

## 物質の科学 —その起源から応用まで—

「†:このマークが付してある著作物は、第三者が有する著作物ですので、同著作物の再使用、同著作物の二次的著作物の創作等については、著作権者より直接使用許諾を得る必要があります。」

### 第6回～第9回 物質の性質

東京大学物性研究所  
家 泰弘



# 講義プラン

- 第1回 小柴昌俊先生 「物質はどのように創られたのか」  
第2～5回 佐藤勝彦先生  
「物質の生い立ち —素粒子、原子、宇宙—」
- 第6～9回 家 泰弘担当 「物質の性質」  
第6回 物性物理学とは何をする学問か  
第7回 量子力学と人工構造物質  
—ハイテクと先端物理  
第8回 原子を操る, 量子を操る  
—ナノサイエンスと量子情報  
第9回 多様な物質, 多様な物性
- 第10～13回 小宮山宏先生 「物質を作り使う」

## 第6回 物性物理学とは何をする学問か

第7回 量子力学と人工構造物質

— ハイテクと先端物理

第8回 原子を操る, 量子を操る

— ナノサイエンスと量子情報

第9回 多様な物質, 多様な物性

東京大学物性研究所

家 泰弘



# 今日のお話

スケールの話

現代文明と物理学

物理学の中の物性物理学

量子力学と原子構造

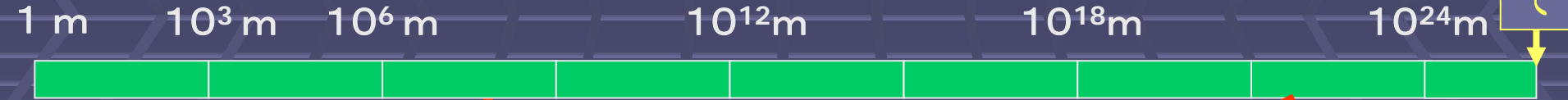
物質の存在形態

原子の凝集機構と結晶構造

.....

# スケールの大きな話

宇宙の果て

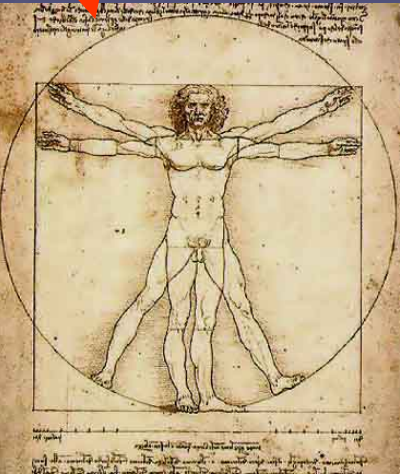


1 km

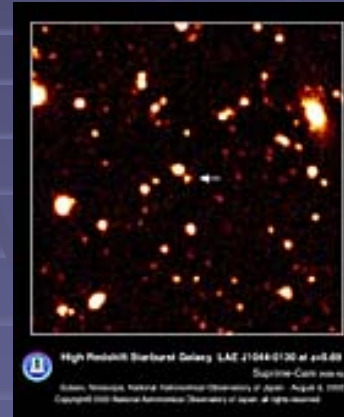
1000 km

1天文単位

1光年



12800 km



出典: <http://www.solarviews.com/eng/homepage.htm>

# スケールの小さな話

$10^{-12}$  m

$10^{-9}$  m

$10^{-6}$  m

$10^{-3}$  m

1 m



1 pm

ピコメートル

1 nm

ナノメートル

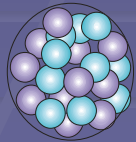
1  $\mu$ m

マイクロメートル  
(ミクロン)

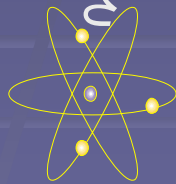
1 mm

ミリメートル

原子核の大きさ



原子の大きさ



ウイルス

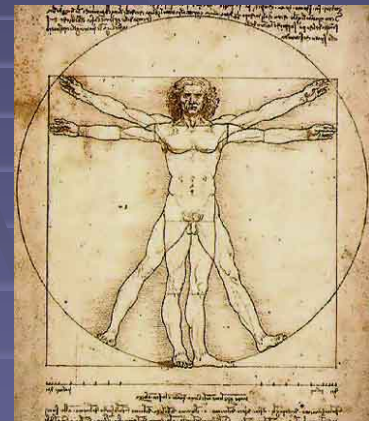


可視光の波長

細菌



針の穴・髪の毛



$10^{-35}$  m

プランクスケール

$10^{-32}$  m

大統一スケール

$10^{-21}$  m

$10^{-18}$  m  
電弱統一スケール

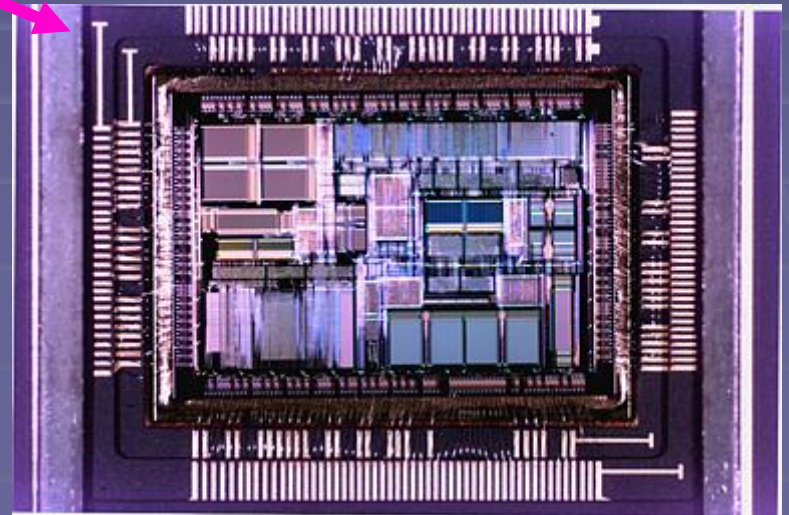
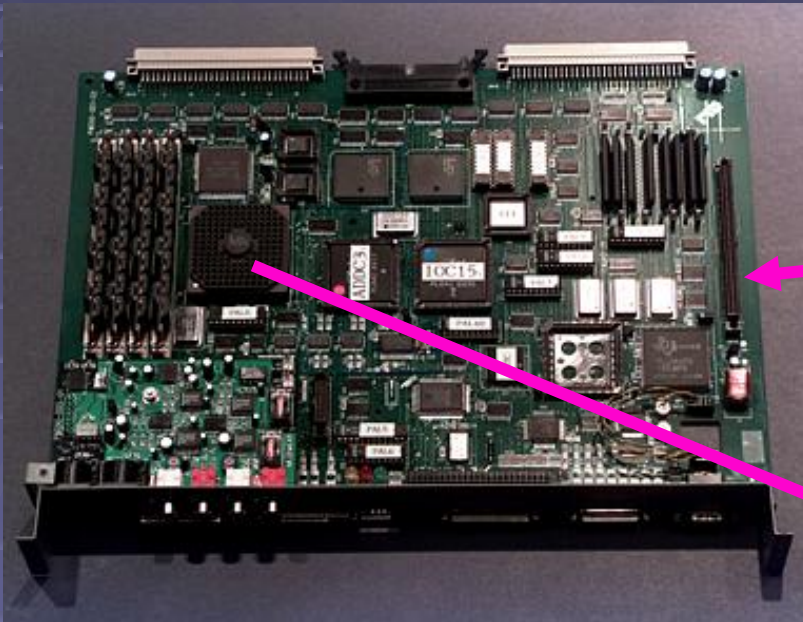


# 現代文明と物理学



# コンピューター

パーソナルコンピューター



半導体の中の電子  
のふるまい  
量子力学に基づく  
物性物理学



# 記憶装置

磁気ハードディスク



CD-ROM/DVD



半導体メモリー  
フラッシュメモリー  
強誘電体メモリー

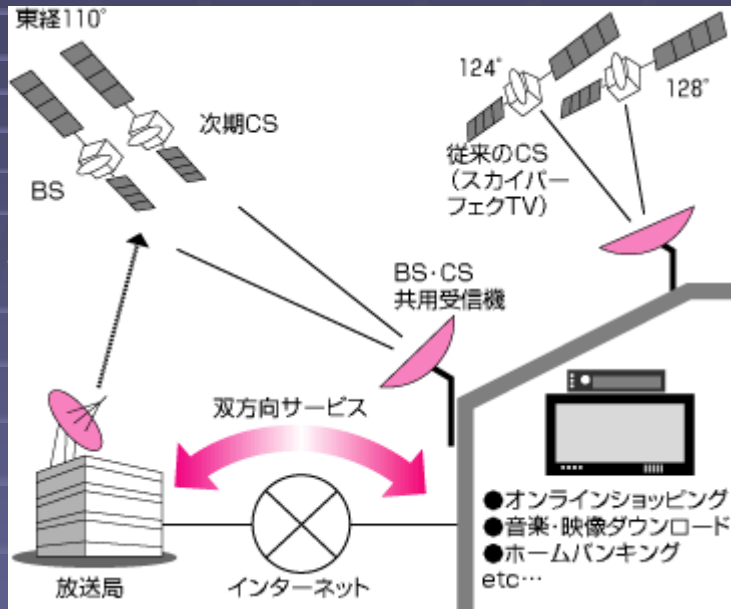
デジタル情報を磁性体の  
磁化の向きとして記録

ディスクの記録面につけた凹凸  
によるレーザーの反射の違い

# 無線(高周波), 光通信



携帯電話



衛星通信  
衛星放送



光ファイバー



発光ダイオード  
半導体レーザー

高移動度トランジスタ  
HEMT

# ナビ GPS (Global Positioning System)

24台の静止衛星を配置.

「三角測量」により位置を割り出す.

正確な計時が重要. 衛星には原子時計が搭載されている.

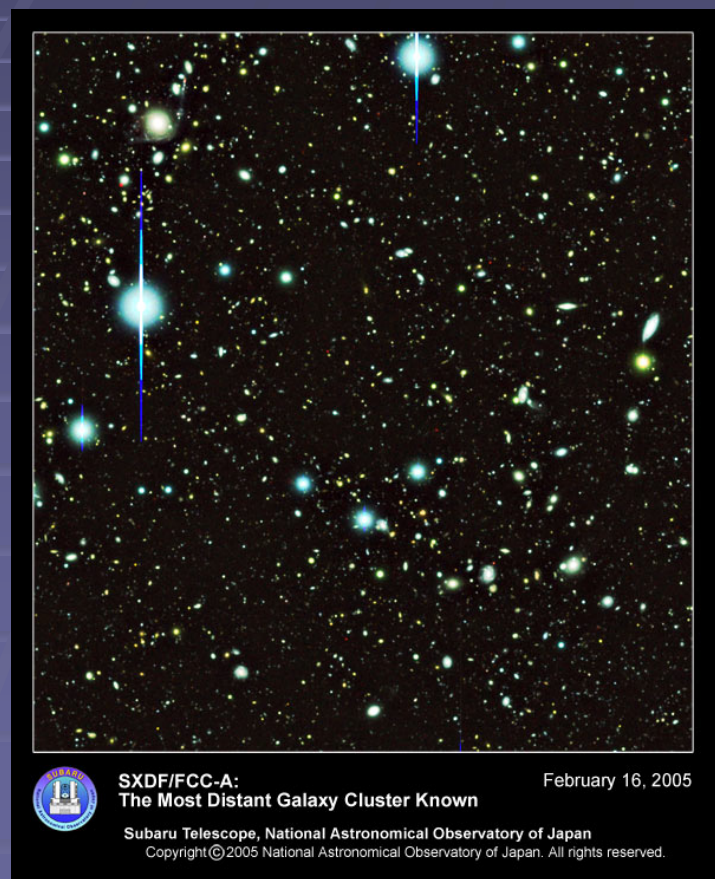
著作権処理の都合で、この場所に挿入されていた図を省略させていただきます

GPSが機能するためには特殊相対論および一般相対論の補正が必須

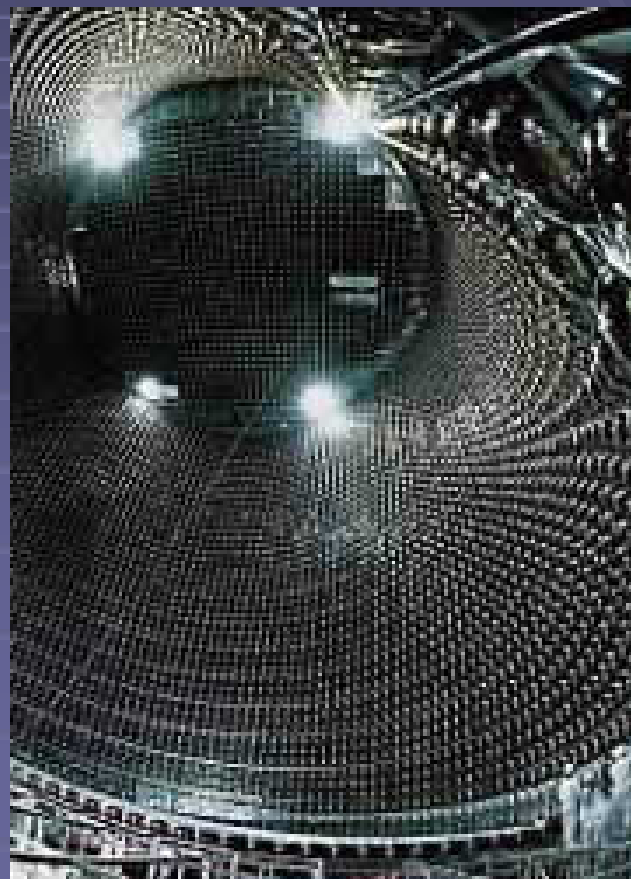


# 素粒子・宇宙研究にも

すばる望遠鏡  
CCDカメラ



スーパーカミオカンデ  
光電子増倍管





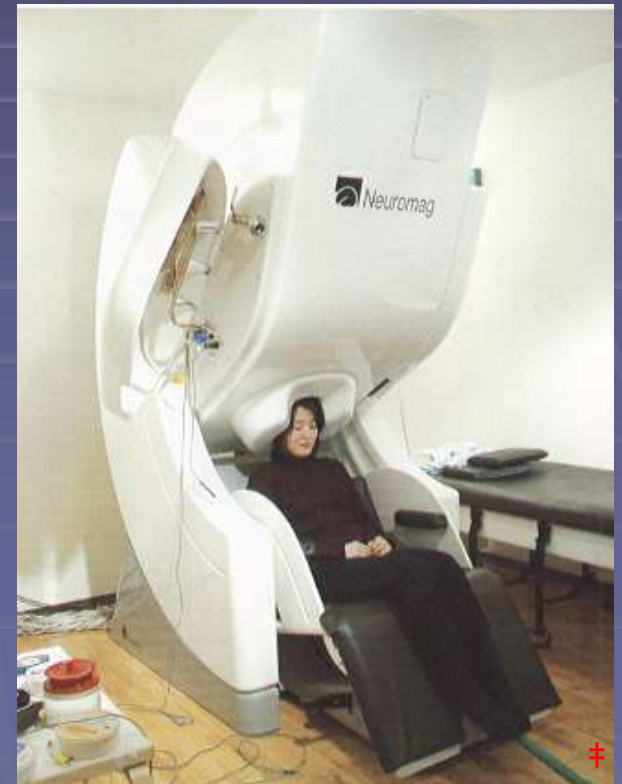
# 先端医療にも

## MRI（磁気共鳴画像診断装置）



著作権処理の都合で、  
この場所に挿入されて  
いた図を省略させてい  
たきます

## MEG（脳磁図）装置 SQUID（超伝導干渉素子）を用い た微弱磁気信号の検出



# 身近なところにも

- 液晶（ディスプレイ）
- 高強度繊維（テニスラケット）
- ゲル（紙おむつ）
- 燃料電池
- 太陽光発電
- 光触媒
- . . . . .



# 物理学の中の物性物理学

# Matter と Material

物質 **matter** 時空(space-time)に対する物質  
**material** 物質科学の対象としての物質

物性物理学 Solid State Physics (固体物理学)  
Condensed Matter Physics  
(凝縮系物理学)

物質科学 Materials Science  
物質科学  
材料工学

# 物性物理学の意義

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

物質を理解し、利用する. 有用な機能の開拓と制御

⇒ 応用物理学

Curiosity-Driven Research (学術研究)

Mission-Oriented Research (目的志向研究)

# 物性物理学の意義

物性物理学と素粒子・原子核物理学との間の  
概念のキャッチボール

相転移： 自発的対称性の破れ

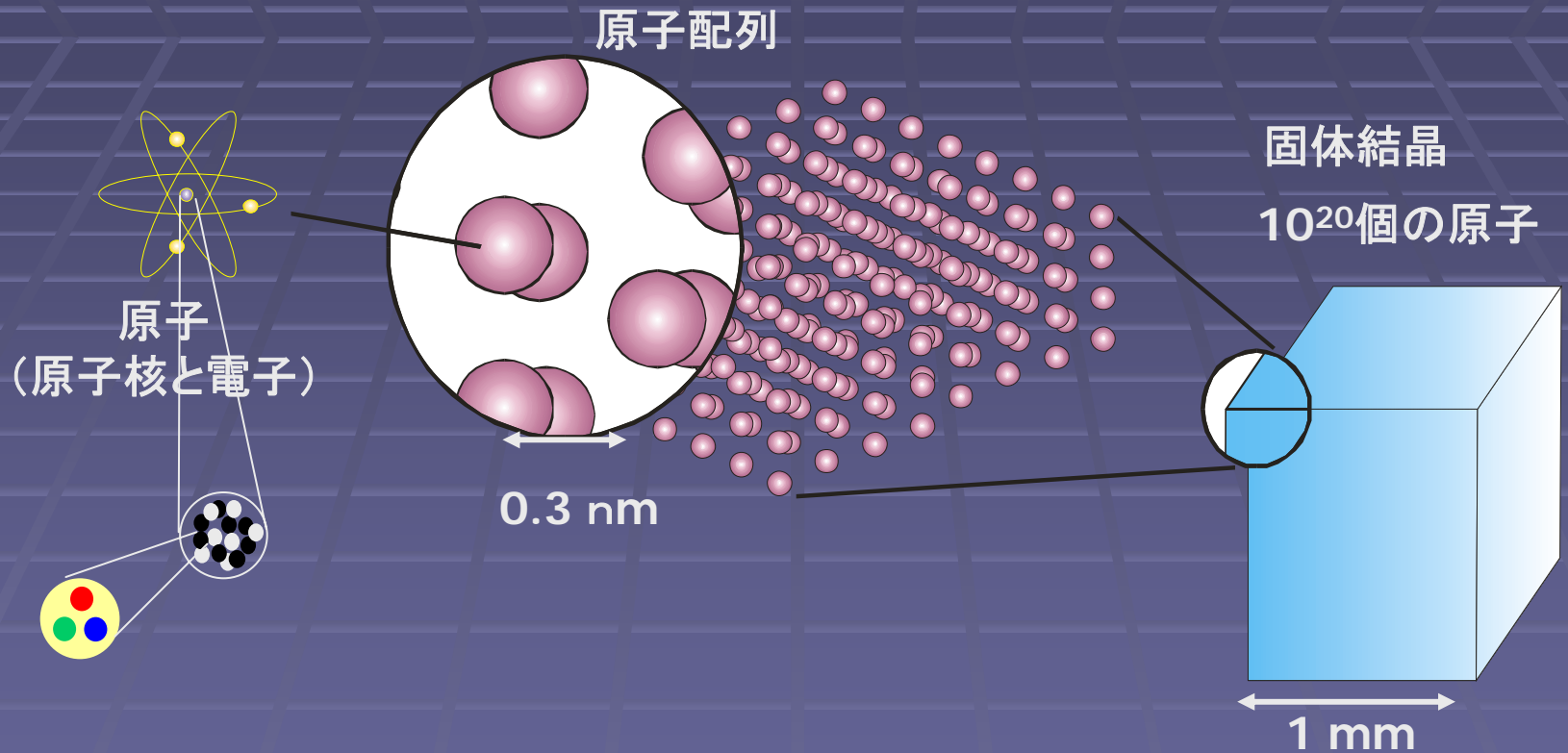
南部・ゴールドストーンモード

漸近的自由性

トポロジカル励起, 量子位相

.....

# 物質世界の階層構造



微視的スケール  
(ミクロスコピック)

巨視的スケール  
(マクロスコピック)

エネルギースケール大

エネルギースケール小

# 物性物理学

- 多様な物質の多様な性質(物性)を物理学の基本原則に基づいて理解する
- 特徴
  - 実験ができる (⇔宇宙物理学, 地球惑星物理学)
  - スモールサイエンス (⇔ビッグサイエンス)
  - 化学, 応用物理学, ……., 生命科学?
- 「理解」したかどうか
  - 実験と理論の比較
  - 予想と実証 キャッチボール
- 有用な物性 ⇒ 応用
- 「物質観」の構築



# 物理学的世界像

## 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.

基本的構成要素と力 ⇒ 究極の理論

## 創発的性質 (emergent properties)

多体系のふるまい: 相転移

例: 超伝導, 生命現象

More is different.

(P.W.Anderson)

# 物性物理学の対象

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, 液体, 準結晶

微粒子, クラスタ

表面, 界面

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)

# 物質の性質

- **構造的性質**（結晶構造, 乱れ, ...）
  - 固体, 液体, ガラス,
- **力学的性質**（圧縮率, 弾性率, 塑性, ...）
  - ダイヤモンドや鋼鉄は硬く, 金は柔らかい, ガラスは硬いが脆い
- **熱的性質**（融点, 沸点, 比熱, 熱伝導率, ...）
  - 銅は熱伝導が良く, ステンレス鋼は悪い

# 物質の性質

- **電気的性質**（電気伝導度，誘電率，超伝導・・・）
  - 金属，絶縁体，半導体
  - 強誘電体
  - 超伝導体
- **磁气的性質**（磁化率，磁化，・・・）
  - 強磁性体：鉄はどうして磁石になる？
- **光学的性質**（光学スペクトル，透過率，反射率）
  - 宝石の色，金属光沢，
  - 発光（発光ダイオード，半導体レーザー）

# 物質と物理環境

物質が置かれる環境, 外場, 摂動

- 温度
- 圧力, 応力
- 電場
- 磁場
- 光(電磁波)との相互作用
- 試料サイズ

# 量子力学と原子構造



# 物性物理学の登場人物

登場人物（「素」粒子）

電子

原子核（陽子＋中性子）

$$e = 1.60 \times 10^{-19} \text{ C}$$

$$m_e = 0.91 \times 10^{-30} \text{ kg}$$

原子，分子

イオン

$$m_p \approx m_n \approx 1840 m_e$$

「素」粒子の間に働く力： 電磁相互作用

光（電磁波）

光子  $h\nu$

$$h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

# エネルギースケール

運動エネルギー

エネルギーの単位: ジュール

$$J = \text{kg m}^2/\text{s}^2$$

$$\frac{1}{2}mv^2$$

電子ボルト

$$e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$$
$$1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$$

プランク定数は

$$h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$
$$= 4.13 \times 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s}$$

1 eVのエネルギーを持つ光子の振動数, 波数, 波長

$$h\nu = 1 \text{ eV} \quad \leftrightarrow \quad \nu = 2.42 \times 10^{14} \text{ Hz}$$

$$\leftrightarrow \quad \frac{\nu}{c} = 8070 \text{ cm}^{-1} \quad \leftrightarrow \quad \lambda = 1240 \text{ nm}$$



# 量子力学

波動関数

$$\psi(x, y, z)$$

粒子の存在確率

$$|\psi(x, y, z)|^2$$

シュレーディンガー方程式

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

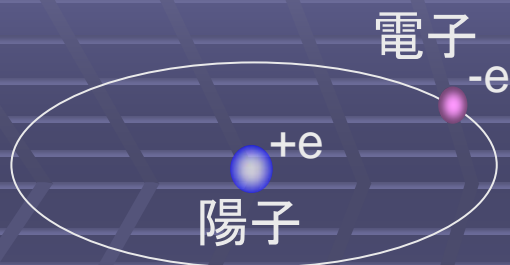
$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.05 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

エネルギー準位

$$E$$

# 水素原子



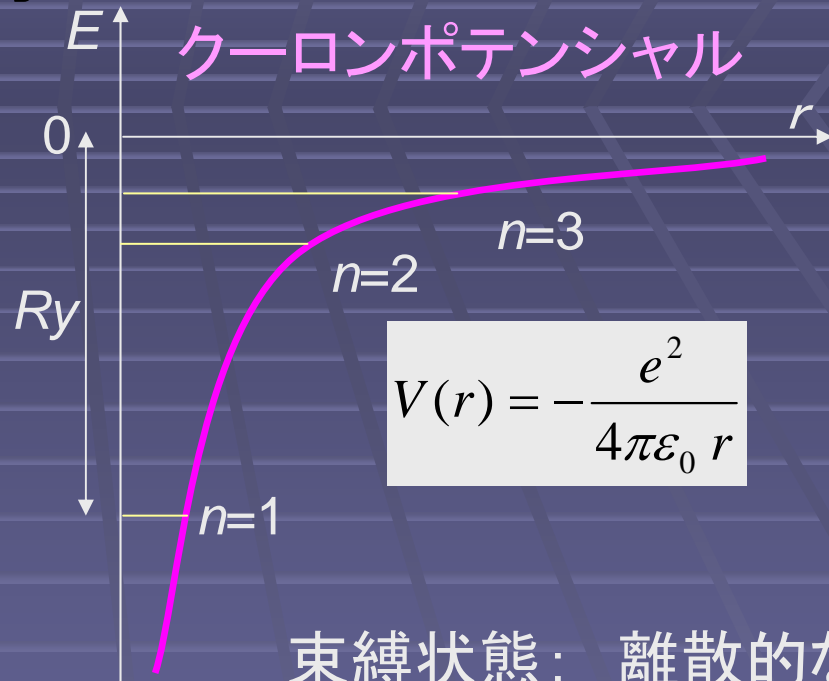
$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \psi(r) = E \psi(r)$$

ボーア半径

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = 0.053 \text{ nm}$$

リュードベリ定数

$$Ry = \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13.6 \text{ eV}$$



クーロンポテンシャル

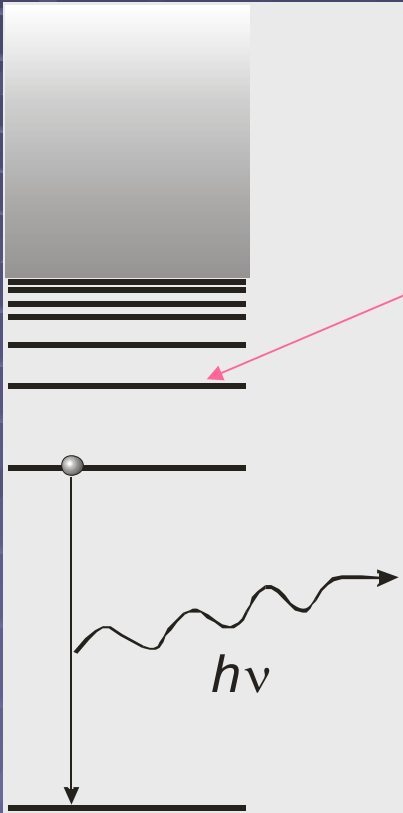
$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

束縛状態： 離散的な  
エネルギー準位

$$E_n = -\frac{1}{n^2} Ry$$

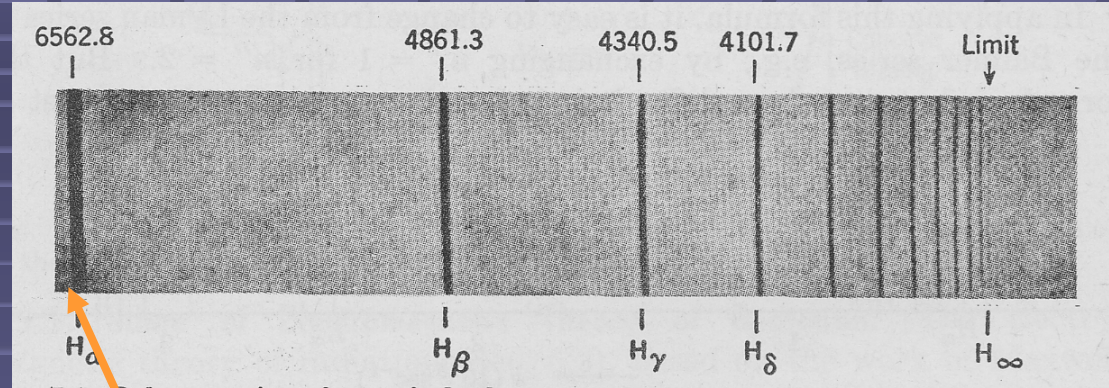
$$\langle r \rangle_n = n^2 a_0$$

# 水素原子のスペクトル



$$E_n = -\frac{Ry}{n^2}$$

$$\begin{aligned} h\nu &= E_n - E_m \\ &= Ry \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \end{aligned}$$



バルマー系列( $m=2$ )

$$\begin{aligned} E_n - E_m &= Ry \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) \\ &= \frac{5}{36} Ry = 1.89 \text{ eV} \end{aligned}$$

$$\nu = 4.55 \times 10^{14} \text{ Hz}$$

$$\lambda = 659 \text{ nm}$$

# 水素原子のエネルギー準位

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \psi(x, y, z) = \varepsilon \psi(x, y, z)$$

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$$

$$Y_l^m(\theta, \phi) \propto P_l^{|m|}(\cos \theta) \exp(im\phi)$$

角運動量子数

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

$$m = -l, \dots, l-1, l \quad (2l+1)$$

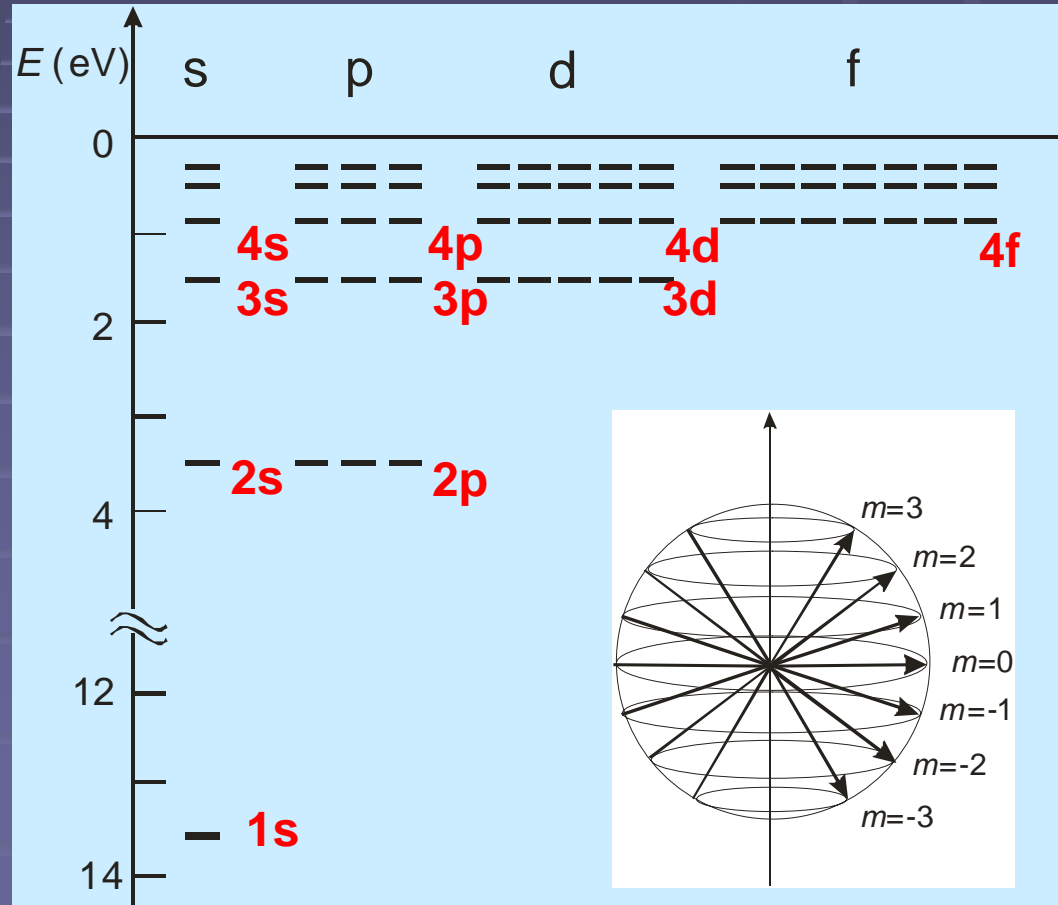
主量子数  $n = l, l+1, \dots$

スピン量子数  $\sigma = \pm 1$

$$n, l, m, \sigma$$

球対称ポテンシャル

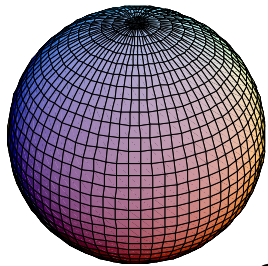
$$\nabla^2 \equiv \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$



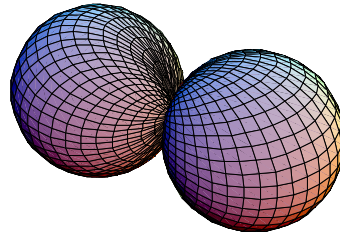


# 原子波動関数の角度部分

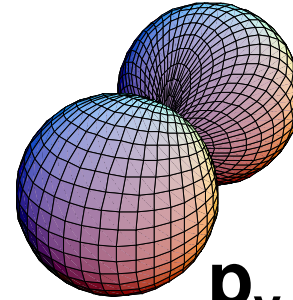
$$Y_l^m(\theta, \phi) \propto P_l^{|m|}(\cos \theta) \exp(im\phi)$$



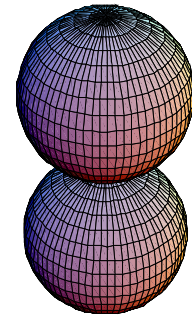
**s**



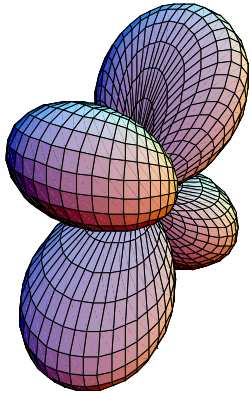
**p<sub>x</sub>**



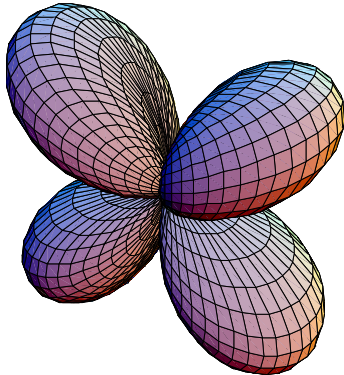
**p<sub>y</sub>**



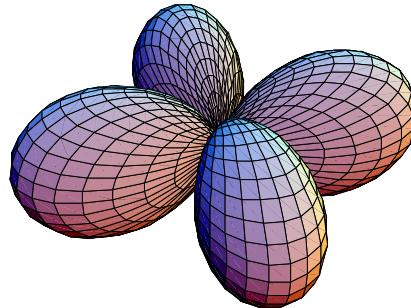
**p<sub>z</sub>**



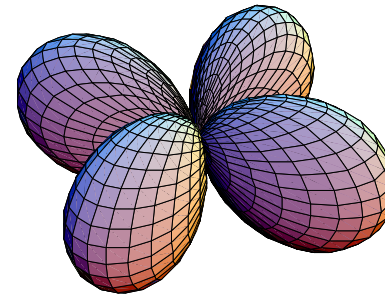
**d<sub>yz</sub>**



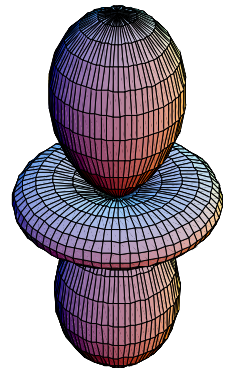
**d<sub>zx</sub>**



**d<sub>xy</sub>**



**d<sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub>**

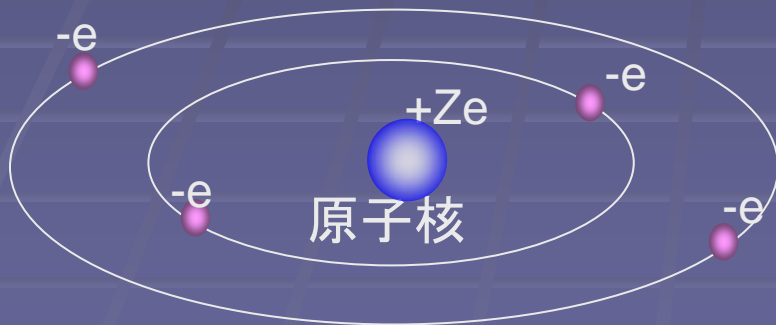


**d<sub>3z<sup>2</sup>-r<sup>2</sup></sub>**

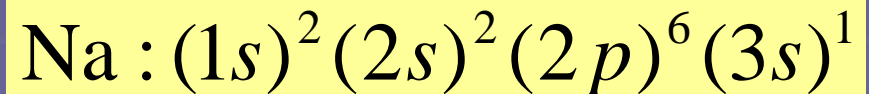
# 原子の電子エネルギー準位

多電子原子:  $+Ze$ の電荷をもつ原子核と $Z$ 個の電子

電子はフェルミ粒子  $\Rightarrow (n, l, m, \sigma)$ で指定される  
エネルギー準位に1個ずつ収容される



Na:  $Z=11$





# 原子の電子エネルギー準位

電子はフェルミ粒子  $\Rightarrow (n, l, m, \sigma)$  で指定されるエネルギー準位に1個ずつ収容される

$n$  の値で指定される殻(シェル)構造

$$n=1 \quad 2 \times 1 \quad = 2$$

$$n=2 \quad 2 \times (1+3) \quad = 8$$

$$n=3 \quad 2 \times (1+3+5) \quad = 18$$

1つの殻が完全に埋まるような原子の数 2,10,18,36...  
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

# 原子の電子エネルギー準位

物性にとって重要なのは最外殻の電子（原子から離れやすい）⇒ **価電子**

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**

# 元素の周期律表

## 元素の周期表

	1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8	1B	2B	3B	4B	5B	6B	7B	0		
1	<sup>1</sup> H															<sup>2</sup> He		
2	<sup>3</sup> Li	<sup>4</sup> Be									<sup>5</sup> B	<sup>6</sup> C	<sup>7</sup> N	<sup>8</sup> O	<sup>9</sup> F	<sup>10</sup> Ne		
3	<sup>11</sup> Na	<sup>12</sup> Mg									<sup>13</sup> Al	<sup>14</sup> Si	<sup>15</sup> P	<sup>16</sup> S	<sup>17</sup> Cl	<sup>18</sup> Ar		
4	<sup>19</sup> K	<sup>20</sup> Ca	<sup>21</sup> Sc	<sup>22</sup> Ti	<sup>23</sup> V	<sup>24</sup> Cr	<sup>25</sup> Mn	<sup>26</sup> Fe	<sup>27</sup> Co	<sup>28</sup> Ni	<sup>29</sup> Cu	<sup>30</sup> Zn	<sup>31</sup> Ga	<sup>32</sup> Ge	<sup>33</sup> As	<sup>34</sup> Se	<sup>35</sup> Br	<sup>36</sup> Kr
5	<sup>37</sup> Rb	<sup>38</sup> Sr	<sup>39</sup> Y	<sup>40</sup> Zr	<sup>41</sup> Nb	<sup>42</sup> Mo	<sup>43</sup> Tc	<sup>44</sup> Ru	<sup>45</sup> Rh	<sup>46</sup> Pd	<sup>47</sup> Ag	<sup>48</sup> Cd	<sup>49</sup> In	<sup>50</sup> Sn	<sup>51</sup> Sb	<sup>52</sup> Te	<sup>53</sup> I	<sup>54</sup> Xe
6	<sup>55</sup> Cs	<sup>56</sup> Ba	<b>L</b>	<sup>72</sup> Hf	<sup>73</sup> Ta	<sup>74</sup> W	<sup>75</sup> Re	<sup>76</sup> Os	<sup>77</sup> Ir	<sup>78</sup> Pt	<sup>79</sup> Au	<sup>80</sup> Hg	<sup>81</sup> Tl	<sup>82</sup> Pb	<sup>83</sup> Bi	<sup>84</sup> Po	<sup>85</sup> At	<sup>86</sup> Rn
7	<sup>87</sup> Fr	<sup>88</sup> Ra	<b>A</b>															
	<b>L</b>	<sup>57</sup> La	<sup>58</sup> Ce	<sup>59</sup> Pr	<sup>60</sup> Nd	<sup>61</sup> Pm	<sup>62</sup> Sm	<sup>63</sup> Eu	<sup>64</sup> Gd	<sup>65</sup> Tb	<sup>66</sup> Dy	<sup>67</sup> Ho	<sup>68</sup> Er	<sup>69</sup> Tm	<sup>70</sup> Yb	<sup>71</sup> Lu		
	<b>A</b>	<sup>89</sup> Ac	<sup>90</sup> Th	<sup>91</sup> Pa	<sup>92</sup> U	<sup>93</sup> Np	<sup>94</sup> Pu	<sup>95</sup> Am	<sup>96</sup> Cm	<sup>97</sup> Bk	<sup>98</sup> Cf	<sup>99</sup> Es	<sup>100</sup> Fm	<sup>101</sup> Md	<sup>102</sup> No	<sup>103</sup> Lr		

- 典型金属元素
- 半金属元素
- 非金属元素
- 遷移金属元素
- 希ガス



# 原子の電子エネルギー準位

Z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

乾電池は1.5V

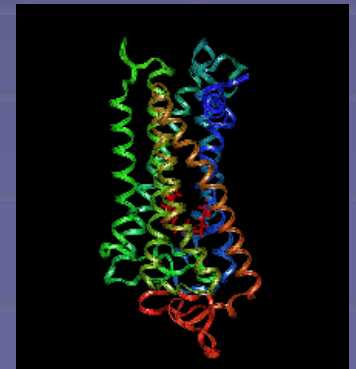
電子のやりとりによる起電力

レーザーポインター 乾電池2本 3V

赤色光  $\sim 1.5\text{eV}$ , 緑色光  $\sim 2.5\text{eV}$

ロドプシン: 網膜の受光タンパク質

可視光に相当するエネルギー準位差





# 物質の存在形態

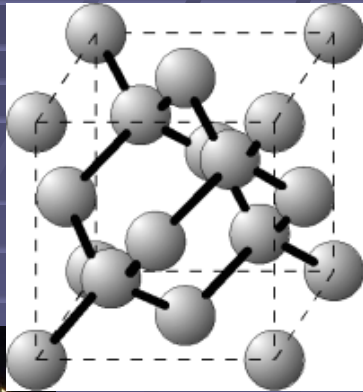
# 物質の種類

単元素だけでも100種類近く

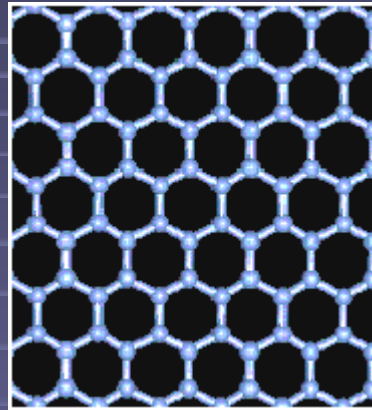
(炭素だけをとってもいろいろな存在形態がある)

# 炭素七変化

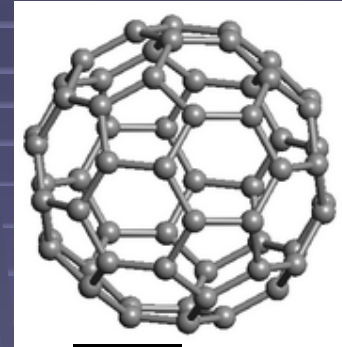
炭素原子だけからさまざまな物質



ダイヤモンド

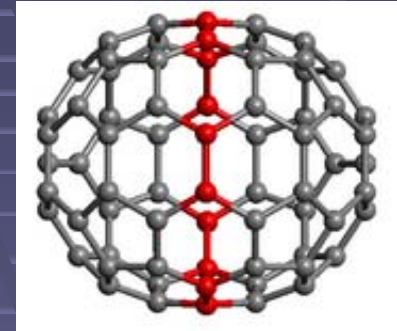


グラファイト

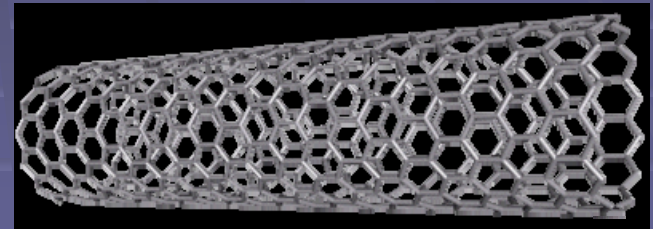


$C_{60}$

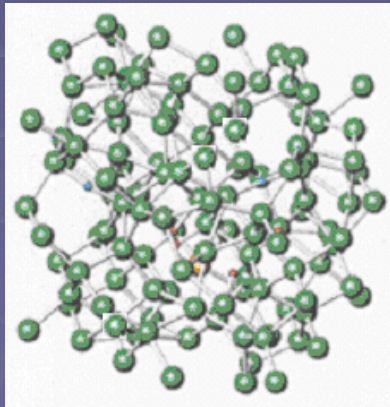
フラーレン



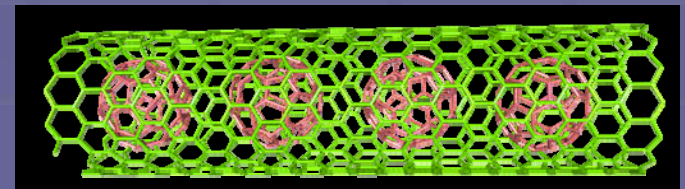
$C_{70}$



カーボン ナノチューブ



アモルファス カーボン



カーボン ピーポッド

# 物質の種類

単元素だけでも100種類近く

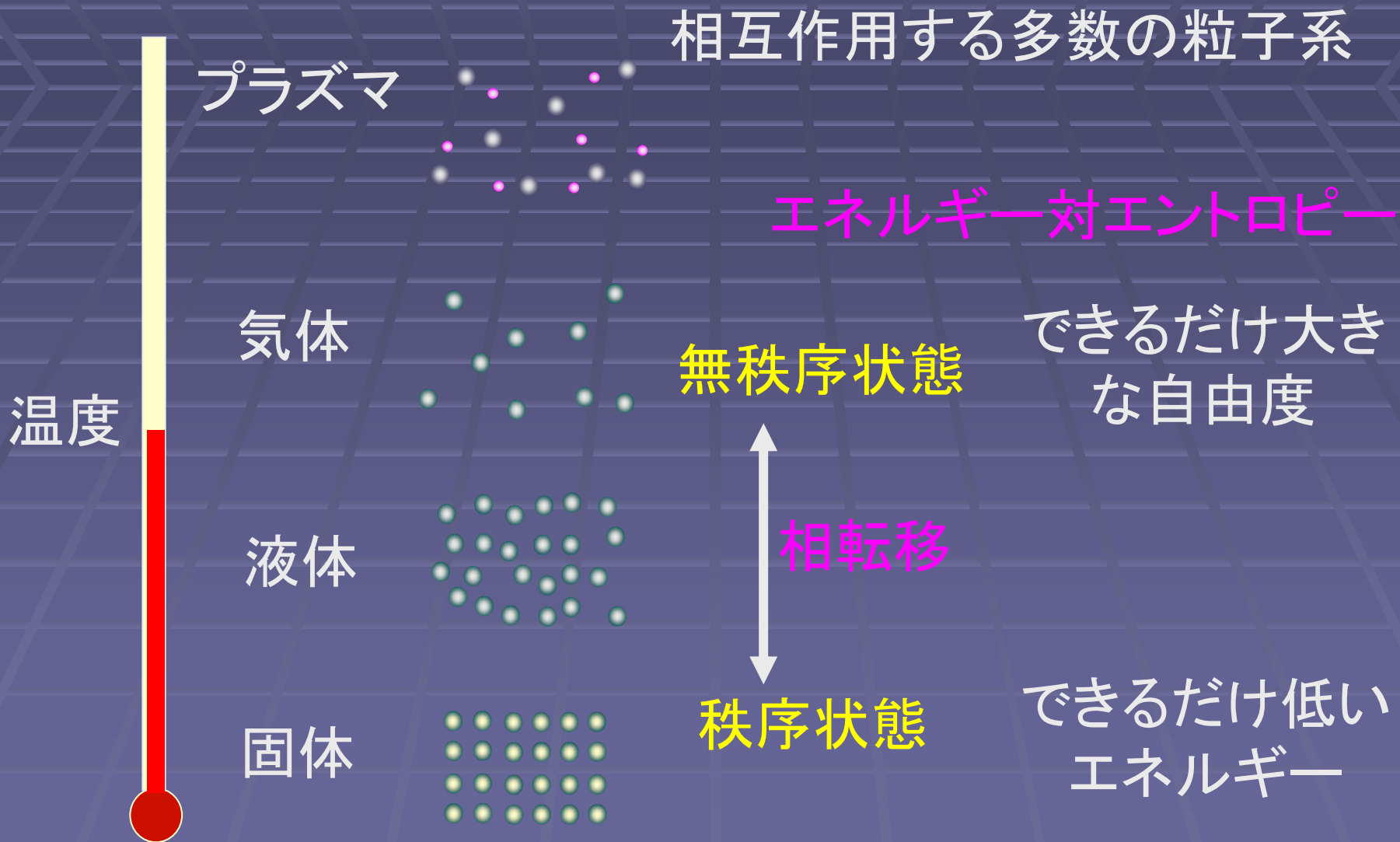
(炭素だけをとってもいろいろな存在形態がある)

化合物( $\text{NaCl}$ など)や合金( $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x$ )を考えればその組み合わせは多様

さらに, 3元化合物, 4元化合物, ...となれば可能性は無限 ⇒ 物質探索, 物質開発

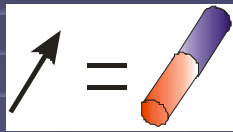
さらにあわよくば, 望みの物性をもつ物質を設計して創りたい ⇒ 物質設計 (計算物性科学)

# 物質の存在形態

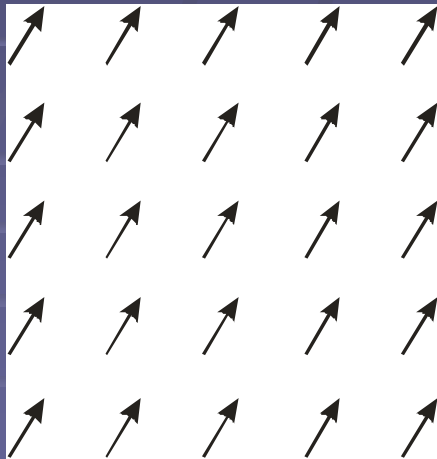


# 相転移

スピン：磁気モーメント  
(ミクロの磁石)



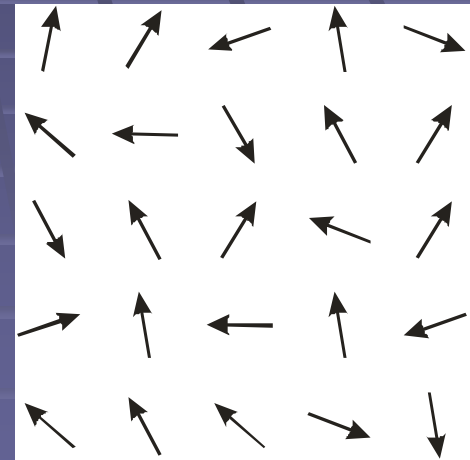
スピンは互いに  
平行あるいは反平行になろうとする



$T = 0$

絶対零度： 強磁性相  
秩序状態

高温ではスピンのランダムな向きを向こうとする



$T > T_c$

高温： 常磁性相  
無秩序状態

# エネルギーとエントロピー

絶対零度ではエネルギー最低の状態(基底状態)が実現

原子が規則正しく整列した結晶状態

磁気モーメントが整列した磁気秩序状態

有限温度 ( $T > 0$ ) では, エネルギー  $E$  と  
エントロピー  $S$  のバランスで状態が決まる

自由エネルギー ( $F = E - TS$ ) 最低の状態

$$F = E - TS$$

ある温度(臨界温度)において秩序状態から無秩序  
状態への相転移が起こる

固体  $\leftrightarrow$  液体

(反)強磁性相  $\leftrightarrow$  常磁性相



# 熱エネルギー

温度  $T$

$$k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$$

熱エネルギー  $k_B T$

ボルツマン定数

$$k_B T = 1 \text{ eV} \quad \leftrightarrow \quad T = 11600 \text{ K}$$

常温

$$T = 300 \text{ K} \quad \leftrightarrow \quad k_B T = 25 \text{ meV}$$

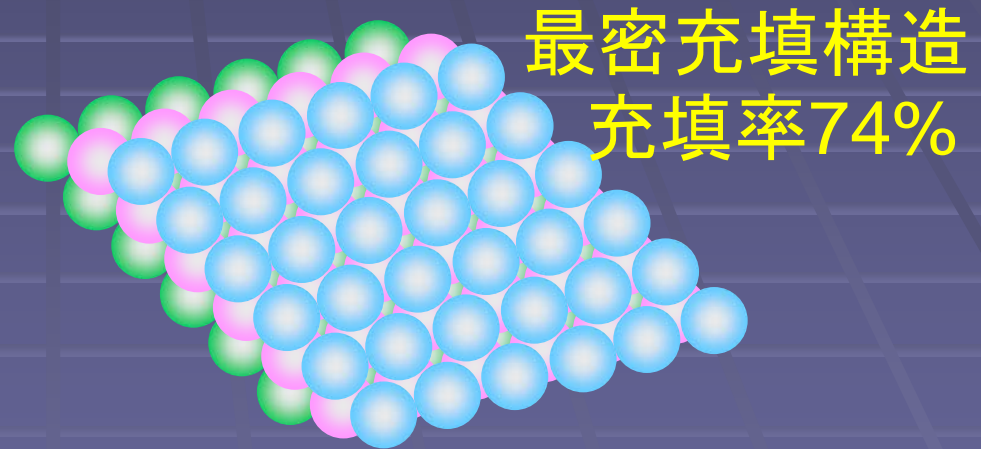
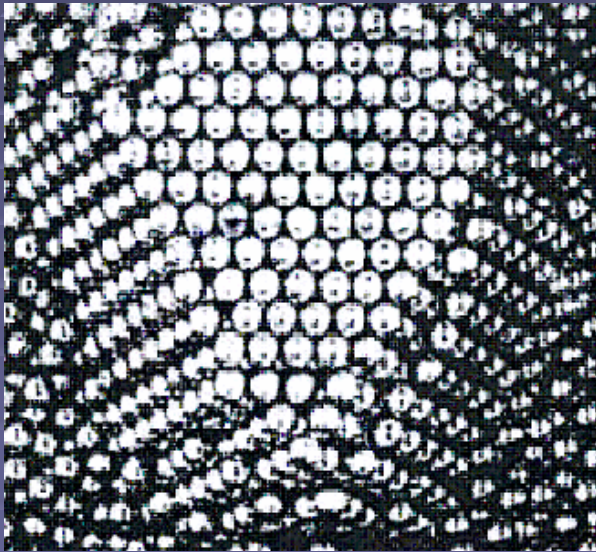
# 原子の凝集機構と結晶構造

# 結晶構造

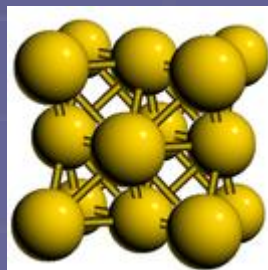
原子のどういう配列が最もエネルギーが低いか？

たくさんのパチンコ玉(剛体球)を箱に詰めると？

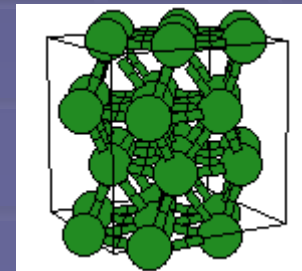
パッキング問題



面心立方格子  
fcc

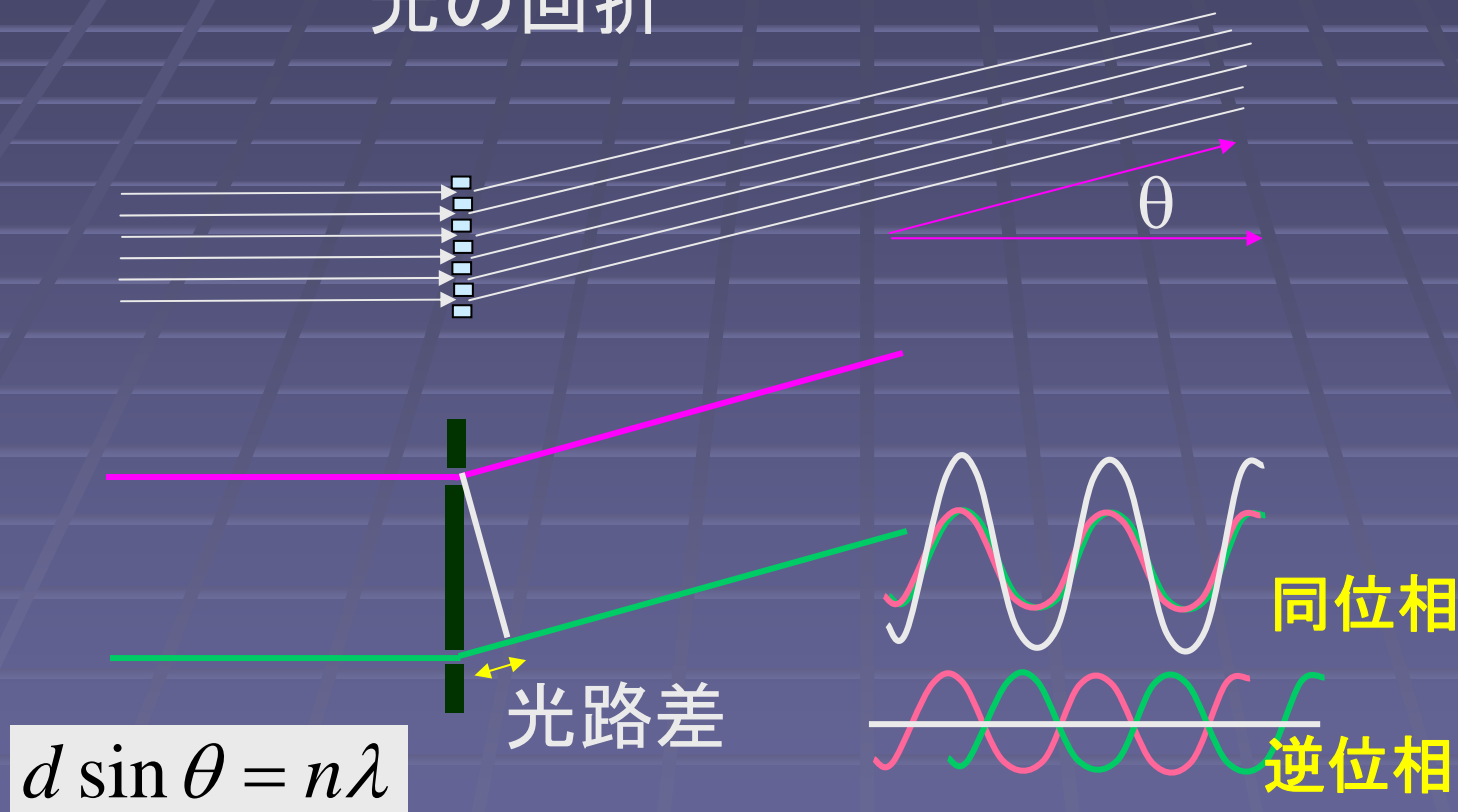


六方稠密格子  
hcp



# 原子の周期配列をどう調べる？

光の回折

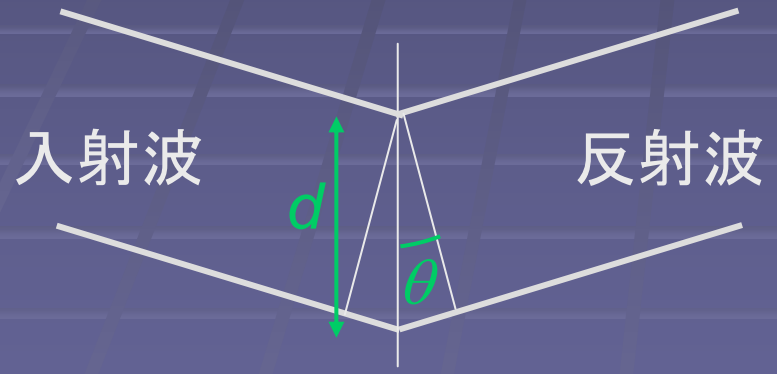
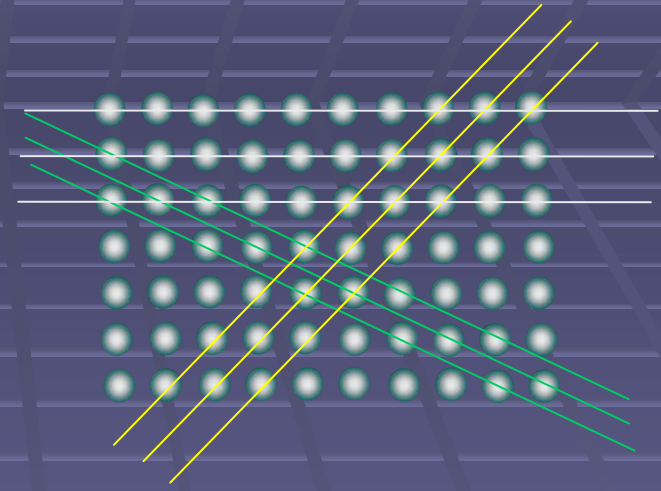
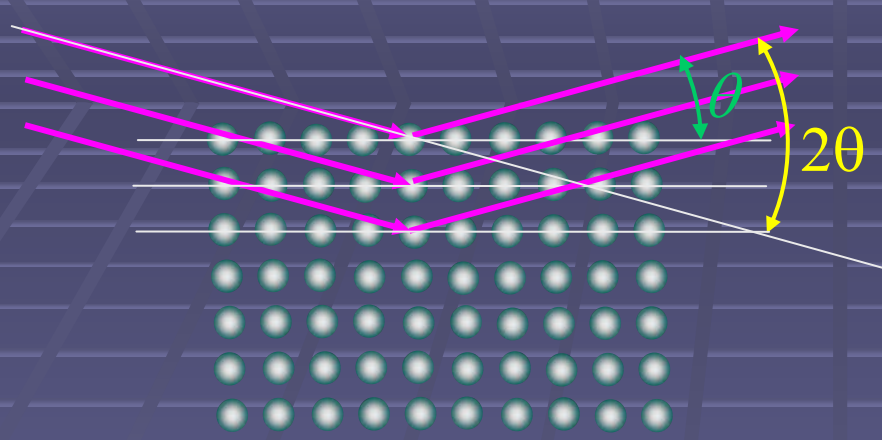


原子間隔  $\sim 0.3 \text{ nm} \Leftrightarrow \sim \text{X線の波長}$

電子線, 中性子線の回折も利用される.

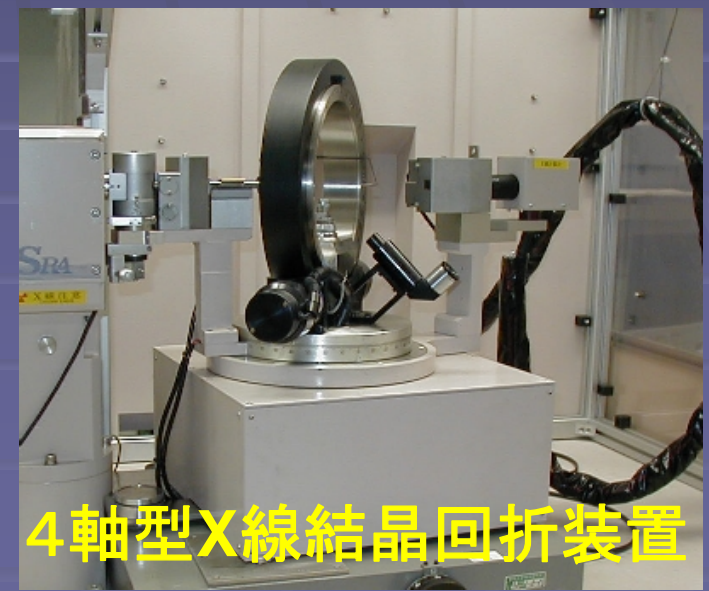


# 結晶構造解析



$$2d \sin \theta = n\lambda$$

ブラッグ条件



4軸型X線結晶回折装置

# 原子を結びつける力

原子間に働く引力によって凝集状態(固体, 液体)になる

原子間の相互作用

ファンデアワールス結合

イオン結合

共有結合

金属結合

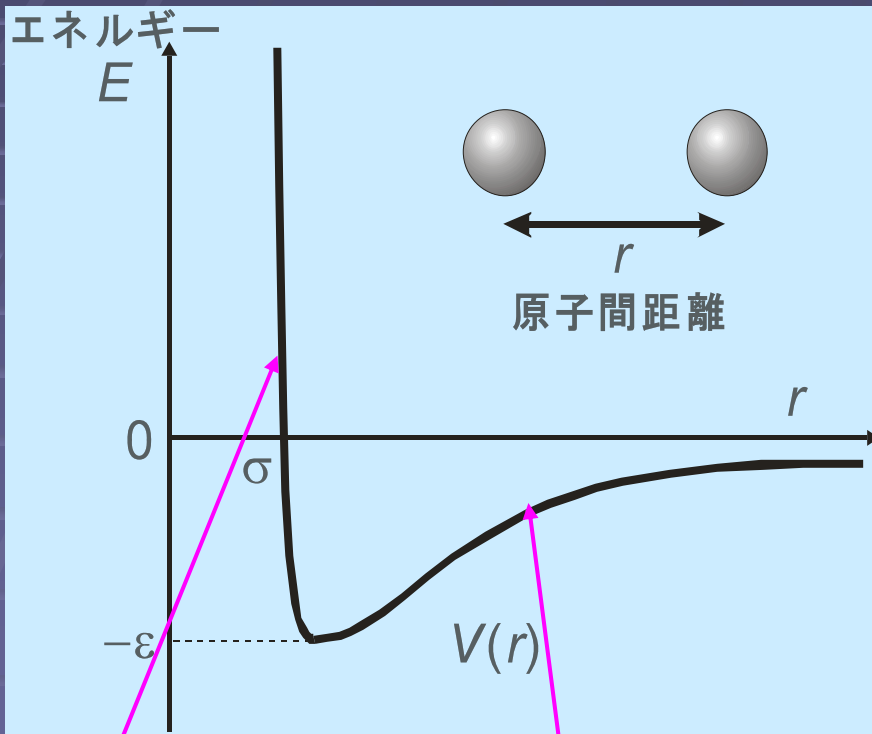
水素結合

結晶構造は原子間力の種類を反映する



# 希ガス結晶

## 原子間力ポテンシャル

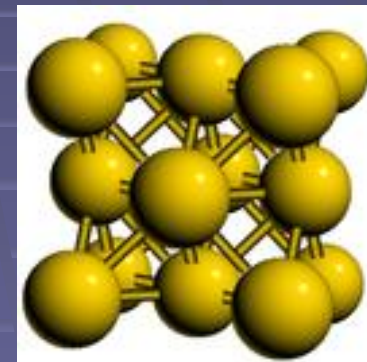


剛体芯斥力

ファンデアワールス引力

Ne, Ar, Kr, Xe

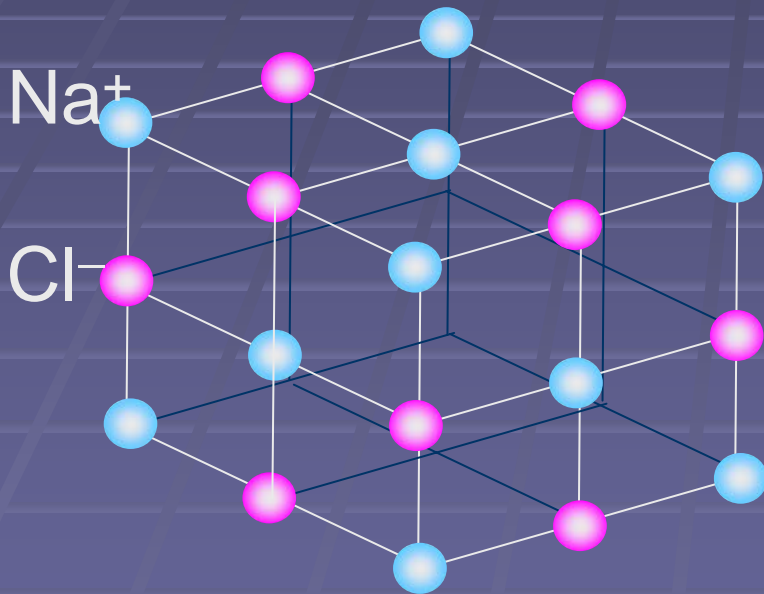
最密充填構造  
面心立方格子 (fcc)



Heは?  
量子液体

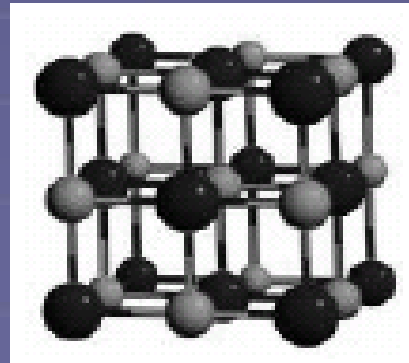
# イオン結合

陽イオンと陰イオンの間に働くクーロン引力

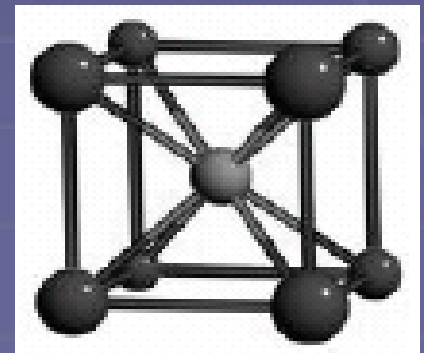


H							He
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr

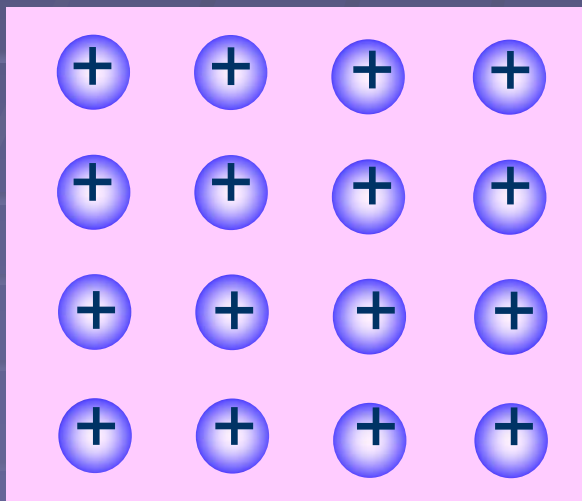
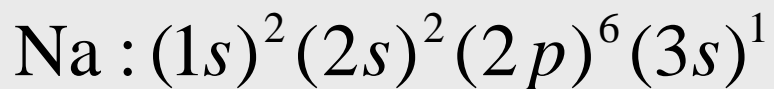
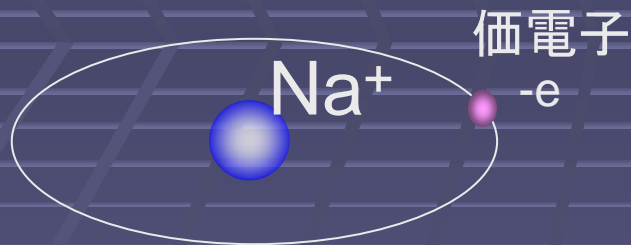
NaCl型



CsCl型



# 金属結合



H							He
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr

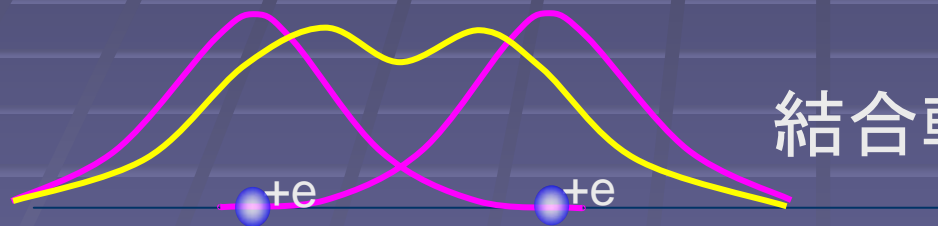
動き回る電子による負電荷の海に正電荷のイオンが埋め込まれている

# 共有結合

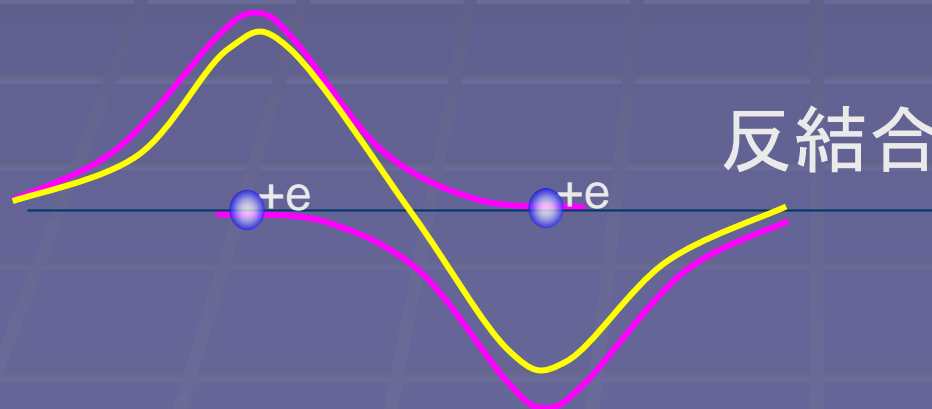
水素分子:  $H_2$



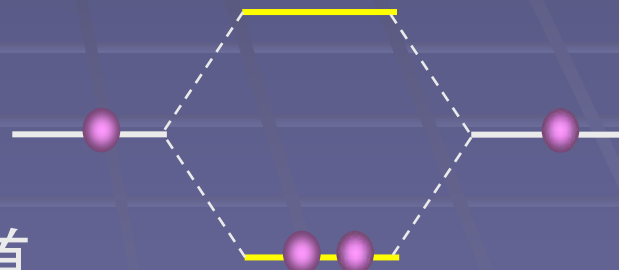
分子軌道



結合軌道

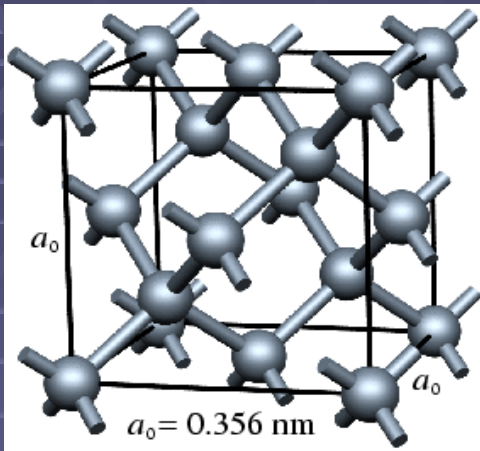


反結合軌道



# 共有結合

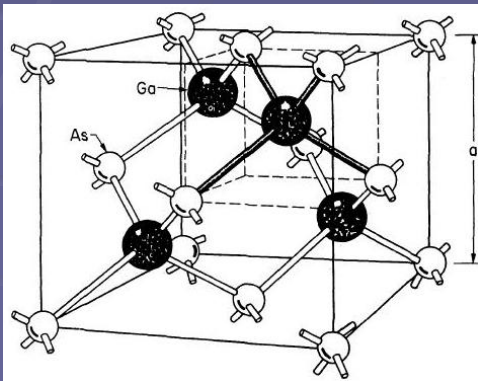
C, Si, Ge



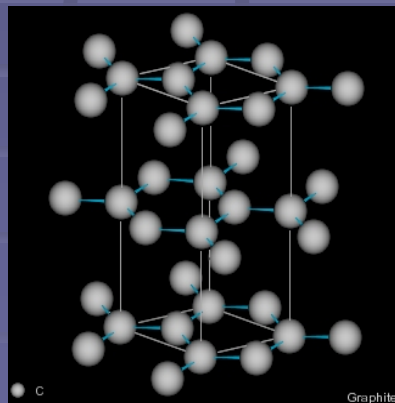
ダイヤモンド構造

H							He
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr

GaAs, InP



閃亜鉛鉱構造



グラファイト(黒鉛)

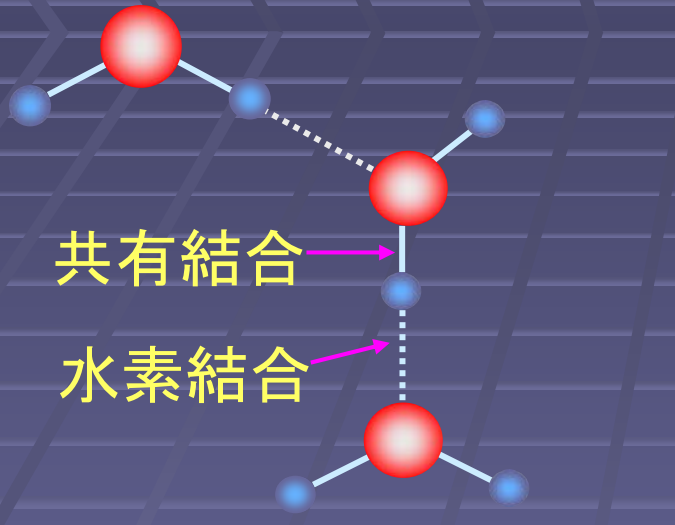
層状結晶

層内は強固な共有結合, 層間は  
弱いファンデアワールス結合

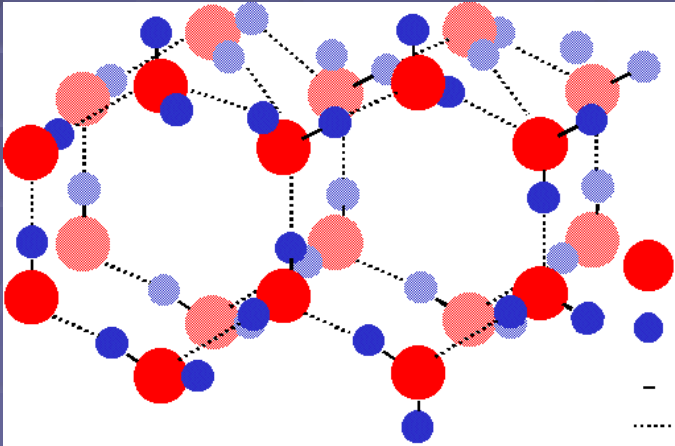
⇒ へき開しやすい

# 水素結合

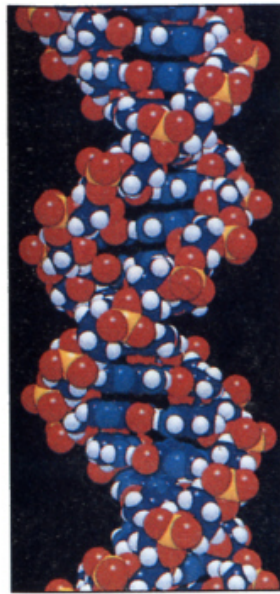
水分子



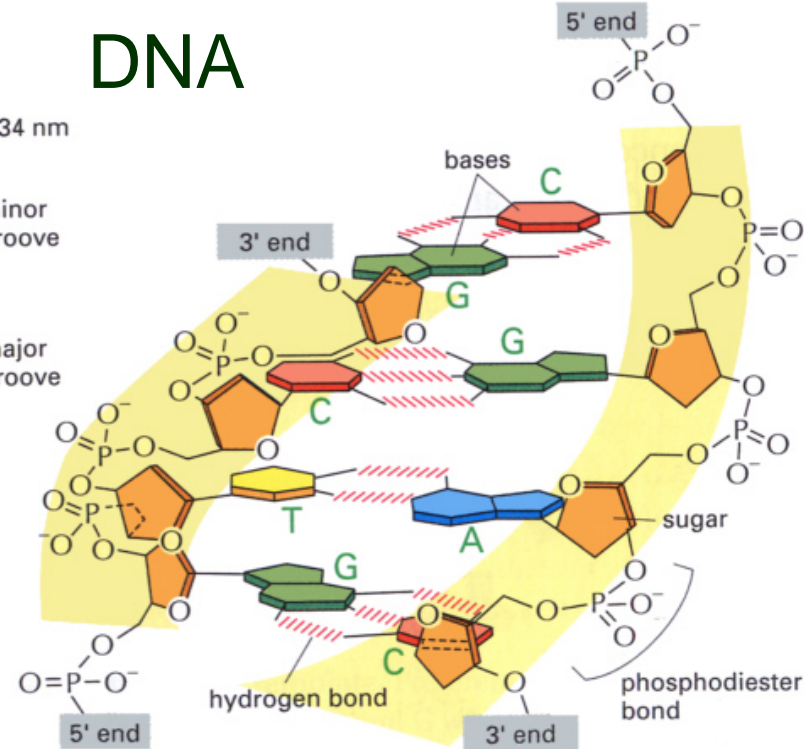
水素結合は生体分子において重要な役割を果たす



氷の結晶



(A)



(B)

# まとめ

- スケールの話
- 現代文明と物理学
- 物理学の中の物性物理学
- 量子力学と原子構造
- 物質の存在形態
- 原子の凝集機構と結晶構造
- . . . . .