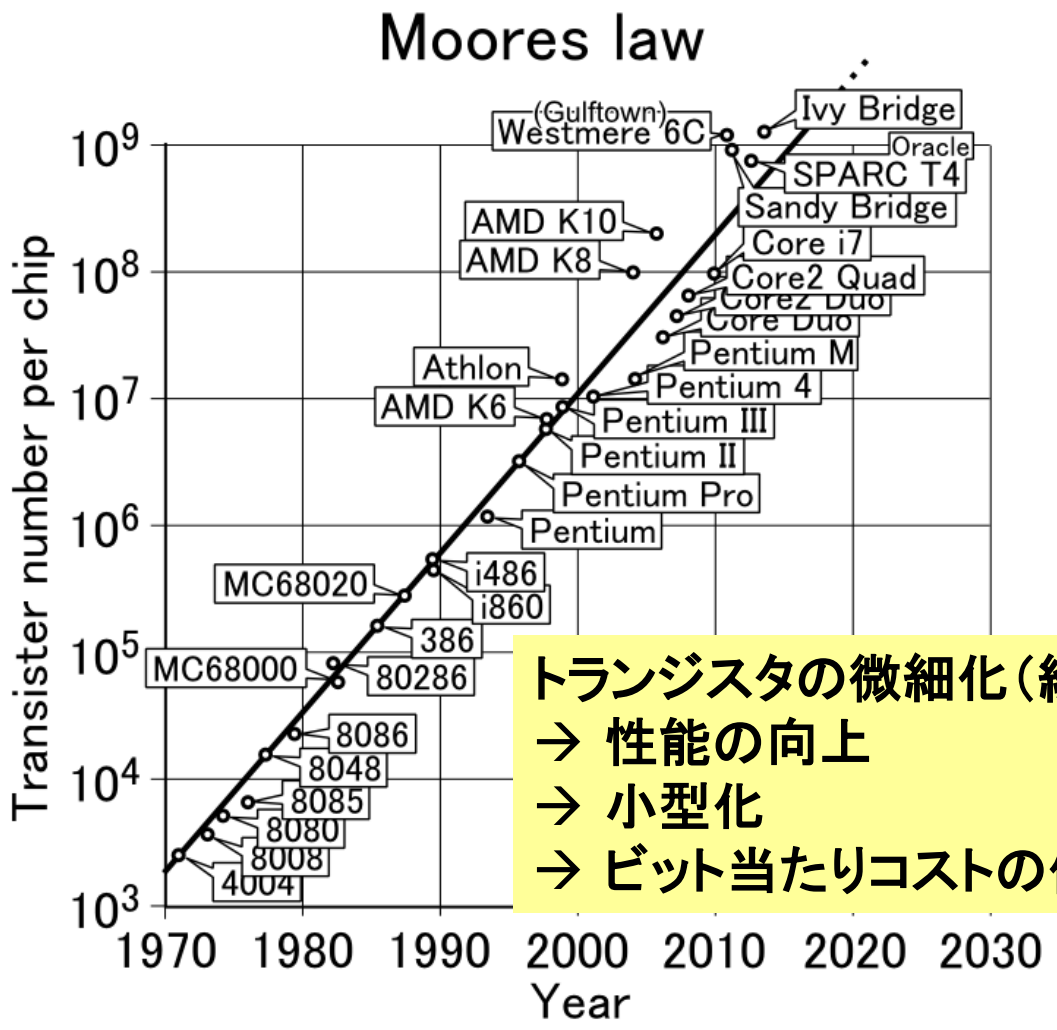
半導体集積回路(多数のトランジスタを組み合わせた回路)でできている
主材料はシリコン(Si)

← 半導体中の電子の振舞い

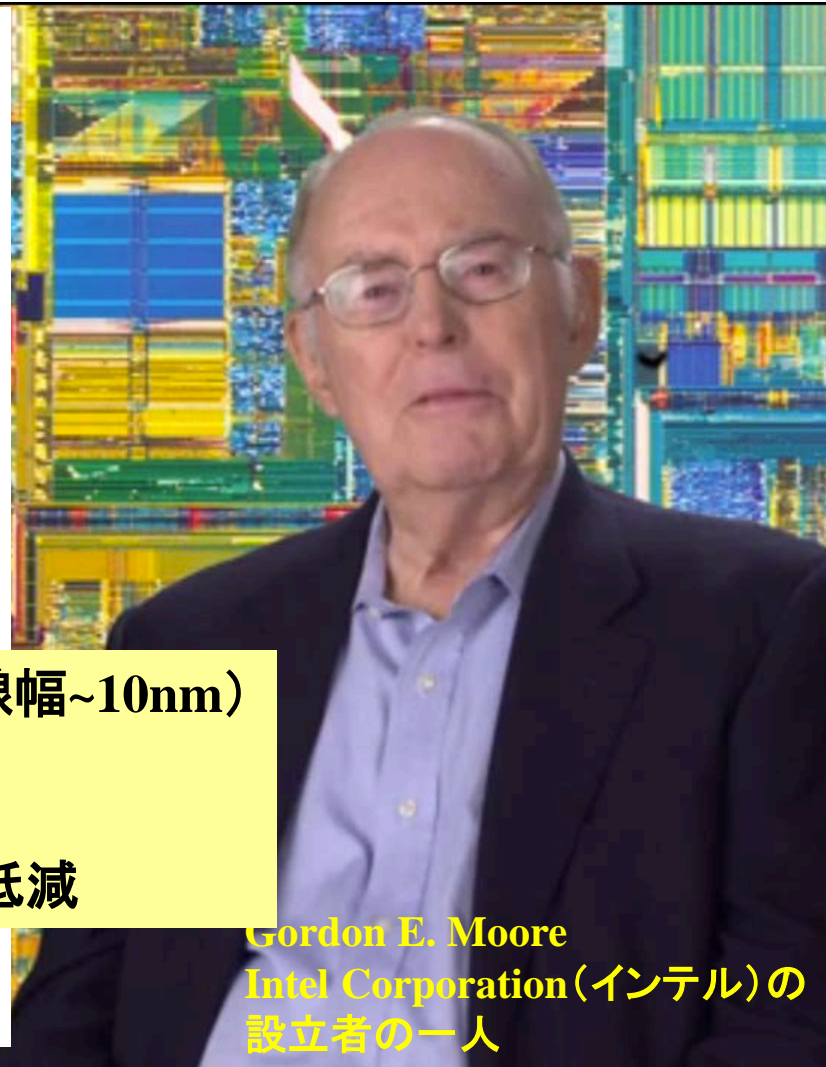
← 固体物理学、量子力学

ムーアの法則

集積回路上のトランジスタ数は18か月(=1.5年)ごとに2倍になる



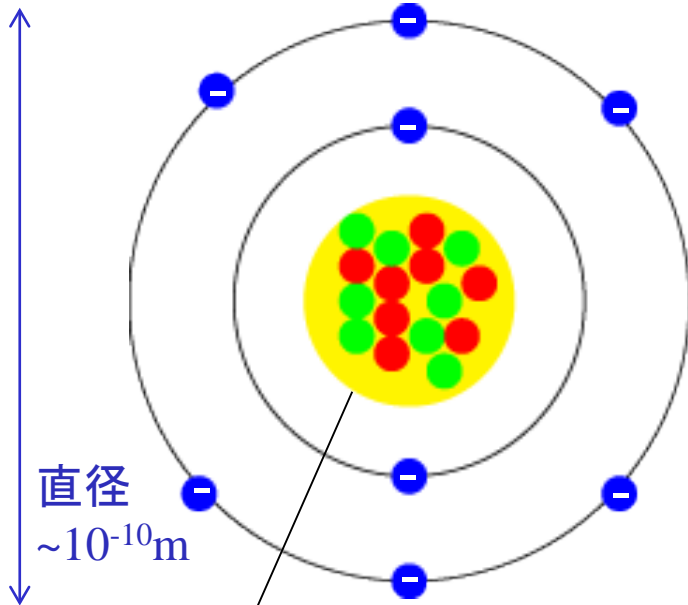
トランジスタの微細化(線幅~10nm)
→ 性能の向上
→ 小型化
→ ビット当たりコストの低減



Gordon E. Moore
Intel Corporation(インテル)の
設立者の一人

量子力学の基本 原子の構造とエネルギー準位

原子の構造



原子核 陽子● m個
中性子● n個
電子● m個

Image from Wikipedia
一部加筆

→ 電子は世界最小の磁石
磁気モーメント

$$\mu_B = e\hbar / (2m_e)$$

この磁気モーメントがそろった物質が強磁性体(磁石)

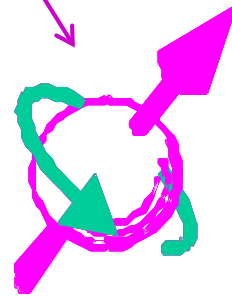
電子

電荷 $-e = -1.6 \times 10^{-19} [\text{C}]$

質量 $m_e = 9.1 \times 10^{-31} [\text{kg}]$

原子核(陽子、中性子)

質量 $m_p \approx m_n \approx 1840m_e$



電子はスピン(spin)をもつ
スピン角運動量 $s_z = \pm(1/2)\hbar$,
ここで、

$$\hbar = h/(2\pi) = 1.06 \times 10^{-34} [\text{Js}]$$

h はプランク定数

1電子のスピン状態は2つの固有値,
固有状態をもつ

spin up = $|\uparrow\rangle$, spin down = $|\downarrow\rangle$

エネルギーのスケールと単位

エネルギーの単位: ジュール $J = \text{kg m}^2 / \text{s}^2$

質量 \times 長さ² / 時間²

cf) 運動エネルギー $= 1/2 mv^2$

良く使う単位として

電子ボルト (electron volt) eV

1 Vの電位差で加速したとき電子がもつエネルギー

$-e = -1.6 \times 10^{-19} [\text{C}]$ なので

$1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} [\text{J}]$

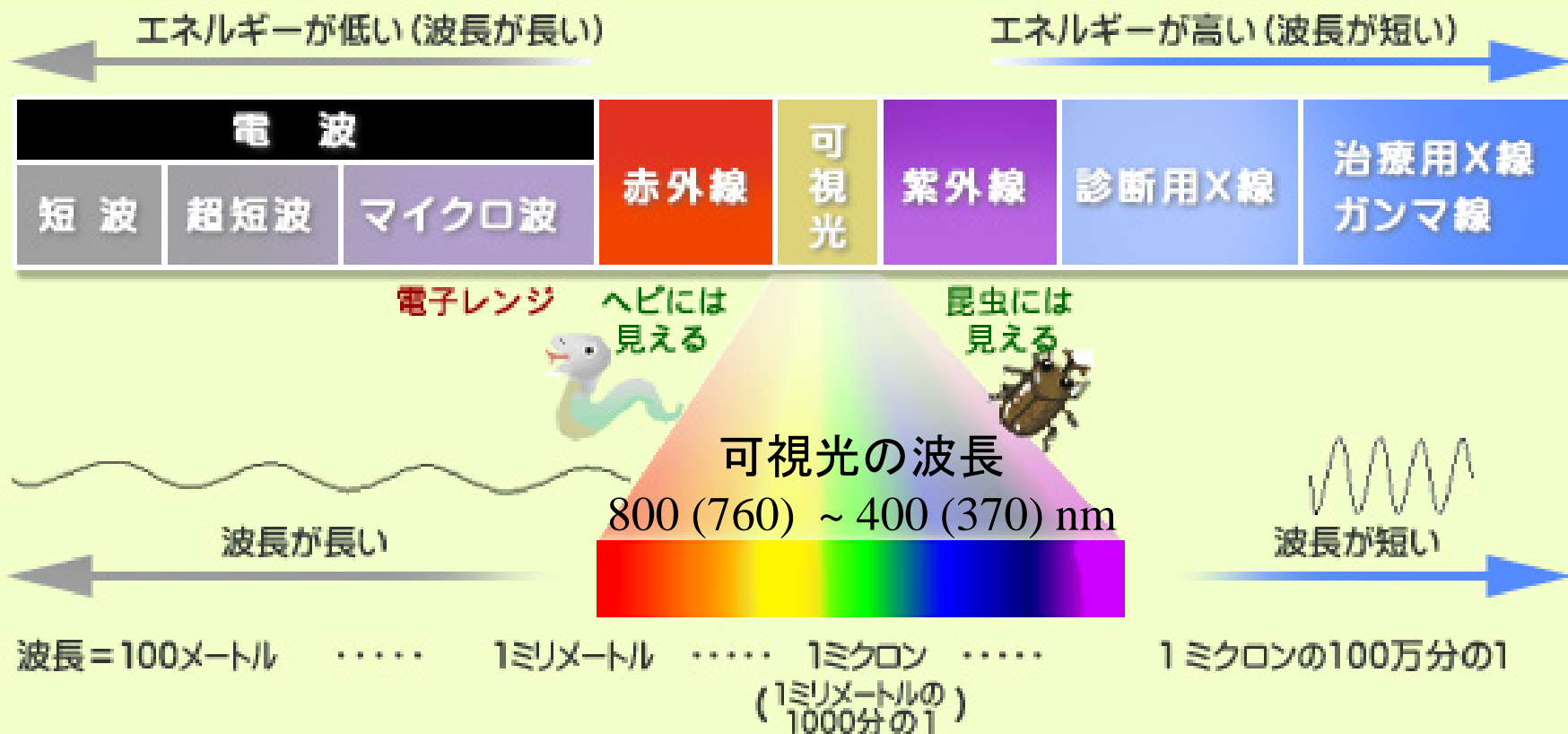
プランク定数 $h = 6.626 \times 10^{-34} [\text{Js}] = 4.13 \times 10^{-15} [\text{eVs}]$ も使う
たとえば、1 eVのエネルギーを持つ光は、

$h\nu = 1 \text{ eV}$, このとき、振動数 $\nu = 2.42 \times 10^{14} \text{ Hz}$

波数 $k = 2\pi\nu / c = 2\pi/\lambda = 2\pi 8070 \text{ cm}^{-1}$, 波長 $\lambda = 1240 \text{ nm}$

光の量子: 光子(フォトン)、 $h\nu$ はフォトンエネルギー

さまざまな光(＝電磁波)のエネルギーと波長



放射線影響研究所
放射線ってなんだろう？
X線、ガンマ線は波長の短い電磁波(光と同じ性質)です
<http://www.rerf.jp/general/whatis/index.html>
ref. 20171129

1 eVのエネルギーを持つ光は、

$$h\nu = 1 \text{ eV}, \text{ このとき、振動数 } \nu = 2.42 \times 10^{14} \text{ Hz}$$

$$\text{波数 } k = 2\pi\nu / c = 2\pi/\lambda = 2\pi \cdot 8070 \text{ cm}^{-1}, \text{ 波長 } \lambda = 1240 \text{ nm}$$

粒子性と波動性

電子など量子力学的粒子は粒子であり波である。

ドブロイ波長 λ , 運動量 p の関係は $\lambda = h/p$

波数 k を用いると運動量 p は $p = \hbar k = \hbar (2\pi/\lambda)$

その状態を表す波動関数 $\psi(\mathbf{r}, t)$ は、
次のシュレーディンガー方程式に従う。

運動量演算子
 $p = -i\hbar \nabla$

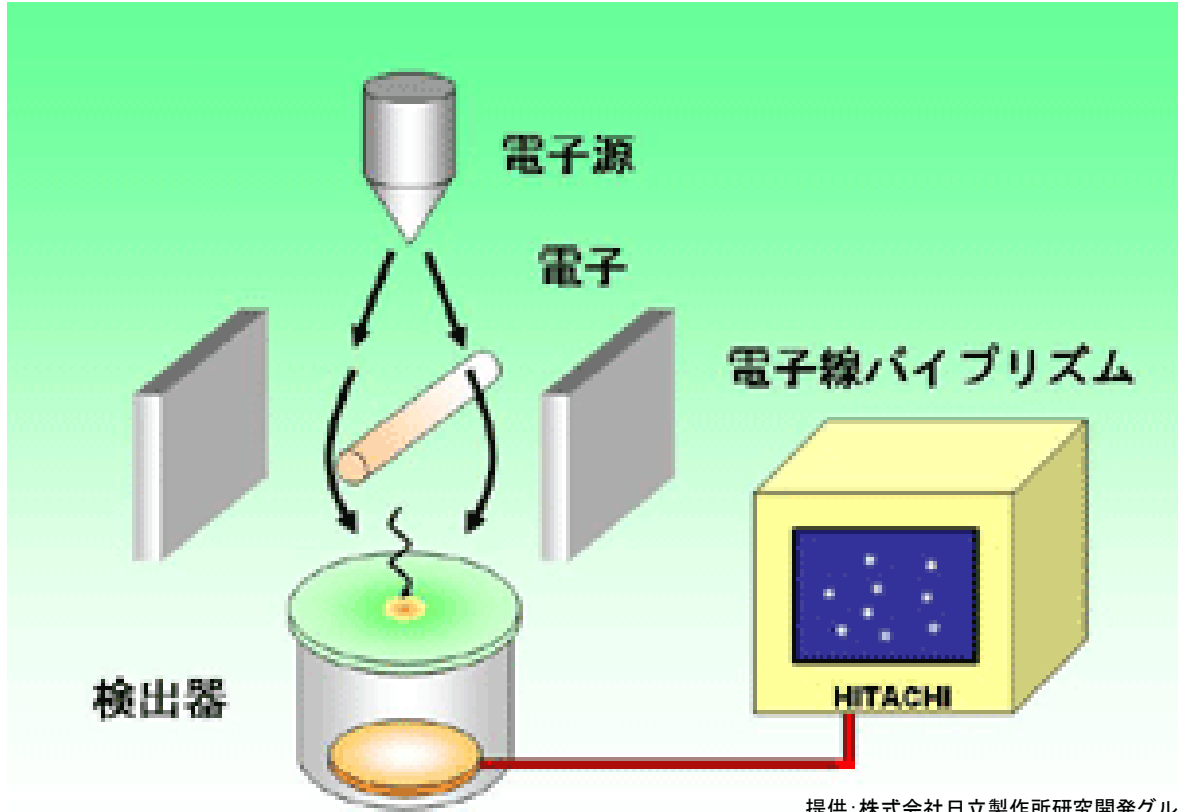
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}, t) \right) \psi(\mathbf{r}, t)$$

ハミルトニアン H : エネルギー演算子

ここで $V(\mathbf{r}, t)$ は系のポテンシャル・エネルギー

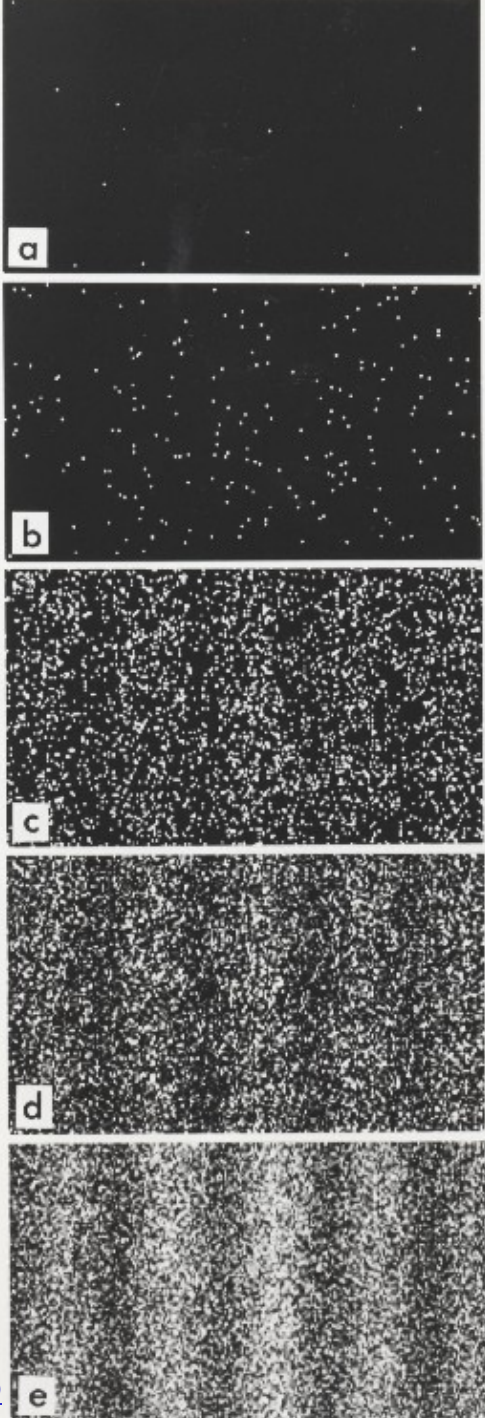
粒子の存在確率は、 $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ で表される

電子の粒子性と波動性を表す2重スリット実験



提供: 株式会社日立製作所研究開発グループ

電子源から電子を一個ずつ発射し、発射された電子は中央に細い糸状電極の両側(どちらか一方)を通過する。通過した電子は検出器で一個ずつ検出される。
→ 1個ずつ検出されている(粒子性)にもかかわらず、干渉縞が現れる(波動性)。



画像提供: 株式会社日立製作所中央研究所

閉じ込められた電子のエネルギーの量子化

時間に依存しないシュレディンガー方程式

$$\hat{H}\varphi(\mathbf{r}) = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) \varphi(\mathbf{r}) = \varepsilon \varphi(\mathbf{r})$$

時間に依存しない定常状態ではこれを用いる(固有値問題)。

井戸型ポテンシャル $V(x)$

$$V(x) = 0, \text{ for } 0 < x < L$$

$$V(x) = \infty, \text{ for } x < 0 \text{ and } L < x$$

$\nabla \rightarrow d/dx$ として一次元のシュレディンガー方程式を解くと、
固有エネルギーは離散的になる(量子化される)

$$\varepsilon_n = (\hbar/2m)^2 (n\pi/L)^2$$

対応する固有関数は定在波

$$\varphi_n = (2/L)^{1/2} \sin(n\pi x/L)$$

ただし、 $n = 1, 2, 3, \dots$

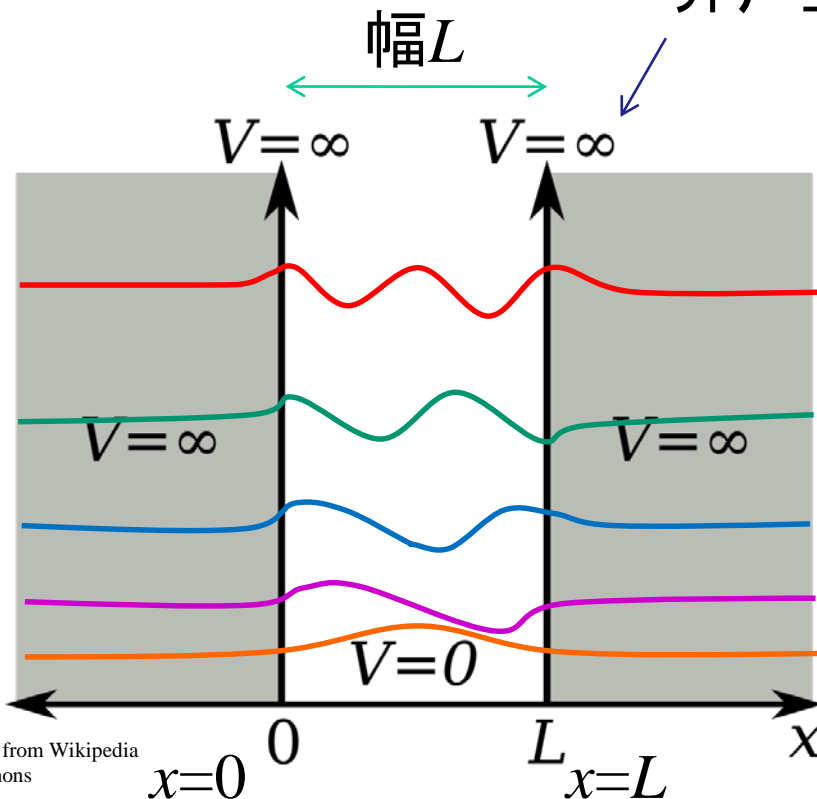


Image from Wikipedia Commons

水素原子

中心力ポテンシャルの場で
シュレディンガー方程式を解く
と、離散化したエネルギー準位
 E_n が求まる

$$E_n = - (1/n^2) Ry$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

Ry はリュードベリ定数

$$Ry = (4\pi\epsilon_0)^{-2} me^4 (2\hbar)^{-2}$$

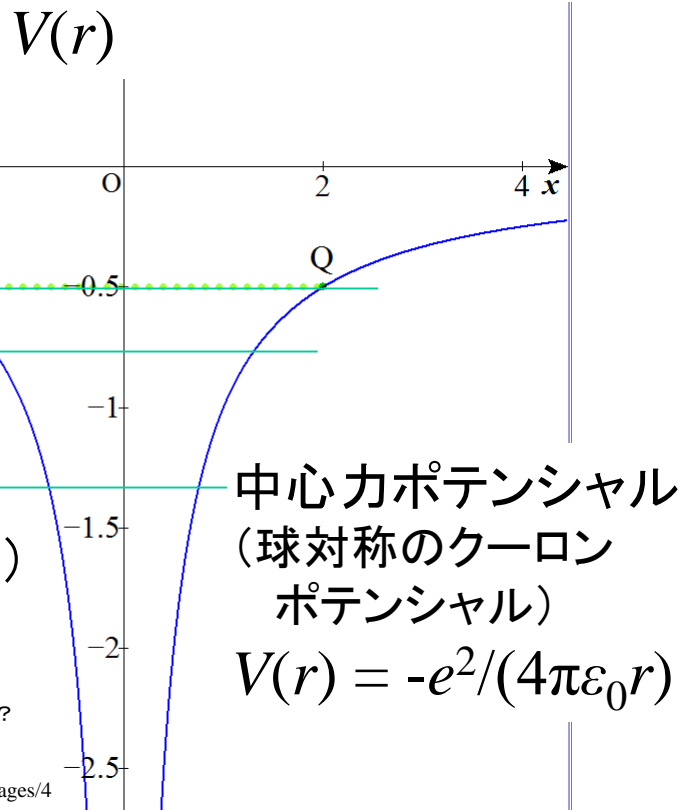
$$= 13.6 \text{ eV}$$

これが水素原子に捉えられた
電子の束縛エネルギーである。
波動関数の広がり、

$$\langle r_n \rangle = n^2 a_0$$

$$\text{ボーア半径 } a_0 = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 (me^2)^{-1}$$

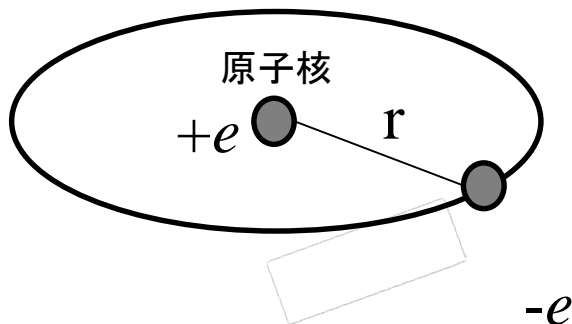
$$= 0.053 \text{ nm}$$



パラレルワールドはあるのだろうか？

図2. 電子の位置エネルギー $V(r)$
(原子単位)

<https://www49.atwiki.jp/shutaro47/pages/40.html> (ref. 20171129)に加筆



水素原子に束縛された電子のエネルギー準位

動径(中心からの距離)方向の運動 \Rightarrow 離散的エネルギー準位
 \rightarrow 主量子数 $n = 1, 2, 3 \dots$

中心の周りの回転運動 \Rightarrow 角運動量の量子化
 \rightarrow 角運動量量子数

$$l = 0, 1, 2, 3 \dots$$

($s, p, d, f \dots$ 軌道に対応)

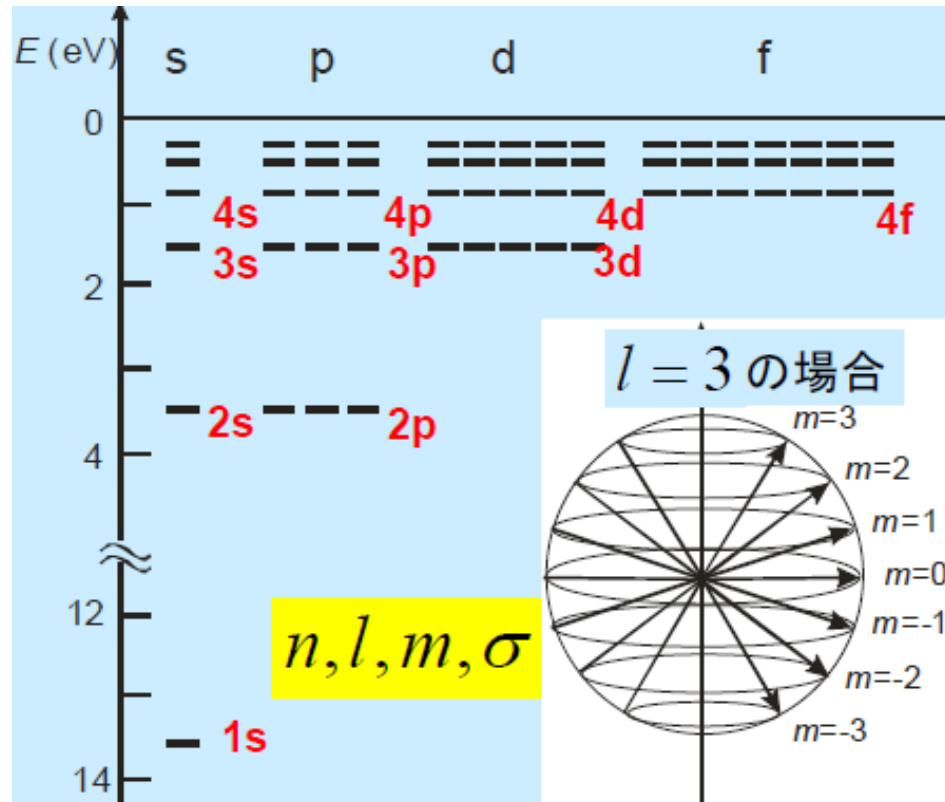
$$m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$$

($2l+1$ 個の値をとる)

電子はスピン(自転)の自由度を持つ(上向きか下向きかのみに)

\rightarrow スピン量子数 $\sigma = \pm 1$

(スピン角運動量は $\pm 1/2\hbar$)



水素原子に束縛された電子のエネルギー準位

中心力ポテンシャル(球対称)中でのシュレディンガー方程式の解

n 主量子数	l 方位量子数	m 磁気量子数	軌道の名称	縮退度 (水素)	縮退度 (一般)
1	0	0	1s	1	1
2	0	0	2s	4	1
	1	-1,0,1	2p		3
3	0	0	3s	9	1
	1	-1,0,1	3p		3
	2	-2,-1,0,1,2	3d		5
4	0	0	4s	16	1
	1	-1,0,1	4p		3
	2	-2,-1,0,1,2	4d		5
	3	-3,-2,-1,0,1,2,3	4f		7

それぞれに
スピン量子数
 $\sigma = \pm 1$
(up spin \uparrow ,
down spin \downarrow)
が加わる

一般の原子の電子エネルギー準位

電子はフェルミ粒子: 1つの状態に1個だけ占有できる

⇒ (n, l, m, σ) で指定されるエネルギー準位に1個ずつ収容される

たとえば、Siでは 原子番号 $Z=14$

$$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^2$$

最外殻電子は4個

右肩の小さい数字が電子の数

n の値で指定される殻(シェル)構造

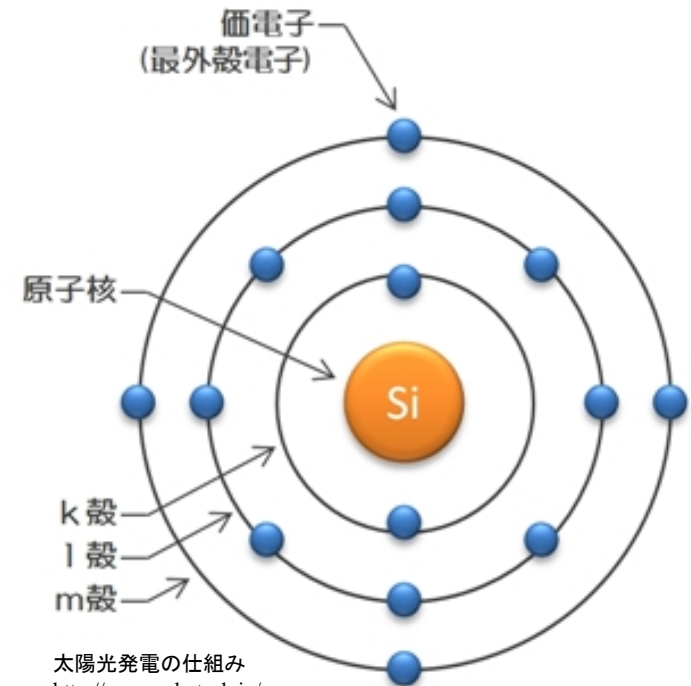
$$n=1 \quad \text{K殻} \quad 2 \times 1 = 2$$

$$n=2 \quad \text{L殻} \quad 2 \times (1+3) = 8$$

$$n=3 \quad \text{M殻} \quad 2 \times (1+3+5) = 18$$

...

1つの殻が完全に埋まるような電子の数2, 10, 18, ... はエネルギー的に安定 = 希ガス(不活性ガス)原子: He, Ne, Ar, Kr, Xe



太陽光発電の仕組み
<http://www.solartech.jp/seiconductor/silicon.html>
シリコン原子の構造

周期表

- 物性にとって**重要なのは最外殻の電子 = 価電子**
(原子から離れやすい)
- **最外殻の電子配置が似た原子は互いに似た化学的性質**
を示す = 元素周期律
- 表を覚えるよりも、周期律がなぜ成り立つかを理解することが重要 (覚えているに越したことはないが)
- 周期表を覚えるならば縦にも覚えよう

1 H	2 He																					18
3 Li	4 Be											13 B	14 C	15 N	16 O	17 F	18 Ne					
11 Na	12 Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar					
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr					
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe					
55 Cs	56 Ba	*1	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn					
87 Fr	88 Ra	*2	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Nh	114 Fl	115 Mc	116 Lv	117 Ts	118 Og					

*1 ランタノイド:

57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

*2 アクチノイド:

<https://ja.wikipedia.org/wiki/%E5%91%A8%E6%9C%9F%E8%A1%A8>
CC BY-SA 3.0

原子の電子エネルギー準位

原子番号 Z (=電子数)が大きい原子ほど原子核のクーロン引力は強くなるが、周りの電子数も多くなるので、かなりの程度相殺され、結局、最外殻の電子のエネルギー準位は数 eV 程度になる

→ 物性物理学のエネルギースケールは数 eV ~ meV 程度である

温度 T で決まる熱エネルギー $k_B T$

ここで、 $k_B = 1.38 \times 10^{-23}$ [J/K] はボルツマン定数

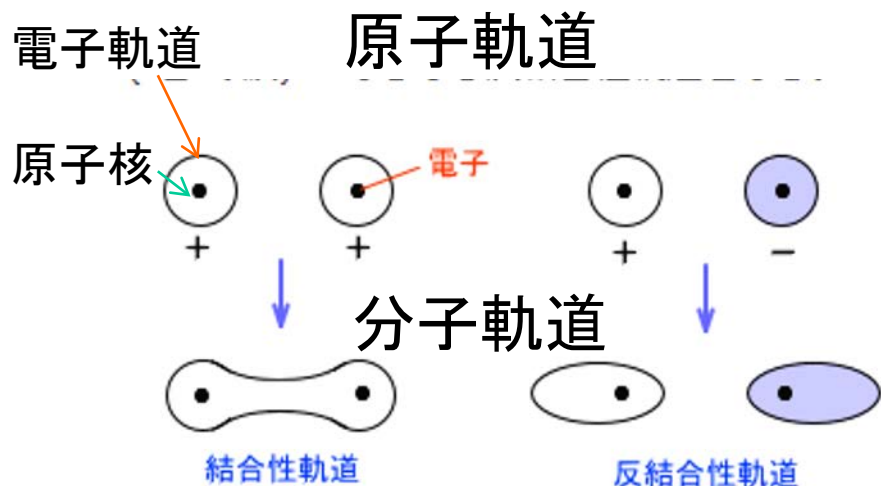
室温 ($T = 300$ K) では、 $k_B T = 26$ meV

化学や生物現象のエネルギーはこれくらいのオーダー

例)

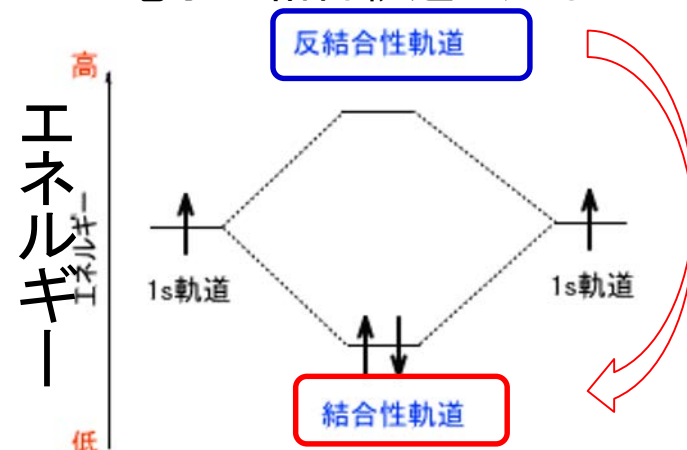
- 乾電池は 1.5V ← 電子のやりとりによる起電力
- レーザポインタ 赤色光 ~ 1.5 eV, 緑色光 ~ 2.5 eV
← 半導体中の電子のエネルギー帯構造 = 禁制帯幅で決まる

水素原子が2個近づいたらどうなるか — 分子軌道



役に立つ薬の情報～専門薬学
結合性軌道と反結合性軌道、HOMOとLUMO
結合性軌道と反結合性軌道
<https://kusuri-jouhou.com/chemistry/homo.html>
ref. 20171205

結合軌道の方がエネルギーが低く安定
→ 電子は結合軌道に入る

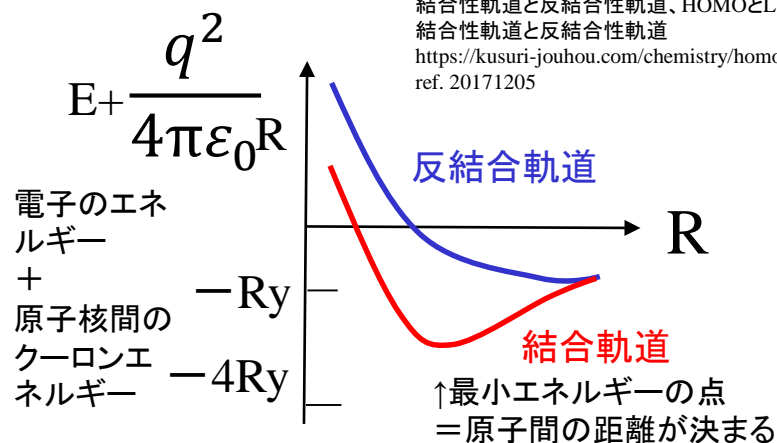
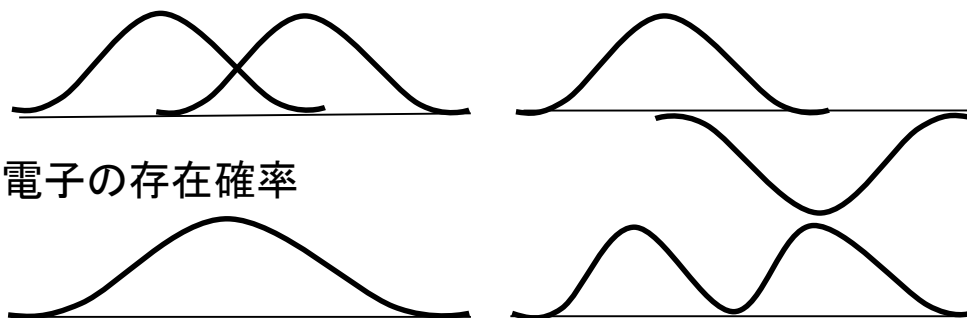


役に立つ薬の情報～専門薬学
結合性軌道と反結合性軌道、HOMOとLUMO
結合性軌道と反結合性軌道
<https://kusuri-jouhou.com/chemistry/homo.html>
ref. 20171205

2原子分子 シュレディンガー方程式の解

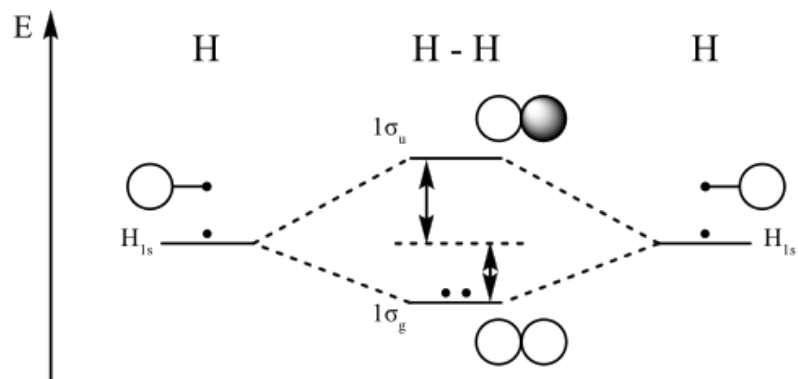
波動関数

電子の存在確率



分子ができる

H₂分子はH原子より安定だが、He₂分子はHe原子より不安定



水素

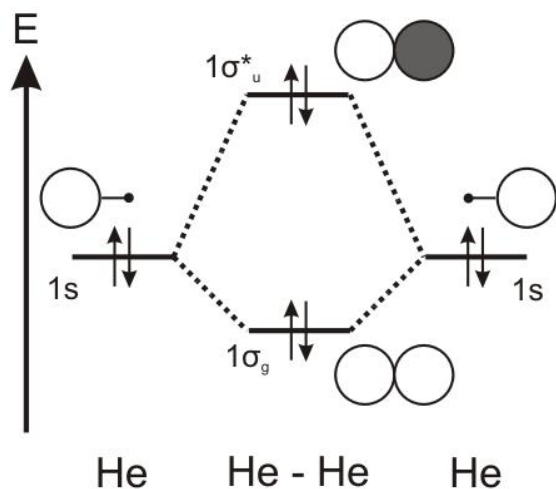
分子を形成した方がエネルギー小
H原子よりも H₂ 分子の方が安定

by CCoil from Wikimedia Commons ref. 20171205
<https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Dihydrogen-MO-Diagram.svg>
CC BY-SA 3.0

ヘリウム

分子を形成してもエネルギーは
小さくならない

He₂ 分子よりも He 原子の方が安定



by Yohan LOQUAIS from Wikimedia Commons ref. 20171205
https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Diagramme_He2.jpg
CC BY-SA 3.0

まとめ

■物質科学で扱う内容とその意義

- 還元主義と創発現象、理学と工学
- エネルギースケールの話
- 半導体の爆発的发展をはじめ、物質科学とその応用（工学）が世の中を変えてきた

■量子力学でわかる原子の構造、電子のエネルギー準位

- 粒子性と波動性
- シュレディンガー方程式
- 閉じ込めた系では離散的なエネルギー準位になる
- 水素原子のエネルギー準位
- 一般の原子、周期表はなぜできるか
- 分子軌道によりエネルギーが安定化→分子ができる