

ナノ・機能マテリアル入門

2016年9月26日～2016年12月26日

先端科学技術研究センター（工学部 マテリアル工学科）

近藤高志

tkondo@castle.t.u-tokyo.ac.jp

0 はじめに

0.1 講義の目標

「古典的・量子力学的波動の振る舞いについて理解したうえで、ナノテクノロジーとその機能マテリアルへの応用について学ぶ」ことがこの講義の表向きの目標である。このように、大学教養学部では基礎科学の普遍性を強調したアカデミックなアプローチで講義がおこなわれることが多い。そのことが、高校までに学習した物理や化学の知識との間に大きなギャップがあるように錯覚してしまう原因かもしれない。

この講義では、学問分野の知識を基礎から積み上げてすべてカバーするという姿勢は捨て去り、教養学部で学ぶ基礎科目に登場する主要な基本概念を一点突破的に直感的に理解することを目的とする。その際、高校で学んだ物理や化学の知識とどのように関係しているのか、その関連をできるだけ明示しながら講義を進める。具体的には、教養課程2学期に学習する基礎科目の中で最も重要な以下の基本原理を取り上げ、その直感的な理解を得ることを目指す。

- 波動方程式（振動・波動論）
- シュレーディンガー方程式（構造化学）
- マクスウェル方程式（電磁気学）

できるだけビジュアルな手段を用いてこれらの方程式の意味することを定性的に理解する。また、同時に、典型的な数値例にあたることによって（半）定量的に物理現象を把握できるようにしたい。

さらに、これらの基本原理がどのような形でわれわれの身の周りのテクノロジーに結実しているのか、あるいは、次世代の先端技術にどのような形で活用されようとしているのかを、ナノマテリアルを中心としてわかりやすく解説する。以下のような項目を具体的な題材として予定している。

- 光ファイバー通信
- 電子顕微鏡
- 走査トンネル顕微鏡
- 大容量ハードディスクドライブ
- 半導体レーザー
- 高効率太陽電池
- 半導体量子井戸デバイス
- 超高速トランジスタと ULSI
- フォトニック結晶
- メタマテリアル — 負の屈折率をもつ物質

0.2 教科書・参考書

この講義では教科書は指定しない。第1回講義で配布するこの講義ノートと、各回冒頭に配布する予定の追加資料とで必要な範囲をすべてカバーする予定である。講義ノートと配付資料は次回以降も参照するので、講義時にはまとめて持参すること。

0.3 講義の概要と進め方

講義は以下のスケジュールで **11回**おこなう予定である。

- 1) 9/26 (月) イントロダクション
- 2) 10/ 3 (月) 波動方程式 (I) — その意味と解の振る舞い
- 3) 10/17 (月) 波動方程式 (II) — フーリエ級数とフーリエ変換
- 4) 10/24 (月) 波動方程式 (III) — 分散のある波, 光ファイバー通信の最先端
第1回レポート出題 (提出 \times 切: 11/4 (金))
- 5) 10/31 (月) シュレーディンガー方程式 (I) — その意味と解の振る舞い
11/ 7 (月) (休講)
- 6) 11/14 (月) シュレーディンガー方程式 (II) — ド・ブローイ波との対応, 電子顕微鏡
- 7) 11/21 (月) シュレーディンガー方程式 (III) — トンネル効果, 走査トンネル顕微鏡,
大容量ハードディスク
第2回レポート出題 (提出 \times 切: 12/9 (金))
- 8) 12/ 5 (月) シュレーディンガー方程式 (IV) — 結晶の電子論, 半導体量子井戸,
高効率太陽電池, 先端半導体レーザ
- 9) 12/12 (月) マクスウェル方程式 (I) — その意味
第3回レポート出題 (提出: 12/26 (月) 講義開始時)
- 10) 12/19 (月) マクスウェル方程式 (II) — 電場と誘電率, 超高速トランジスタ, 最先端 ULSI
- 11) 12/26 (月) マクスウェル方程式 (III) — 電磁波と物質, 屈折率とはなにか, 光の高度制御

成績評価は毎回の講義最後に実施する quiz と 3 回のレポートに基づいておこなう。評価のウェイトは quiz 50%, レポート 50% とする。quiz (その日の講義内容に関連した簡単な演習問題) はもちろん採点するので、内容が重要。レポートは講義内容の理解を助けるためのもでもあるので必ず自力で解答すること。また、レポート作成を通じて technical writing (これは、研究者・技術者にとって極めて重要な skill である) の最低限の基礎を身につけてもらいたいと考えている。

この講義では数式が頻出することになる。自然科学系の学問では、その論理展開を正確に表現するのに数学的表現 (すなわち数式) が最も適しているからである。講義では、数式の表している意味・物理的描像を極力わかりやすく説明するつもりであるが、その内容をきちんと理解するためには、やはり、講義に現れる式の展開をすべて自分で追ってみること、演習問題に自力で解答することが不可欠である。

講義の中でわからないことがあれば遠慮なくその場で質問してください。質問は他の受講生にとっても有益である場合が多いので、できるだけ講義室でしてもらいたい。

この講義に関する質問、要望などは私宛の電子メール (tkondo@castle.t.u-tokyo.ac.jp) でも受け付ける。メール送付の場合には、学生証番号と氏名を明記すること。

1 波動現象の基礎

1.1 波動方程式 (Wave Equation) と正弦進行波の解

古典的な波動の振る舞いを記述するのが波動方程式 (wave equation) とよばれる偏微分方程式 (partial differential equation) である。^{*1}

1.1.1 1次元の場合

x 方向にのみ運動し得る波動の振る舞いを記述する方程式は、以下の1次元波動方程式である。

$$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} = 0 \quad (1.1)$$

この偏微分方程式は、位置 x と時間 t の関数である振幅 (amplitude)^{*2} $u(x,t)$ の時間的・空間的な発展を記述する線形 (linear) 偏微分方程式である。ここで、 v は対象とする波動の種類によってあらかじめ決まっている定数で、後で見るように波動の位相速度を与えることになる。^{*3}

演算子 $\partial/\partial x$ は位置座標 x での偏微分で、他の変数 (この場合は時間 t) を固定したまま (つまり、時間を止めたある瞬間の振幅の空間分布のスナップショットについて) x で微分をおこなうことを意味する。すなわち、

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} \equiv \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(x+\Delta x,t) - u(x,t)}{\Delta x} \quad (1.2)$$

である。

演習問題 1.1

時間座標 t での偏微分 $\frac{\partial u(x,t)}{\partial t}$ の意味と定義を上段落を参考に説明せよ。

波動方程式 (1.1) は線形であるがゆえに、以下のように「複数の解の重ね合わせもまた解となる」という極めて重要な性質を持つことになる。二つの関数 $u_1(x,t)$ と $u_2(x,t)$ がいずれも波動方程式の解であるとしよう。 u_1, u_2 は式 (1.1) を満たし、 $\frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2} = 0$ である。これらの解の重ね

^{*1} この講義の後で取り扱うシュレーディンガー方程式とマクスウェル方程式は、いずれも、それ自身が基本原理であって、他の何か別のもっと基本的な原理から導出できるものではない。しかし、この (古典的) 波動方程式は、波動現象に対応する具体的な対象に関する「より基本的な原理」から導出される。「より基本的な原理」とは、弾性波や水面の波ならばニュートンの運動方程式であるし、電磁波ならばマクスウェル方程式である。波動方程式の導出は、「振動・波動論」できちんと勉強するはずである。われわれが取り扱う様々な古典的波動現象が、どれも、数学的に同じ形式の波動方程式 (式 (1.1), (1.9)) で記述できるという点が重要である。

^{*2} これが何の振幅であるかは、当然ながら取り扱う問題によって異なる。弦を伝わる波の場合は弦の平衡位置からの横方向へのずれ (変位) の振幅であるし、気体中を伝搬する音波ならば気体中の固定点の縦方向への変位の振幅、電磁波ならば電場、あるいは磁場の振幅である。

^{*3} もちろん、位相速度を決めるパラメータがどのように与えられるかは、対象とする波動現象ごとに異なる。以下にいくつかの例を挙げる。

- 気体中の音波: $v = \sqrt{\frac{\gamma R}{M} T}$ ($\gamma = c_p/c_v$ は定圧比熱と定積比熱の比, R は気体定数, M は気体 1 モルの質量, T は絶対温度)
- 細い弾性体棒を伝わる縦波: $v = \sqrt{\frac{E}{\rho}}$ (E は弾性体のヤング率, ρ は弾性体の密度)
- 弦を伝わる横波: $v = \sqrt{\frac{T}{\rho}}$ (T は弦を張る張力, ρ は弦の線密度)
- 液体表面の波: $v = \sqrt{\left(\frac{g\lambda}{2\pi} + \frac{2\pi\tau}{\rho\lambda}\right) \tanh \frac{2\pi h}{\lambda}}$ (g は重力加速度, λ は波の波長, τ は表面張力, ρ は液体の密度, h は液体層の深さ)
- 物質中の電磁波: $v = 1/\sqrt{\epsilon\mu}$ (ϵ は誘電率, μ は透磁率)

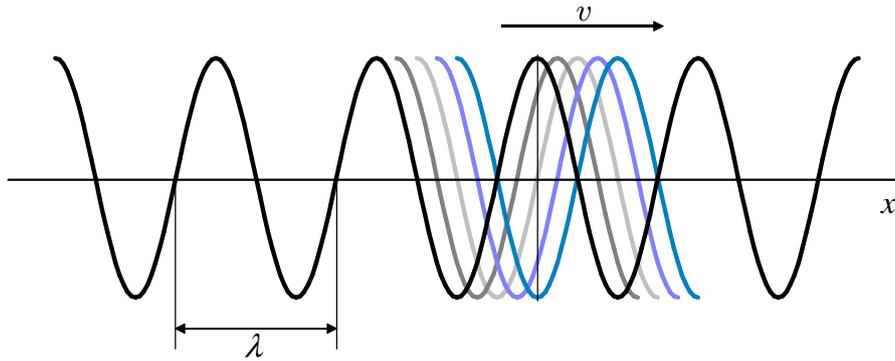


図 1 1次元の正弦進行波 $A \cos [k(x - vt) + \phi] = A \cos (kx - \omega t + \phi)$ の振る舞い

あわせ $A_1 u_1 + A_2 u_2$ について, $\frac{\partial^2(A_1 u_1 + A_2 u_2)}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2(A_1 u_1 + A_2 u_2)}{\partial t^2} = A_1 \left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} \right) + A_2 \left(\frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2} \right) = 0$ が成り立つ。すなわち, $A_1 u_1 + A_2 u_2$ も式 (1.1) を満たし, 波動方程式の解となっている。この性質を利用すれば, 一見複雑な振る舞いをする解を, よく性質のわかっている簡単な解の足し合わせで表すことによって, 見通しよく議論することができるようになる。

波動方程式 (1.1) の代表的な解として,

$$u(x, t) = A \cos [k(x - vt) + \phi] = A \cos (kx - \omega t + \phi) \quad (1.3)$$

について考えよう。

演習問題 1.2

式 (1.3) の正弦進行波が波動方程式 (1.1) の解であることを確認せよ。

図 1 に示すように, これは空間的, 時間的に正弦的に振動する波動であり, $+x$ 方向に速度 v で進行する進行波 (**traveling wave**) である。ここで, A は振幅, ϕ は初期位相, k は波数とよばれ, いずれも任意の値をとる。この波の波長 λ と波数 k の間には $k\lambda = 2\pi$ の関係があるので,

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (1.4)$$

が成り立つ (この式からあきらかなように, 波数 k は $[L^{-1}]$ の次元を持つ物理量である)。また, 周期 T については $kvT = \omega T = 2\pi$ の関係より,

$$T = \frac{2\pi}{vk} = \frac{2\pi}{\omega} \quad (1.5)$$

が得られる。^{*4}振動数は

$$\nu = \frac{1}{T} = \frac{vk}{2\pi} = \frac{\omega}{2\pi} \quad (1.6)$$

で与えられるので, 角振動数 (**angular frequency**) $\omega = 2\pi\nu$ と波数の間には次の関係が成立することがわかる。

$$\omega = vk \quad (1.7)$$

このような, 角振動数 ω と波数 k の間の関係を, その波動の分散関係 (**dispersion relation**) という。分散関係はその波動の特性の重要な部分を表しており, この講義では, この後現れる様々な波動の分散関係を議論し続けることになる。

^{*4} この式と式 (1.4) との対比から, 波数 k を空間周波数とよぶこともある。

演習問題 1.3

下記の波動が波動方程式 (1.1) の解であることを示せ。

$$u(x, t) = A \cos [k(x + vt) + \phi] = A \cos (kx + \omega t + \phi) \quad (1.8)$$

これはどのような振る舞いをする波動かを説明せよ。また、この波動の分散関係はどうなるか。

1.1.2 3次元の場合

3次元空間中の波動の振る舞いを記述する波動方程式は以下の式で与えられる。

$$\nabla^2 u(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = 0 \quad (1.9)$$

ここでは、振幅 u は空間座標 $r = (x, y, z)$ と時間 t の関数となる。演算子 ∇^2 はラプラス演算子 (ラブラシアン) (**Laplacian operator**) とよばれ、直交座標系ならば

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (1.10)$$

極座標系*5ならば

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad (1.11)$$

である。

3次元波動方程式には、1次元の場合の正弦進行波に対応する非常に単純な解

$$u(\mathbf{r}, t) = A \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \phi) \quad (1.12)$$

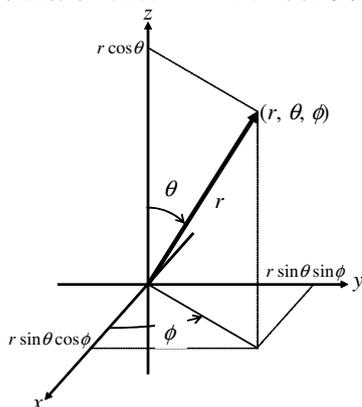
が存在する。式 (1.12) で表される波動は、

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = k_x x + k_y y + k_z z = \text{const.} \quad (1.13)$$

を満たす位置 \mathbf{r} 、すなわちベクトル \mathbf{k} に垂直な平面上では同一の位相を有する。このように平面状の等位相面 (波面) を有する波動を平面波 (**plane wave**) という。ベクトル \mathbf{k} は波数ベクトル (**wave vector**) とよばれ、等位相面は波数ベクトルの方向に速度 v で伝搬する。式 (1.12) を式 (1.9) に代入すると

$$|\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\omega}{v} \quad (1.14)$$

*5 極座標系の定義については下図を参照せよ。



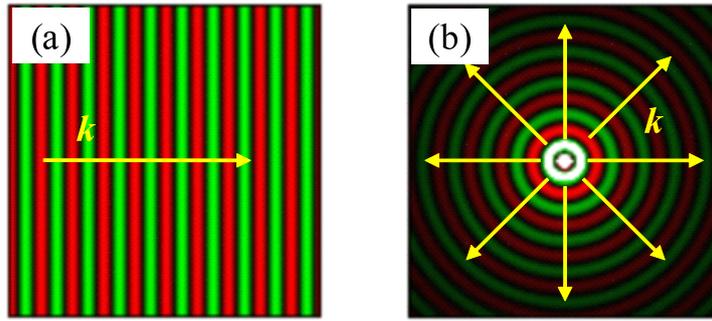


図2 平面波 (a) と球面波 (b) の振幅分布

という分散関係が得られる。

3次元波動方程式 (1.9) のもう一つの代表的な解に、以下に示す球面波 (spherical wave) がある。

$$u(r, t) = \frac{A}{r} \cos [k(r - vt) + \phi] = \frac{A}{r} \cos (kr - \omega t + \phi) \quad (1.15)$$

演習問題 1.4

球面波 (1.15) が3次元波動方程式 (1.9) の解であることを示せ。また、この波動の分散関係を求めよ。

これは、原点 ($r = 0$) を中心とした球面状の等位相面を有し、それが速度 v で原点から外側へ放射される波を表している。振幅が原点からの距離 r に反比例して減少していくことに注意。^{*6}

図2に平面波と球面波の様子をしめした。

1.2 1次元波動方程式の一般解

一般に波動は、ここまで見てきたような一様な振動を無限に繰り返す正弦波的なものだけに限られるわけではない。

1次元波動方程式 (1.1) の一般解は以下の式で与えられる。

$$u(x, t) = f(x - vt) + g(x + vt) \quad (1.16)$$

ここで、 f, g は任意の関数である。右辺第1項 $f(x - vt)$ が波動方程式 (1.1) を満たすことは以下のように確認できる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 f(x - vt)}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 f(x - vt)}{\partial t^2} &= \left(\frac{\partial(x - vt)}{\partial x} \right)^2 f''(x - vt) - \frac{1}{v^2} \left(\frac{\partial(x - vt)}{\partial t} \right)^2 f''(x - vt) \\ &= f''(x - vt) - \frac{(-v)^2}{v^2} f''(x - vt) = 0 \end{aligned} \quad (1.17)$$

ここで、 $f''(\zeta) = \frac{d^2 f(\zeta)}{d\zeta^2}$ である。

演習問題 1.5

同様に、右辺第2項 $g(x + vt)$ も波動方程式 (1.1) を満たすことを確認せよ。

^{*6} 2次元の波動の場合 (例えば水面の波)、振幅は $r^{-1/2}$ に比例する。

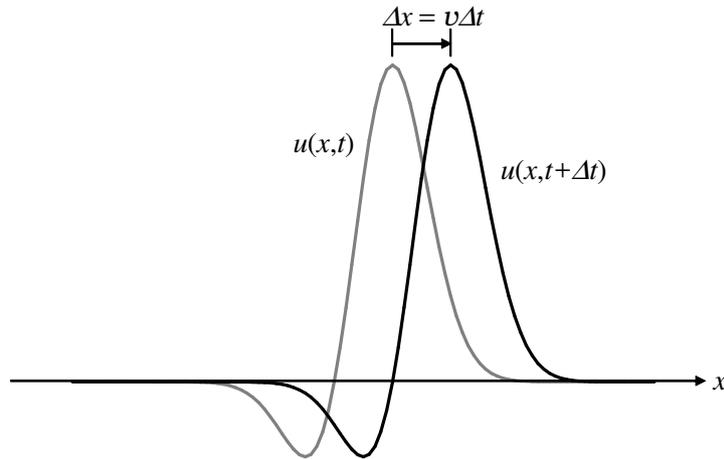


図3 波動方程式の解 $u(x,t) = f(x-vt)$ の振る舞い。時刻 t と時刻 $t + \Delta t$ における解を示している。

式 (1.16) の右辺第 1 項 $f(x-vt)$ はどのような振る舞いをする波動であろうか。 $f(x-vt)$ は $\zeta = x-vt$ のみの関数なので、この解は形を変えずに伝搬する。図 3 に時刻 t と $t + \Delta t$ における解の一例を示す。時間 Δt の間に距離 Δx だけ進むとしよう。定義から、 $u(x+\Delta x, t+\Delta t) = f(x+\Delta x - v(t+\Delta t)) = f(x-vt)$ でなければならないので、 $x+\Delta x - v(t+\Delta t) = x-vt$ 、すなわち、 $\Delta x = v\Delta t$ が成り立つ。つまり、波動方程式の解 $u(x,t) = f(x-vt)$ は速度 v で $+x$ 方向に形を変えずに伝搬することがわかる。

同様に、式 (1.16) の右辺第 2 項 $g(x+vt)$ は速度 v で $-x$ 方向に形を変えずに伝搬する解である。

1.3 両端を固定された弦の振動（境界条件による離散化）

両端を固定された長さ l の弦の振動（図 4）について考えてみよう。位置 x ，時刻 t における弦の変位の振幅 $u(x,t)$ は波動方程式 (1.1) を満足しなければならない。さらに、両端を固定されていることから、 $x = 0, l$ での振幅が常に 0 である、すなわち、

$$u(0,t) = u(l,t) = 0 \tag{1.18}$$

がすべての t について成り立たなければならない。この条件は境界における $u(x,t)$ の挙動を規定するもので、境界条件 (**boundary condition**) とよばれる。

この境界条件のもとでの波動方程式の解を変数分離法 (**separation of variables**) で求めよう。この解が

$$u(x,t) = X(x)T(t) \tag{1.19}$$

と、位置 x のみの関数 $X(x)$ と時間 t のみの関数 $T(t)$ の積であらわせると仮定しよう。式 (1.19) を式

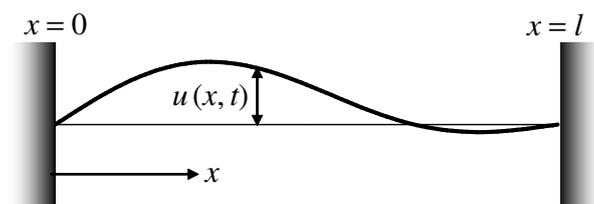


図4 両端 ($x = 0, l$) を固定した弦の振動

(1.1) に代入すると,

$$T(t) \frac{d^2 X(x)}{dx^2} - \frac{1}{v^2} X(x) \frac{d^2 T(t)}{dt^2} = 0 \quad (1.20)$$

が得られる。両辺を $u(x, t) = X(x)T(t)$ で割ると

$$\frac{1}{X(x)} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} = \frac{1}{v^2 T(t)} \frac{d^2 T(t)}{dt^2} \quad (1.21)$$

となる。式 (1.21) の左辺は x のみの関数, 右辺は t のみの関数である。 x と t は独立変数であるから, これが成り立つためには, 両辺がともに (x, t によらない) 定数でなければならない。すなわち,

$$\frac{1}{X(x)} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} = K \quad (1.22a)$$

$$\frac{1}{v^2 T(t)} \frac{d^2 T(t)}{dt^2} = K \quad (1.22b)$$

となる必要がある。ここで導入した定数 K は分離定数 (**separation constant**) とよばれる。これらを書き換えると

$$\frac{d^2 X(x)}{dx^2} - KX(x) = 0 \quad (1.23a)$$

$$\frac{d^2 T(t)}{dt^2} - v^2 KT(t) = 0 \quad (1.23b)$$

となる。これらはいずれも線形常微分方程式 (**ordinary differential equation**) である。

分離定数 K の値は未定である。そこで, まず, $K = 0$ としてみよう。この場合には, 式 (1.23a), (1.23b) はすぐに積分できて,

$$X(x) = Ax + B \quad (1.24a)$$

$$T(t) = Ct + D \quad (1.24b)$$

となる。ここで, 係数 $A \sim D$ は積分定数である。境界条件 (1.18) から,

$$u(0, t) = X(0)T(t) = 0 \quad (1.25a)$$

$$u(l, t) = X(l)T(t) = 0 \quad (1.25b)$$

でなければならない。仮にすべての t に対して $T(t) = 0$ ならばこれらは満たされるが, このときは $u(x, t) = 0$ となってしまう。そうでなければ, $X(0) = X(l) = 0$ でなければならないが, このときには式 (1.24a) より $A = B = 0$ となり, $X(x) = 0$, すなわち, $u(x, t) = 0$ となってしまう。いずれにせよ, $K = 0$ の場合には, $u(x, t) = 0$ という無意味な解 (**trivial solution**) しか得られない。

次に, $K > 0$ の場合について考えよう。 $K = \beta^2$ (β は実数) とおくと, 式 (1.23a) の解は

$$X(x) = Ae^{\beta x} + Be^{-\beta x} \quad (1.26)$$

となる。これが境界条件を満たすのは $A = B = 0$ の場合のみであり, ここでも無意味な解しか得られない。

最後に $K < 0$ の場合についてみてみよう。 $K = -\beta^2$ とおくと, 解くべき方程式は

$$\frac{d^2 X(x)}{dx^2} + \beta^2 X(x) = 0 \quad (1.27a)$$

$$\frac{d^2 T(t)}{dt^2} + v^2 \beta^2 T(t) = 0 \quad (1.27b)$$

となる。式 (1.27a) の一般解は

$$X(x) = A \cos \beta x + B \sin \beta x \quad (1.28)$$

で与えられる。境界条件 $X(0) = 0$ から $A = 0$, $X(l) = 0$ から

$$X(l) = B \sin \beta l = 0 \quad (1.29)$$

となる。 $B = 0$ とすると無意味な解しかないので、意味のある解は $\sin \beta l = 0$, すなわち,

$$\beta = \frac{n\pi}{l} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.30)$$

のときのみを得られ, その解は

$$X(x) = B \sin \frac{n\pi x}{l} \quad (1.31)$$

となる。式 (1.30) を式 (1.27b) に代入して解くと, その一般解は

$$T(t) = C \cos \omega_n t + D \sin \omega_n t \quad (1.32)$$

となる。ここで, 角振動数は $\omega_n = n\pi v/l$ である。積分定数 C, D には何の条件も課されない。以上より,

$$\begin{aligned} u(x, t) &= \left(B \sin \frac{n\pi x}{l} \right) (C \cos \omega_n t + D \sin \omega_n t) \\ &= (E \cos \omega_n t + F \sin \omega_n t) \sin \frac{n\pi x}{l} \quad n = 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (1.33)$$

となる。このように, 両端を固定された弦の振動の振動数 (すなわち波長や波数も) は, 先にみた自由空間中の進行波の場合と異なり, 特定の離散的 (**discrete**) な値しかとりえない。これは, 空間的に閉じ込められた (すなわち境界条件を課された) 波動に共通する現象である。

各整数 $n = 1, 2, 3, \dots$ に対して一つずつ解 $u(x, t)$ が存在すること, 係数 E, F の値は n に依存してもよいことから, 解 $u(x, t)$ は

$$u_n(x, t) = (E_n \cos \omega_n t + F_n \sin \omega_n t) \sin \frac{n\pi x}{l} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.34)$$

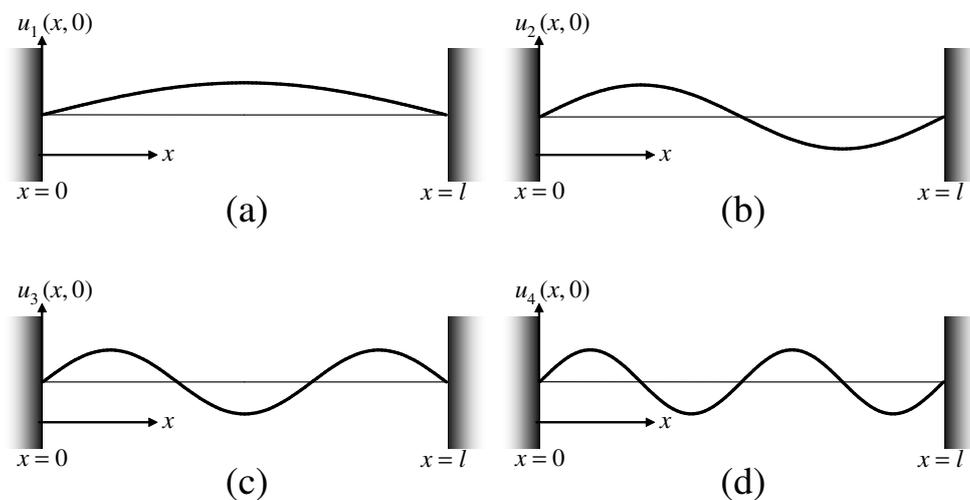


図5 振動する弦の基準モード。(a)は第1調和振動(基本モード), (b)は第2調和振動(第2高調波), (c)は第3調和振動(第3高調波), (d)は第4調和振動(第4高調波)に対応する。

と書かねばならない。これは線形偏微分方程式 (1.1) の解であるから、その和もまた解となる。結局、波動方程式 (1.1) の一般解は

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} u_n(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} (E_n \cos \omega_n t + F_n \sin \omega_n t) \sin \frac{n\pi x}{l} \quad (1.35)$$

である。

式 (1.34), (1.35) の $u_n(x, t)$ は、振動数

$$\nu_n = \frac{\omega_n}{2\pi} = \frac{n\nu}{2l} \quad (1.36)$$

で振動する定在波 (**standing wave**) であり、これをこの問題における**基準モード (normal mode)** とよぶ。 $n = 1, 2, 3, 4$ に対応する基準モードの振動の様子を図 5 に示す。第 1 項 $u_1(x, t)$ は**基本モード (fundamental mode)** あるいは**第 1 調和振動 (first harmonic)** といい、振動数 $\nu/2l$ 、波長 $2l$ の正弦波的 (調和振動的) 定在波である。第 n 項 $u_n(x, t)$ は、振動数 $n\nu/2l$ 、波長 $2l/n$ の**第 n 調和振動 (n -th harmonic)** (第 $(n-1)$ 倍音 ($(n-1)$ -th overtone) ともよぶ) である。第 n 調和振動は $n-1$ 箇所の節 (**node**) をもつ。

すなわち、振動する弦に対する波動方程式のいかなる解も、振動数 $\nu/2l$ の基本モードとと高調波 (**harmonics**) の和であらわすことができる。複雑な振動がこのように単純な基準モードの重ねあわせであらわされるということは、振動的現象の基本的な性質である。

1.4 フーリエ級数, フーリエ変換と波動現象

1.4.1 フーリエ級数

単純な三角関数 (定常波) であるモードの足し合わせによって極めて複雑に見える波動が表現できるということは、裏を返してみると、どのように複雑な波動も (それが波動方程式の解である限り) 三角関数の足し合わせで表現できるということを意味している。すなわち、波動の問題を考えようと思ったなら、正弦波の性質を議論すればよいことになる。^{*7}

区間 $(-l/2, +l/2)$ で定義される関数 $f(x)$ は、次のように三角関数の無限級数 (フーリエ級数) に展開することができる。

$$f(x) = \frac{B_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{2\pi}{l} nx\right) + \sum_{n=1}^{\infty} B_n \cos\left(\frac{2\pi}{l} nx\right) \quad (1.37)$$

ここで、フーリエ係数 A_n, B_n は

$$A_n = \frac{2}{l} \int_{-l/2}^{l/2} f(x) \sin\left(\frac{2\pi}{l} nx\right) dx \quad (1.38a)$$

$$B_n = \frac{2}{l} \int_{-l/2}^{l/2} f(x) \cos\left(\frac{2\pi}{l} nx\right) dx \quad (1.38b)$$

で与えられ、各成分波の寄与の大きさを表している (そのため、フーリエ振幅とも呼ばれる)。

^{*7} 分散がある場合には少し事情が複雑になる。これについては次節を参照のこと。

演習問題 1.6

次の式で与えられる矩形波

$$f(x) = \begin{cases} -1 & (-l/2 < x \leq 0) \\ 1 & (0 < x \leq l/2) \end{cases} \quad (1.39)$$

は次のようにフーリエ級数展開できることを示せ。

$$f(x) = \frac{4}{\pi} \left(\sin \frac{2\pi}{l}x + \frac{1}{3} \sin \frac{6\pi}{l}x + \frac{1}{5} \sin \frac{10\pi}{l}x + \dots \right) \quad (1.40)$$

また、最初のいくつかの項を取り出して実際に計算し、そのグラフを書いてみよ。

各成分波の波数*8とフーリエ振幅の関係を図に示したものをその波動のフーリエスペクトル、あるいはフーリエ振幅スペクトル（単に振幅スペクトルともいう）と呼ぶ。また、波動のエネルギーは振幅の二乗に比例するので、波数とフーリエ振幅の二乗の関係を表すものをパワースペクトルという。一例として、演習問題 1.6 で与えた矩形波のフーリエ振幅スペクトルとパワースペクトルを図 6 にしめす。

1.4.2 波動現象とフーリエ級数

一例として、長さ l の弦 ($-l/2 < x \leq l/2$) の中央部分 ($x = 0$) を指で引っ張りあげて静止させた後、手を離すとどのような現象が起こるかを考えてみよう。時刻 $t = 0$ における弦の振幅は

$$\begin{aligned} u(x, t = 0) = u_0(x) &= \begin{cases} (2/l)(x + l/2) & (-l/2 \leq x \leq 0) \\ (2/l)(l/2 - x) & (0 \leq x \leq l/2) \end{cases} \\ &= \frac{8}{\pi^2} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{(2m-1)^2} \cos \left[\frac{(2m-1)\pi x}{l} \right] \end{aligned} \quad (1.41)$$

とフーリエ級数展開できる。各モードは $t > 0$ において $\cos [(2m-1)\pi vt/l]$ で振動するので、任意の時刻 t における弦の振幅は

$$u(x, t) = \frac{8}{\pi^2} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{(2m-1)^2} \cos \left[\frac{(2m-1)\pi x}{l} \right] \cos \left[\frac{(2m-1)\pi vt}{l} \right] \quad (1.42)$$

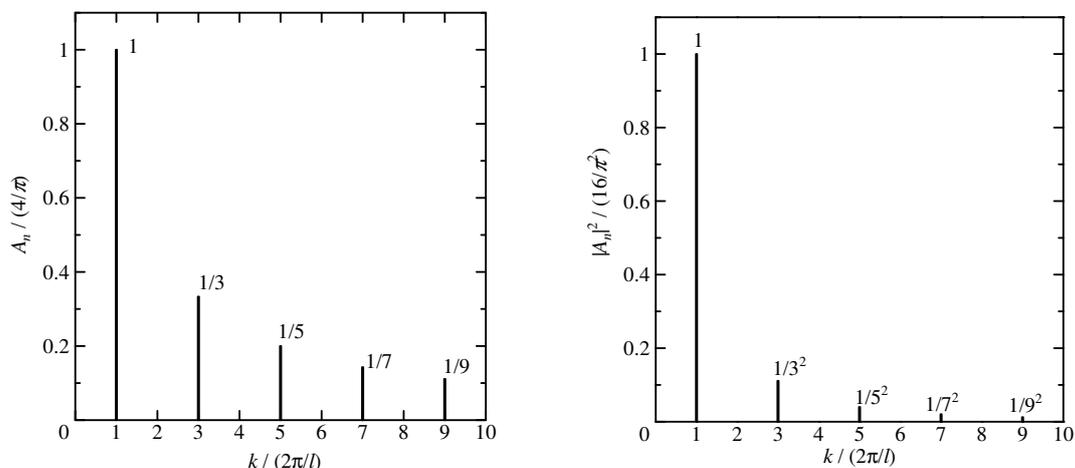


図 6 矩形波 (1.39) のフーリエ振幅スペクトル (左) とパワースペクトル (右)

*8 $x \rightarrow t$ の場合は振動数

で与えられることになる。さて、これがどのような振る舞いをしているのか、想像できるだろうか。答えは講義で。

1.4.3 波動現象とフーリエ変換

1次元波動方程式(1.1)の解である進行波(1.3)において波数 k の大きさは任意である(すなわち、分散関係によって波数 k と結びついている角振動数 ω の大きさも任意である)ので、様々な大きさの k の解を足し合わせたものも波動方程式を満足する解として存在し得る。前節であつかった問題にあった境界条件がなくなると、取り得る k の値は離散的でなく連続的になるので、もはやフーリエ級数展開は有効ではなくなる。この場合には、フーリエ変換が波動現象の有効な解析手段となる。

$0 < x < \infty$ で定義される関数 $f(x)$ に対して、

$$F_c(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} f(x) \cos kx \, dx \quad (1.43a)$$

$$F_s(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} f(x) \sin kx \, dx \quad (1.43b)$$

をそれぞれ、フーリエ余弦変換、フーリエ正弦変換という。もとの関数 $f(x)$ はこれらのフーリエ変換 $F(k)$ を使って次のフーリエ逆変換で与えられる。

$$f(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} F_c(k) \cos kx \, dk \quad (1.44a)$$

$$f(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} F_s(k) \sin kx \, dk \quad (1.44b)$$

すなわち、すべての波動は、正弦波・余弦波の足し合わせ(稠密に存在するので数学的には積分になる)で表せるということである。この場合にも、 $F(k)$ ^{*9}をその波動の振幅スペクトル、 $|F(k)|^2$ をパワースペクトルという。

ここで、波数 k_0 を中心として幅 Δk の範囲のすべての進行波解を同じ重みで足し合わせたらどうなるかをみてみよう。 k に対する積分を実行(フーリエ逆変換を実行していることと同じ!)すると

$$f(x) \propto \frac{1}{\Delta k} \int_{k_0-\Delta k/2}^{k_0+\Delta k/2} \cos(kx - \omega t) \, dk = \cos[k_0(x - vt)] \frac{\sin[\Delta k(x - vt)/2]}{\Delta k(x - vt)/2} \quad (1.45)$$

が得られる。

演習問題 1.7

上の(1.45)式を自力で計算せよ。

この解の空間的な波形を図7に示した。空間的にある領域に集中したパルス(pulse)状の波形となっていることがわかる。このように、空間の有限の部分に限られている波のことを波束(wave packet)とよぶ。波束の空間的広がり Δx は波数幅 Δk に反比例している。すなわち、

$$\Delta x \cdot \Delta k = \text{const.} \quad (1.46)$$

の関係が成り立つ。これは波動の持つ本質的な性質であり、量子力学で登場するハイゼンベルグの不確定性関係と直接に関連している。

*9 $x \rightarrow t$ の場合は $k \rightarrow \omega$ と置き換える。

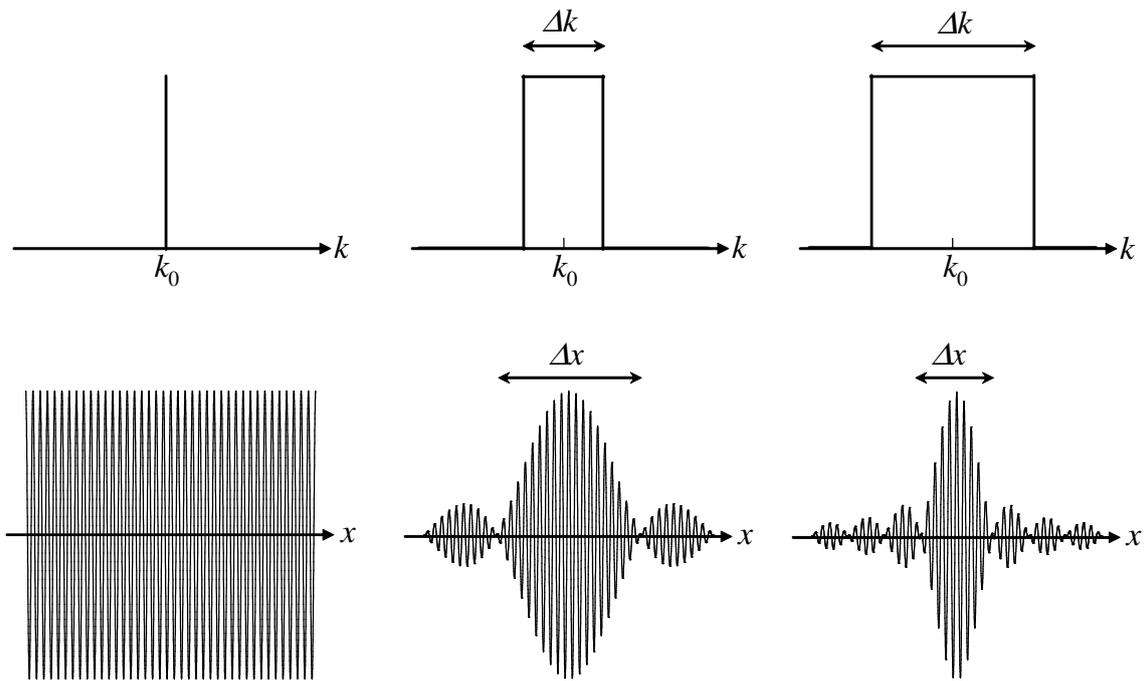


図7 波束のスペクトル $F_c(k)$ (上) とそれに対応する空間波形 $f(x) = \int_0^\infty dk F_c(k) \cos(kx)$ (下)

1.5 分散がある場合の波動の振る舞い

波動方程式に現れるパラメータ v が周波数（あるいは波長，波数）に依存しない場合，すなわち，分散関係 (1.7) が線形な場合には，その波動の性質は成分波である正弦進行波の性質とさして変わらない。このような波動を分散のない波動という*10。ところが， v が周波数，波数に依存して変化する場合，すなわち分散のある波動*11では，劇的な変化が起きる。

1.5.1 位相速度と群速度

まず，もっとも単純な例として，わずかに波長の異なる二つの波の足し合わせを考えよう。波数 $k_0 - \Delta k$ ($\Delta k \ll k_0$)，角振動数 $\omega_0 - \Delta\omega$ ($\Delta\omega \ll \omega_0$) の正弦進行波と波数 $k_0 + \Delta k$ ，角振動数 $\omega_0 + \Delta\omega$ の正弦進行波の和は

$$\begin{aligned} u_2(x, t) &= \cos [(k_0 - \Delta k)x - (\omega_0 - \Delta\omega)t] + \cos [(k_0 + \Delta k)x - (\omega_0 + \Delta\omega)t] \\ &= 2 \cos(k_0 x - \omega_0 t) \cos(\Delta k x - \Delta\omega t) \end{aligned} \quad (1.47)$$

のようになりを生じることになる。

演習問題 1.8

上の式 (1.47) を自力で follow せよ。

この波動の包絡線は，波長よりも長い周期で変化する $\cos(\Delta k x - \Delta\omega t)$ の部分で与えられるが，これは

*10 3 ページの脚注の例の中では，気体中の音波，細い弾性体棒を伝わる縦波，弦を伝わる横波は分散のない波動である。

*11 3 ページの脚注の例では，液体表面の波と物質中の電磁波が分散性の波動である。後者では，屈折率の波長依存性から分散が生じる。

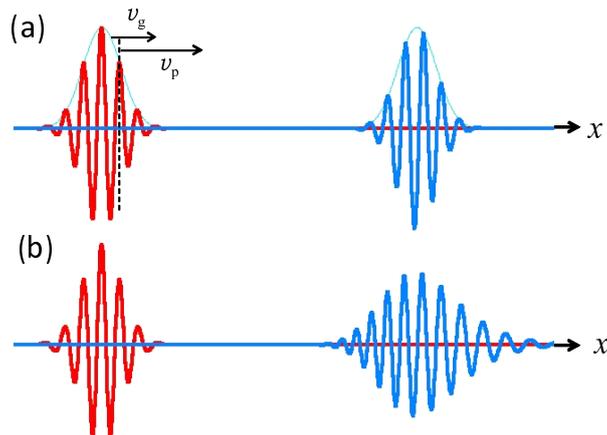


図 8 分散性波動の例（ガウス波束）。(a) は群速度分散はないが分散がある場合。波束は形状を変えずに伝搬するが、位相速度と群速度が異なる。(b) は群速度分散もある場合。伝搬に伴い波形が崩れる。パルス広がりやチャープングが起こっている。

$\Delta\omega/\Delta k$ の速度で x の正の方向に運動する。これは波動のエネルギーが運ばれる速度が $\Delta\omega/\Delta k$ （これは $\Delta k \rightarrow 0$ の極限で $d\omega/dk$ となる）で与えられることを示している。

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \quad (1.48)$$

を群速度 (group velocity) という。これに対して、

$$v_p = \frac{\omega}{k} = v \quad (1.49)$$

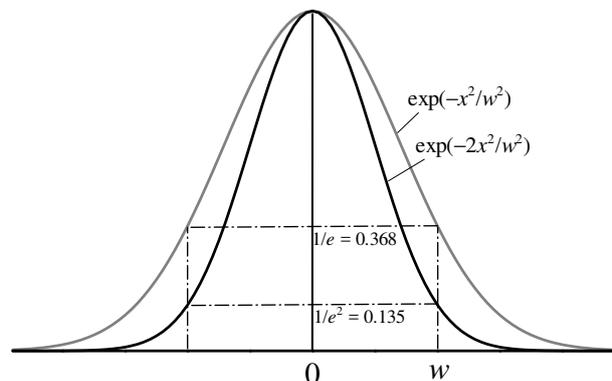
は、等位相面の伝搬する速度になっているので、位相速度 (phase velocity) とよばれる。分散がある場合には、位相速度 v_p と群速度 v_g は一致しなくなる。しかし、包絡線の形状 $\cos(\Delta kx - \Delta\omega t)$ そのものはまったく変化せずに伝搬する。図 8(a) に分散性波動の例を示す。ここではガウス波束^{*12}の例を示した。波束の包絡線は形状を変えずに伝搬するが、位相速度と群速度が異なっていることに注意。

1.5.2 群速度分散

次のように波数と角振動数の異なる三種類の正弦進行波を足し合わせたらどうなるであろうか。

$$u_3(x, t) = \cos[(k_0 - \Delta k_1)x - (\omega_0 - \Delta\omega_1)t] + 2 \cos(k_0x - \omega_0t) + \cos[(k_0 + \Delta k_2)x - (\omega_0 + \Delta\omega_2)t] \quad (1.50)$$

^{*12} ある時刻における包絡線の形状がガウス関数（ガウシアン）になっている。ガウス関数とは $\exp(-x^2/w^2)$ の形で与えられる関数で、その形状は右のようになる。



これは

$$\begin{aligned}
 u_3(x, t) &= u_2'(x, t) + u_2''(x, t) \\
 &= \{\cos [(k_0 - \Delta k_1)x - (\omega_0 - \Delta\omega_1)t] + \cos (k_0x - \omega_0t)\} \\
 &\quad + \{\cos (k_0x - \omega_0t) + \cos [(k_0 + \Delta k_2)x - (\omega_0 + \Delta\omega_2)t]\}
 \end{aligned} \tag{1.51}$$

と二つに分けることができる。第一項は、群速度

$$v_g' = \frac{\Delta\omega_1}{\Delta k_1} = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0-\Delta k_1} = v_g(k_0 - \Delta k_1)$$

で伝搬し、第二項は

$$v_g'' = \frac{\Delta\omega_2}{\Delta k_2} = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0} = v_g(k_0)$$

で伝搬する。もし $v_g(k_0 - \Delta k_1) = v_g(k_0)$ であればこの波動 $u_3(x, t)$ は包絡線の形を変えずに群速度 v_g で伝搬する。しかし、分散が強くと、 $v_g(k_0 - \Delta k_1) \neq v_g(k_0)$ となってしまうと、この波動はもはや形状を不変に保ったまま伝搬することができず、伝搬に伴って波形が崩れていくことになる。この後者のような状態を群速度分散 (**group velocity dispersion**) があるという。図 8(b) に群速度分散がある場合のガウス波束の伝搬の様子を示した。伝搬に伴い波束の広がりが生じている。

ここまでの議論から容易に推測できるように、群速度分散の影響は、波動のスペクトルの及ぶ範囲内で $dv_g/dk = d^2\omega/dk^2$ の値が無視できなくなると顕在化する。最近の高速光ファイバー通信では、変調速度の上昇に伴い通信に使われる光パルスは不可避免的に広いスペクトルを伴うことになり、群速度分散が深刻な問題となる。群速度分散によるパルス広がりは長距離大容量光通信を不可能にしてしまうので、これを回避するために特殊な断面形状の光ファイバー（分散制御ファイバー）を用いて群速度分散を抑制する方法がとられている。

2 シュレーディンガー方程式

ミクロな世界では、電子のような物質粒子が波動としての性質も同時に示す（波動と粒子の二重性）。その物質波の振る舞いを規定する基本的方程式がシュレーディンガー方程式 (**Schrödinger equation**) である。

2.1 数学的準備—複素平面と複素数の指数関数表示

量子力学的世界では系の状態を記述する波動関数（その詳細は後述）は一般に複素数の振幅を有する。複素数を扱う際に極めて有用な概念を念のためにここでまとめておこう。

複素数 $z = x + iy$ は、その実部 (x) を横軸に、虚部 (y) を縦軸にとった図 9 のような 2 次元座標系における点 (x, y) で表現できる。この平面を複素平面とよぶ。複素数の絶対値 $|z| = \sqrt{x^2 + y^2}$ は、原点と点 (x, y) を結ぶベクトル \mathbf{r} の長さとも一致し、位相角 $\theta = \tan^{-1}(y/x)$ はベクトル \mathbf{r} と実数軸のなす角である。これらを用いると、

$$z = x + iy = r(\cos \theta + i \sin \theta) = r e^{i\theta} \tag{2.1}$$

と表現できる。ここで、

$$e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta \tag{2.2}$$

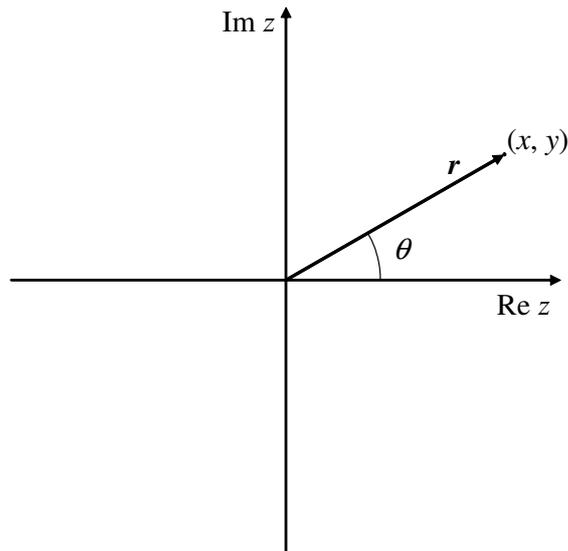


図9 複素平面と複素数

はオイラーの公式 (**Euler's formula**) とよばれる。念のため、この式の導出をしておこう。左辺をテイラー展開して偶数番目の項と奇数番目の項に分けて整理すると、次式のように右辺へ到達できる。

$$e^{i\theta} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\theta)^n}{n!} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m \theta^{2m}}{(2m)!} + i \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m \theta^{2m+1}}{(2m+1)!} = \cos \theta + i \sin \theta \quad (2.3)$$

この式の微分は、この講義に限らず理工系のあらゆる分野で頻出するが、

$$\frac{d}{d\theta} e^{ib\theta} = i b e^{ib\theta} \quad (2.4)$$

である。したがって、

$$\frac{d}{d\theta} e^{(a+ib)\theta} = (a + ib) e^{(a+ib)\theta} \quad (2.5)$$

が成り立つ。

演習問題 2.1

$\frac{d}{d\theta} e^{ib\theta} = i b e^{ib\theta}$ であること、 $\int e^{ib\theta} d\theta = \frac{1}{ib} e^{ib\theta}$ であること、二つの複素数 $C_1 = r_1 e^{ib_1\theta}$ と $C_2 = r_2 e^{ib_2\theta}$ の積が $C_1 C_2 = r_1 r_2 e^{i(b_1+b_2)\theta}$ で与えられることを、それぞれ、式 (2.2) を用いて確かめよ。

2.2 時間に依存するシュレーディンガー方程式

ミクロな世界での物質粒子の挙動は波動関数 (**wave function**) $\Psi(\mathbf{r}, t)$ で記述される。波動関数は量子力学で特別な意味 (その意味について後述) を持つ重要な関数である。波動関数の振る舞いは以下の時間に依存するシュレーディンガー方程式 (**time-dependent Schrödinger equation**) に支配される。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.6)$$

ここで、 $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.05 \times 10^{-34} \text{ J s}$ はプランク定数 $h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J s}$ を 2π で割ったもの、 m は物質粒子の質量、 $V(\mathbf{r})$ は粒子の感じるポテンシャルエネルギーの空間座標依存性を表すポテンシャル関数

である。この式の左辺の演算子 (**operator**)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) \quad (2.7)$$

は、粒子の全エネルギーを与える演算子で、ハミルトン演算子 (ハミルトニアン) (**Hamiltonian**) とよばれる。このハミルトニアンを用いると、時間に依存するシュレーディンガー方程式 (2.6) は以下のように書き直せる。

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.8)$$

これからこの講義で扱う問題では、ハミルトニアン \hat{H} はあらわに時間依存性を含まない。その場合には、変数分離法で式 (2.8) を解くことができる。

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})\varphi(t) \quad (2.9)$$

を式 (2.8) に代入して両辺を $\psi(\mathbf{r})\varphi(t)$ で割ると、

$$\frac{1}{\psi(\mathbf{r})}\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = \frac{i\hbar}{\varphi(t)}\frac{d\varphi(t)}{dt} \quad (2.10)$$

が得られる。分離定数を E とすると、

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2.11a)$$

$$\frac{d\varphi(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}E\varphi(t) \quad (2.11b)$$

となる。式 (2.11b) は容易に解くことができ、その解は

$$\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar} \quad (2.12)$$

となる。したがって、波動関数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ は

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar} \quad (2.13)$$

で与えられることになる。ここで、分離定数 E^{*13} を

$$E = \hbar\omega \quad (2.14)$$

と書くことにすれば、

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-i\omega t} \quad (2.15)$$

と表せる。時間依存性を含まない $\psi(\mathbf{r})$ の部分を定常状態 (**stationary state**) の波動関数という。

2.3 時間に依存しないシュレーディンガー方程式

時間に依存しない環境下に置かれた粒子の振る舞いの空間依存性を表す定常状態波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ の振る舞いは、式 (2.11a), すなわち

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2.16)$$

^{*13} これは定常状態における粒子の全エネルギーを与えるエネルギー固有値であることが、この後すぐにあきらかになる。

で記述される。これが時間に依存しないシュレーディンガー方程式 (**time-independent Schrödinger equation**) である。この式は、与えられた演算子 \hat{H} に対して、式 (2.16) を満足する関数 $\psi(\mathbf{r})$ と未知定数 E とを同時に求めることを要求している。このような数学的問題を固有値問題 (**eigenvalue problem**) といい、関数 ψ を演算子 \hat{H} の固有関数 (**eigen function**)、定数 E を演算子 \hat{H} の固有値 (**eigenvalue**) とよぶ*14時間に依存しないシュレーディンガー方程式を解くという問題は、数学的には、エネルギーの演算子であるハミルトニアンに対する固有値問題となっているのである。

2.4 量子力学の要請—考え方と波動関数の意味

量子力学の基礎をなす要請を以下にまとめる。これらは、他の何かから導出できるものではない。これら自身が量子力学の基本的な前提である。これらが正しいことは多くの実験によって裏付けられている。

- 要請 1 系の状態は、シュレーディンガー方程式 (2.8) によって規定される波動関数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ で完全に指定される。

定常状態では、時間に依存しないシュレーディンガー方程式 (2.16) の固有関数 $\psi(\mathbf{r})$ (とエネルギー固有値 E によって特徴付けられる時間依存性の項の積 $\psi(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar}$) で完全に指定される。

- 要請 2 時刻 t において位置 \mathbf{r} 近傍の微小体積要素 $d\mathbf{r} = dx dy dz$ の領域にその粒子を見出す確率は $\Psi^*(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r}$ に比例する。

定常状態では、その確率は

$$\Psi^*(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = \psi^*(\mathbf{r})e^{iEt/\hbar}\psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar} d\mathbf{r} = \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \quad (2.17)$$

に比例する。1 粒子波動関数については、粒子を全空間のどこかで見出す全確率は 1 になるはずなので、通常は

$$\iiint_{\text{全空間}} \psi_{\text{norm}}^*(\mathbf{r})\psi_{\text{norm}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \iiint_{\text{全空間}} |\psi_{\text{norm}}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1 \quad (2.18)$$

としておく。この式 (2.18) を満たす波動関数は規格化 (**normalize**) されているという。規格化波動関数は、一般に

$$\psi_{\text{norm}}(\mathbf{r}) = \left(\iiint_{\text{全空間}} |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \right)^{-1/2} \psi(\mathbf{r}) \quad (2.19)$$

で得ることができる。規格化された波動関数の場合は、粒子の存在確率は $\psi_{\text{norm}}^*(\mathbf{r})\psi_{\text{norm}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = |\psi_{\text{norm}}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$ そのものに等しくなる。

- 要請 3 観測可能なすべての物理量はそれに対応する演算子であらわされる。

量子力学においては、すべての観測可能な物理量にはそれに対応する演算子*15が存在する。代表的な物理量と演算子の対応関係を表 1*16にまとめる。

- 要請 4 ある物理量 A に対応する演算子 \hat{A} の固有関数 ϕ_n がその波動関数となっている状態に対してその物理量の観測をおこなうと、その物理量の観測値は確定し、得られる観測値は必ずその固有

*14 エネルギーの演算子に対応する固有値なのでエネルギー固有値ともいう。

*15 これはエルミート演算子である。エルミート演算子については線形代数の教科書などを参照のこと。

*16 $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ は直交座標系における単位ベクトルで、 $\mathbf{i} = (1, 0, 0)^t, \mathbf{j} = (0, 1, 0)^t, \mathbf{k} = (0, 0, 1)^t$ である。

表 1 古典的物理量とそれに対応する量子力学的演算子

物理量		演算子
位置	x	x
	\mathbf{r}	\mathbf{r}
運動量	p_x	$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$
	\mathbf{p}	$\hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i} \left(\mathbf{i} \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial z} \right)$
角運動量	$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$	$\hat{\mathbf{L}} = \frac{\hbar}{i} \left[\mathbf{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) + \mathbf{j} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) + \mathbf{k} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \right]$
運動エネルギー	E_K	$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$
ポテンシャルエネルギー	E_P	$V(\mathbf{r})$
全エネルギー	$E = E_K + E_P$	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r})$

値 a_n となる。

すなわち、

$$\hat{A}\phi_n = a_n\phi_n \quad (2.20)$$

を満たす状態 ϕ_n に対して物理量 A の測定をおこなうと、観測値として必ず a_n が得られる。^{*17}

■要請 5 固有関数でない状態に対して物理量の測定をすると、その観測値は確定せず、測定ごとに異なる観測値が得られる。どのような観測値が得られるかは確率的にしか予測できない。系の規格化波動関数が ψ_{norm} であるとき、演算子 \hat{A} に対応する物理量の観測値の平均値は

$$\langle A \rangle = \iiint_{\text{全空間}} \psi_{\text{norm}}^* \hat{A} \psi_{\text{norm}} \, d\mathbf{r} \quad (2.21)$$

で与えられる。

この $\langle A \rangle$ を物理量 A の期待値 (expectation value) という。ちなみに、波動関数 ψ が規格化されていない場合は、期待値は

$$\langle A \rangle = \frac{\iiint_{\text{全空間}} \psi^* \hat{A} \psi \, d\mathbf{r}}{\iiint_{\text{全空間}} \psi^* \psi \, d\mathbf{r}} \quad (2.22)$$

で与えられる。

^{*17} エルミート演算子の固有値は実数なので、観測値は必ず実数となる。

演習問題 2.2

下記のそれぞれの関数 f が与えられた演算子 \hat{A} の固有関数になっていることを示し、固有値を求めよ。

	\hat{A}	f
(a)	$\frac{d^2}{dx^2}$	$\cos kx$
(b)	$\frac{d}{dt}$	$e^{i\omega t}$
(c)	$\frac{d^2}{dx^2} + 2\frac{d}{dx} + 3$	$e^{\alpha x}$
(d)	$\frac{\partial}{\partial y}$	$x^2 e^{6y}$
(e)	$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$	$(\cos ax)(\cos by)(\cos cz)$

演習問題 2.3

次の演算子 \hat{A} に対する \hat{A}^2 を書き下せ。

(a) $\hat{A} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ (b) $\hat{A} = \frac{d}{dx} + x$ (c) $\hat{A} = \sin \theta \frac{d}{d\theta}$

演習問題 2.4

規格化波動関数 (2.19) が規格化条件 (2.18) を満足していることを確認せよ。

2.5 不確定性関係 (uncertainty relation)

物理量 A の観測値のばらつき、すなわち不確定性 (**uncertainty**) の大きさ ΔA (標準偏差 (**standard deviation**)) は

$$\begin{aligned} \Delta A &= \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle} = \sqrt{\langle A^2 \rangle - 2\langle A \rangle \langle A \rangle + \langle A \rangle^2} \\ &= \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} \end{aligned} \quad (2.23)$$

で与えられる。ここで、 $\langle X \rangle = \iiint_{\text{全空間}} \psi^* X \psi \, d\mathbf{r}$ は演算子 \hat{X} に対応する物理量の期待値である。

一次元の位置 x の不確定性は

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \quad (2.24)$$

で与えられ、これに対して運動量 p_x の不確定性は

$$\Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2} \quad (2.25)$$

で与えられる。

一般に、

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (2.26)$$

が成立する。これをハイゼンベルグの不確定性関係 (**Heisenberg's uncertainty relation**) という。^{*18} すなわち、ミクロな系においては、位置と運動量という二つの物理量を同時に正確に測定することは

^{*18} より一般には、互いに正準共役な関係にある演算子で表される二つの物理量の間と同様の関係が成り立つ。たとえば、

不可能ということである。これは、ミクロな系の振る舞いを規定するのが波動の一種である波動関数であることの自然な帰結である。

演習問題 2.5

物理量 X に対する固有関数 ψ_X については $\Delta X = 0$ となる（すなわち、物理量 X の観測値は確定する）ことを、式 (2.23) を使って示せ。

2.6 一次元の量子力学的系の例

2.6.1 自由粒子

一様なポテンシャル中で運動する質量 m の粒子（自由粒子 (**free particle**)) の運動を考えよう。一次元の場合のシュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad (2.27)$$

である（ポテンシャルエネルギーは 0 とおいた）。この一般解は

$$\psi_k(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (2.28a)$$

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (2.28b)$$

である。この場合には、エネルギー E_k は $E_k \geq 0$ の任意の値を取り得るので、 k は実数ならばどのような値でもよいことがわかる。ここで、定常状態の波動関数には $e^{-i\omega t}$ という時間依存性が付随している（式 (2.15) 参照）ことを思い出すと、この固有関数の第 1 項は

$$\Psi_{k+}(x, t) = A \exp[i(kx - \omega t)] \quad (2.29)$$

第 2 項は

$$\Psi_{k-}(x, t) = B \exp[-i(kx + \omega t)] \quad (2.30)$$

となり、それぞれ、 $+x$ 方向、 $-x$ 方向に伝搬する平面波であることがわかる。これらは、以下に示すように、いずれも運動量演算子 \hat{p}_x の固有関数である。

$$\hat{p}_x e^{+ikx} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} e^{+ikx} = +(\hbar k) e^{+ikx} \quad (2.31a)$$

$$\hat{p}_x e^{-ikx} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} e^{-ikx} = -(\hbar k) e^{-ikx} \quad (2.31b)$$

したがって、 Ψ_{k+} と Ψ_{k-} の運動量はそれぞれ $+\hbar k$ 、 $-\hbar k$ でその観測値に不確定性はまったくない（すなわち、 $\Delta p_x = 0$ である）。一方、粒子の存在確率は

$$(e^{ikx})^* e^{ikx} = 1 \quad (2.32a)$$

$$(e^{-ikx})^* e^{-ikx} = 1 \quad (2.32b)$$

と、いずれも座標 x に依存しない値となるので、粒子の位置がまったく予測不可能である（すなわち不確定性が無限大、つまり $\Delta x = \infty$ である）ことを示している。これは、ハイゼンベルグの不確定性関係の一例である。

y と p_y 、 z と p_z 、 E と t の間には不確定性関係が成り立つ。しかし、互いに正準共役でない組み合わせ、たとえば、 x と p_y については、同時に二つの物理量の観測値を確定させることが可能である。

ここで、波動関数 $\Psi_{k^+}(\mathbf{r}, t)$ (式 (2.29)) で表される量子力学的状態のエネルギーと運動量が、古典的な物理量とどのように対応しているかを見ておこう。この量子力学的状態の運動量 $\hbar k$ は古典的運動量 mv (v は粒子の速度^{*19}) と一致しているはずである。すなわち、

$$p_x = \hbar k = mv \quad (2.33)$$

であるから、波動関数 $\Psi_{k^+}(\mathbf{r}, t)$ の波長は

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{mv} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{p} \quad (2.34)$$

ということになる。これは、ド・ブローイの予言した物質波 (ド・ブローイ波) の波長に他ならない。また、エネルギーは

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p_x^2}{2m} \quad (2.35)$$

のように運動量と関係しており、これは古典的な関係式

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{(mv)^2}{2m} = \frac{p_x^2}{2m} \quad (2.36)$$

と完全に一致している。

演習問題 2.6

以下の物質粒子の波動関数の波長 (ド・ブローイ波長) を計算せよ。

- 速度 $v = 1.0 \text{ m/s}$ のパチンコ玉 ($m = 5.5 \text{ g}$)
- 室温 ($T = 300 \text{ K}$) での気体状態 Si 原子 ($Z = 14$) ($T = 300 \text{ K}$ での Si 原子の平均速度は $v = 475 \text{ m/s}$ である)
- 100 V の電圧で加速された電子

上述の平面波解は、われわれが慣れ親しんできた電子などの物質粒子の描像とまったく結びつかない代物である。古典物理学が支配する世界では、物質粒子はある時間にある場所に存在することがはっきりとわかっている。この素朴な古典的直感に (ある程度) 対応する量子論的な状態とはどのようなものであろうか。その例の一つがガウス波束とよばれる状態で、その規格化波動関数は

$$\Psi(x, t) = \left[\frac{1}{\pi \left(\sqrt{2}w_0 + i \frac{\hbar}{\sqrt{2}mw_0} t \right)^2} \right]^{1/4} \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{(x - x_0 - \frac{\hbar k_0}{m} t)^2}{2w_0^2 + i \frac{\hbar}{m} t} + ik_0 x - i \frac{\hbar k_0^2}{2m} t \right] \quad (2.37)$$

で与えられる。これは、時刻 t において $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx = x_0 + \frac{\hbar k_0}{m} t$ あたりに粒子が存在する状態を表している (図 10 参照)。また、この粒子の運動量期待値は $\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) dx = \hbar k_0$ である。この波動関数で表される状態の粒子は、(平均値としては、) $\langle p_x \rangle = \hbar k_0$ の運動量を持ち、 x 軸の正の方向に $v = \hbar k_0 / m = p_x / m$ で等速運動している。これは古典的な粒子の描像と一致している。

^{*19} 粒子の位置がまったくわからないのだから古典的な発想では速度など定義できないのだが、次で議論するガウス波束の場合には、ある程度、古典論とすっきりした対応を見いだすことができる。

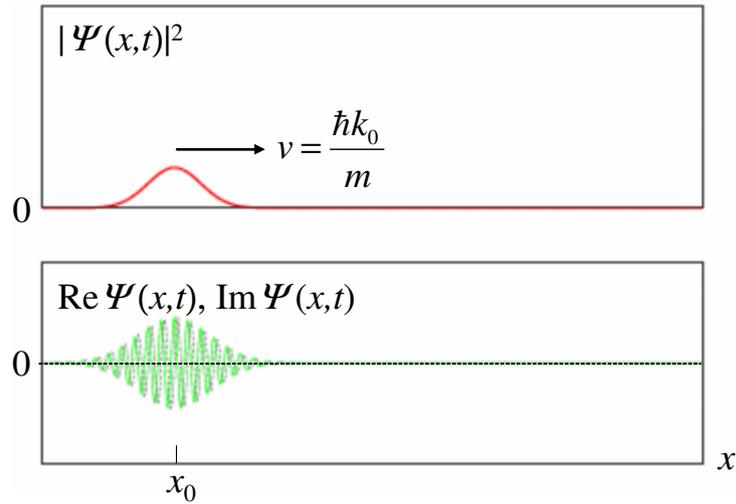


図 10 ガウス波束の $t = 0$ における波動関数と確率振幅

演習問題 2.7

ガウス波束 (2.37) の状態に対する位置の期待値 $\langle x \rangle$ と運動量の期待値 $\langle p_x \rangle$ を自力で計算してみよ。(これはかなり煩雑な計算になるが, tricky なところは一切ない。健闘を祈る。)

ただし, 古典的粒子と決定的に違い, 量子力学的に運動する粒子の位置と運動量には一定の不確定性がある。ガウス波束の場合について位置と運動量の不確定性を計算してみよう。 $\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x^2 \Psi dx = \left(x_0 + \frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2 + w_0^2 + \frac{\hbar^2}{4m^2 w_0^4} t^2$ なので,

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = w_0 \sqrt{1 + \frac{\hbar^2}{4m^2 w_0^4} t^2} \quad (2.38)$$

となる。また, $\langle p_x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\right)^2 \Psi dx = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{d^2 \Psi}{dx^2} dx = \hbar^2 k_0^2 + \frac{\hbar^2}{4w_0^2}$ なので,

$$\Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2} = \frac{\hbar}{2w_0} \quad (2.39)$$

が得られる。したがって, ガウス波束の場合には

$$\Delta x \Delta p_x = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \frac{\hbar^2}{4m^2 w_0^4} t^2} \quad (2.40)$$

が成り立っていることがわかる。 $t = 0$ ではハイゼンベルグの不確定性関係 (2.26) の下限に対応しているので, この状態を最小不確定状態とよぶことがある。

演習問題 2.8

ガウス波束に対して Δx と Δp_x を自力で導出して見よ。(これもかなりの計算力と忍耐力が必要な課題ではある。)

2.6.2 ポテンシャル障壁による自由粒子の反射

1 次元の量子力学的系のもうひとつの例として, ポテンシャル障壁

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0) \\ V_0 (> 0) & (x > 0) \end{cases} \quad (2.41)$$

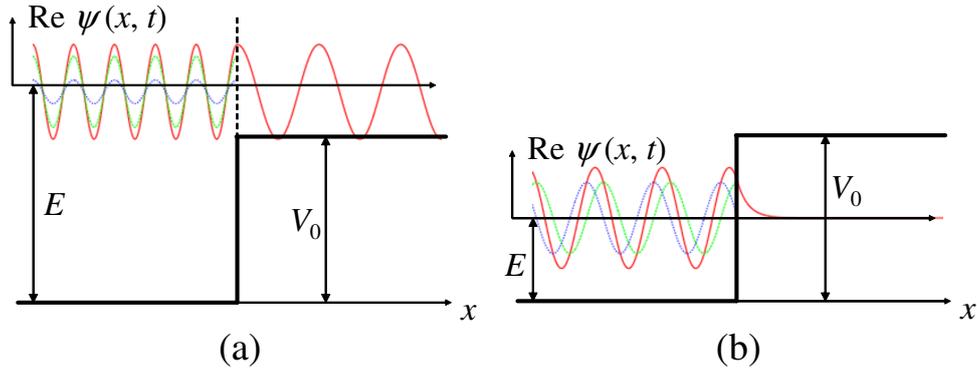


図 11 ポテンシャル障壁（高さ V_0 ）によるエネルギー E の自由粒子の反射。(a) は $E > V_0$ の場合，(b) は $E < V_0$ の場合である。

に左側 ($x = -\infty$) からエネルギー E の自由粒子が入射する場合を考えよう。

まず， $E > V_0$ の場合を考える。各領域における時間に依存しないシュレーディンガー方程式の一般解は

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} & (x < 0) \\ Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} & (x > 0) \end{cases} \quad (2.42)$$

で与えられる。ここで， $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ ， $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$ である。障壁の右側で $-x$ 方向へ進行する波はないはずなので， $D = 0$ である。第 1 式の第 1 項は入射波，第 2 項が反射波，第 2 式第 1 項が透過波である。各項の振幅 A, B, C の間の関係は， $x = 0$ での波動関数の連続条件（波動関数 $\psi(x)$ とその 1 階微分 $\frac{d\psi(x)}{dx}$ が連続^{*20}）で決定される。 $x = 0$ における連続条件は

$$\begin{cases} A + B = C \\ k_1A - k_1B = k_2C \end{cases} \quad (2.43)$$

となるので，

$$\begin{cases} B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A \\ C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A \end{cases} \quad (2.44)$$

の関係が得られる。これらの振幅係数の絶対値の 2 乗はその点で粒子が決まった方向に進行する確率を表している。運動量 $\hbar k$ の粒子の速度は $v = \hbar k / m$ で与えられるので，ある点を単位時間当たり通過する粒子数密度は，振幅係数の 2 乗にこの速度を乗じたものに比例する。よって，反射率は

$$R = \frac{k_1|B|^2}{k_1|A|^2} = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 \quad (2.45)$$

透過率は

$$T = \frac{k_2|C|^2}{k_1|A|^2} = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} \quad (2.46)$$

となる。当然のことながら， $T + R = 1$ である。

$E < V_0$ の場合についても，上と同様の手順で反射率 R を求めよう。各領域における時間に依存しないシュレーディンガー方程式の一般解は

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & (x < 0) \\ Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x} & (x > 0) \end{cases} \quad (2.47)$$

^{*20} 波動関数とその一階微分が連続でなければならないことについては，量子力学の教科書などを参考にしてほしい。

ここで、 $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, $\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$ である。 ψ は $x = \infty$ で有限でなければいけないので、 $C = 0$ である。連続条件は

$$\begin{cases} A + B = D \\ ikA - ikB = -\kappa D \end{cases} \quad (2.48)$$

となり、これより

$$B = \frac{ik + \kappa}{ik - \kappa} A \quad (2.49)$$

の関係が得られる。よって、反射率は

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = 1 \quad (2.50)$$

である。

ポテンシャル障壁による自由粒子の反射を記述する波動関数を図 11 に示す。

以上の結果より、粒子の反射率は

$$R = \begin{cases} 1 & (\rho \leq 1) \\ \left(\frac{1 - \sqrt{1 - \rho^{-1}}}{1 + \sqrt{1 - \rho^{-1}}} \right)^2 & (\rho > 1) \end{cases} \quad (2.51)$$

で与えられることがわかる。ここで、 $\rho = E/V_0$ である。図 12 に反射率 R の $\rho = E/V_0$ 依存性を示す。

古典論では、 $E > V_0$ の場合は粒子は必ずポテンシャル障壁を乗り越えて $x > 0$ の領域で $E - V_0$ の運動エネルギーで運動する。すなわち、 $T = 1$, $R = 0$ ($\rho > 1$) である。これに対して量子力学的な世界では $\rho > 1$ ($E > V_0$) でも粒子が反射される可能性があり、これが量子論の際立った特徴である。また、 $\rho < 1$ ($E < V_0$) の場合についてみると、古典論では粒子は $x > 0$ の領域に一切侵入できないが、量子論では確率振幅が指数関数的に減衰するものの、ポテンシャル障壁中に波動関数が侵入していく。これも量子論特有の現象である。

演習問題 2.9

エネルギー $E = 1.0 \text{ eV}$ の電子が障壁高さ $V_0 = 2.0 \text{ eV}$ のポテンシャル壁に入射したときの侵入深さ $l_p = 1/\kappa$ を求めよ。

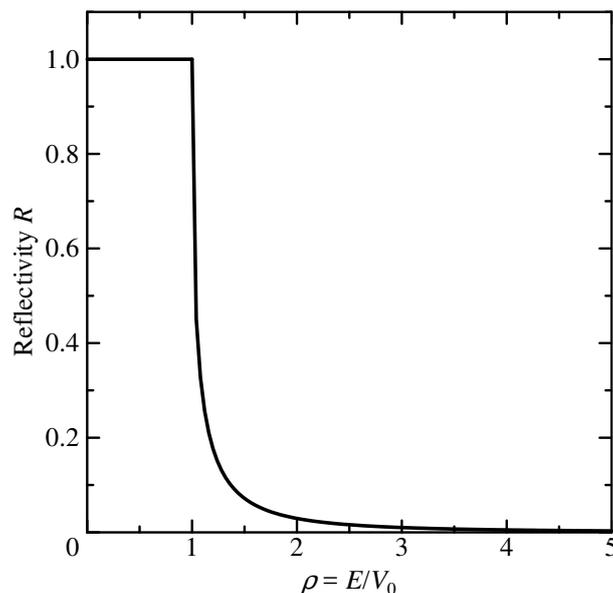


図 12 高さ V_0 のポテンシャル障壁における自由粒子（エネルギー E ）の反射率

2.6.3 トンネル効果

図 13 に示すようなポテンシャルの壁がある場合に、この壁の左側から来た粒子（そのエネルギーを E とする）がどのように運動するかを考えよう。 $E < V_0$ の場合、シュレーディンガー方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad (2.52)$$

の解は

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & (x < 0) \\ Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x} & (0 \leq x \leq a) \\ Fe^{ikx} & (a < x) \end{cases} \quad (2.53)$$

となる。ここで、

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (2.54)$$

である。境界 $x = 0$ と $x = a$ で、 $\psi(x)$ と $\frac{d\psi(x)}{dx}$ が連続でなければならないことから、

$$A + B = C + D \quad (2.55a)$$

$$ik(A - B) = \kappa(C - D) \quad (2.55b)$$

$$Ce^{\kappa a} + De^{-\kappa a} = Fe^{ika} \quad (2.55c)$$

$$\kappa Ce^{\kappa a} - \kappa De^{-\kappa a} = ikFe^{ika} \quad (2.55d)$$

が成り立つ。若干の計算の後、

$$T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \left[1 + \frac{\left(e^{\sqrt{1-\rho}\varepsilon} - e^{-\sqrt{1-\rho}\varepsilon} \right)^2}{16\rho(1-\rho)} \right]^{-1} \quad (2.56)$$

が得られる。ここで、 $\varepsilon = \frac{\sqrt{2mV_0a}}{\hbar}$ 、 $\rho = \frac{E}{V_0}$ である。これは、粒子が壁を通り抜けて右側に漏れ出す確率（透過確率）を表している。量子力学的な系では、 $E < V_0$ の場合でもこの透過確率がゼロではない。これをトンネル現象 (**tunneling**) という。図 14 にトンネル確率 T を $\rho = E/V_0$ の関数としてプ

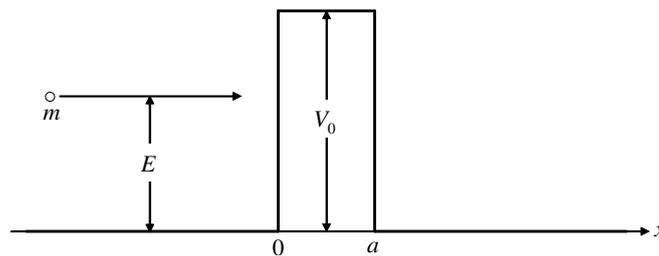


図 13 質量 m エネルギー E の粒子が、高さ V_0 厚さ a のポテンシャル障壁に左から入射する。

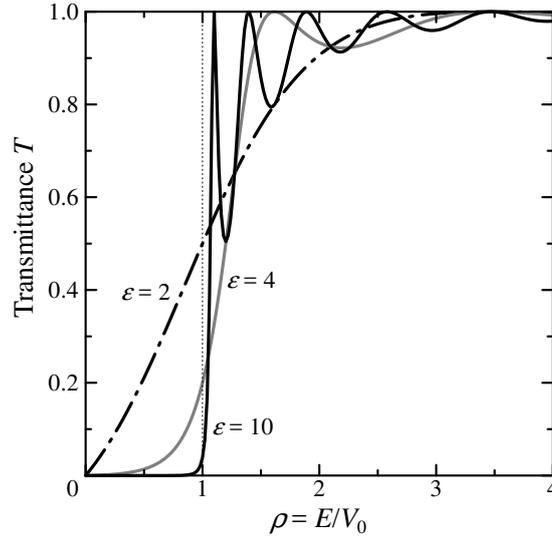


図 14 障壁を通過するトンネル確率。横軸は入射粒子のエネルギーと障壁高さの比。障壁の高さと厚さを表す $\varepsilon = \frac{\sqrt{2mV_0a}}{\hbar}$ をパラメータとしてプロットしてある。

ロットした ($\rho > 1$ ^{*21}についても示した)。障壁が高く、厚い場合 ($\varepsilon = \frac{\sqrt{2mV_0a}}{\hbar} > 1$) には、

$$\begin{aligned} T &\approx 16\rho(1-\rho)e^{-2\sqrt{1-\rho\varepsilon}} = 16\rho(1-\rho)e^{-2\kappa a} \\ &= 16\rho(1-\rho)\exp\left[-\frac{2\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}a\right] \end{aligned} \quad (2.58)$$

となる。トンネル確率 T は、障壁の厚さ a と粒子の質量 m 、エネルギー差 $V_0 - E$ が大きくなると指数関数的に減少する。

2.6.4 1次元周期ポテンシャル

原子が規則正しく配列した結晶中での電子の振る舞いを理解ために、もっとも単純なモデルとして1次元周期ポテンシャルを調べてみよう。図 15 のような、幅 b 、高さ V_0 のポテンシャル障壁が幅 a のポテンシャル井戸で隔てられた周期 $d = a + b$ の1次元周期ポテンシャルを考える。ここにエネルギー E ($0 < E < V_0$) の電子が入射した場合について以下考察する（これは Kronig-Penney モデルとして知られているものである）。

このような周期ポテンシャル中の電子の波動関数は以下のように書くことができることが知られている。

$$\psi_k(x) = u_k(x)e^{ikx} \quad (2.59)$$

ここで、 $u_k(x)$ は周期 d の周期関数である。すなわち、

$$u_k(x+d) = u_k(x) \quad (2.60)$$

の関係が成り立つ。これを用いると、

$$\psi_k(x+d) = u_k(x+d)e^{ik(x+d)} = u_k(x)e^{ikx}e^{ikd} = e^{ikd}\psi_k(x) \quad (2.61)$$

^{*21} $E > V_0$ の場合には

$$T = \left[1 + \frac{\sin^2(\sqrt{\rho-1}\varepsilon)}{4\rho(\rho-1)}\right]^{-1} \quad (2.57)$$

である。

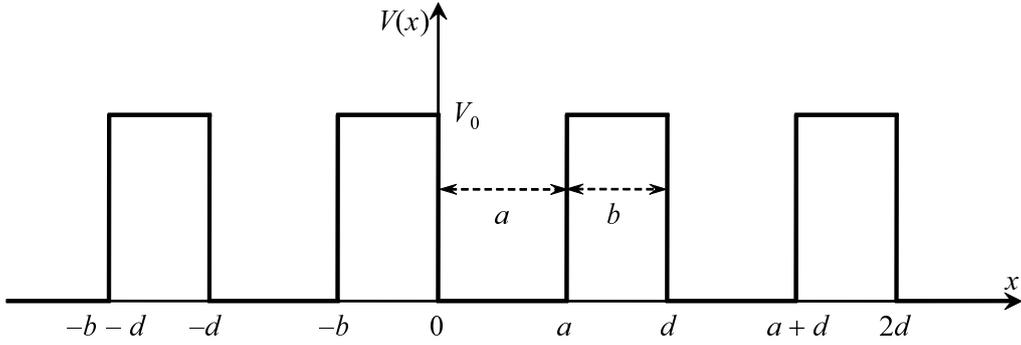


図 15 周期 d の周期ポテンシャル

となることがわかる。これを **Bloch** の定理という。

Bloch の定理を用いて周期ポテンシャル中の電子の運動について調べてみよう。電子の波動関数は

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x} & (-b \leq x < 0) \\ Ce^{iKx} + De^{-iKx} & (0 \leq x < a) \end{cases} \quad (2.62)$$

で与えられる。ここで、

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (2.63a)$$

$$K = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (2.63b)$$

である。Bloch の定理を用いると、

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikd} [Ae^{\kappa(x-d)} + Be^{-\kappa(x-d)}] & (a \leq x < d) \\ e^{ikd} [Ce^{iK(x-d)} + De^{-iK(x-d)}] & (d \leq x < a+d) \end{cases} \quad (2.64)$$

でなければならないことがわかる。 $x = 0, x = a$ での波動関数の接続条件から、

$$A + B = C + D \quad (2.65a)$$

$$\kappa(A - B) = iK(C - D) \quad (2.65b)$$

$$e^{ikd}(Ae^{-\kappa b} + Be^{\kappa b}) = Ce^{iKa} + De^{-iKa} \quad (2.65c)$$

$$e^{ikd}\kappa(Ae^{-\kappa b} - Be^{\kappa b}) = iK(Ce^{iKa} - De^{-iKa}) \quad (2.65d)$$

が得られる。これを整理すると、

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ \kappa & -\kappa & -iK & iK \\ e^{ikd-\kappa b} & e^{ikd+\kappa b} & -e^{iKa} & -e^{-iKa} \\ \kappa e^{ikd-\kappa b} & -\kappa e^{ikd+\kappa b} & -iKe^{iKa} & iKe^{-iKa} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = 0 \quad (2.66)$$

となる。これが自明でない解を持つためには、

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ \kappa & -\kappa & -iK & iK \\ e^{ikd-\kappa b} & e^{ikd+\kappa b} & -e^{iKa} & -e^{-iKa} \\ \kappa e^{ikd-\kappa b} & -\kappa e^{ikd+\kappa b} & -iKe^{iKa} & iKe^{-iKa} \end{vmatrix} = 0 \quad (2.67)$$

でなければならない。長い長い計算をおこなうと、この条件は

$$\cos(ka) = \frac{\kappa^2 - K^2}{2\kappa K} \sinh(\kappa b) \sin(Ka) + \cosh(\kappa b) \cos(Ka) \quad (2.68)$$

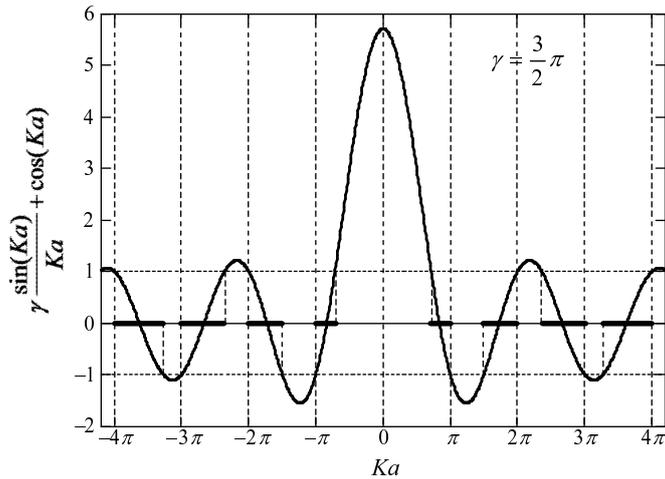


図 16 $\gamma = 3\pi/2$ の場合の関数 $\gamma \frac{\sin(Ka)}{Ka} + \cos(Ka)$ 。太い実線で示した領域の K の値のみが許される。

と書き換えられる。もちろん、 $-1 \leq \cos(ka) \leq 1$ でなければならないので、 κ と K の値に、すなわち、エネルギー E の値に一定の制限がつくことになる。

このことを具体的に見るために、ポテンシャル障壁の幅 b が小さくなった極限の場合を考えよう。 $\kappa^2 b$ を一定に保ったまま $b \rightarrow 0, V_0 \rightarrow \infty$ としたとき、式 (2.68) は

$$\cos(ka) = \gamma \frac{\sin(Ka)}{Ka} + \cos(Ka) \quad (2.69)$$

となる。ここで、 $\gamma = \lim_{b \rightarrow 0, \kappa \rightarrow \infty} \kappa^2 ab/2$ である。この式の右辺の関数 $\gamma \frac{\sin(Ka)}{Ka} + \cos(Ka)$ を、 $\gamma = 3\pi/2$ の場合について図 16 にプロットした。図中の太い実線で示した領域の K の値に対してのみ $-1 \leq \gamma \frac{\sin(Ka)}{Ka} + \cos(Ka) \leq 1$ が満たされる。これに対応するエネルギー $E = \hbar^2 K^2/2m$ を電子の結晶運動量 (crystal momentum) k に対してプロットした分散関係を図 17 に示す。周期ポテンシャル中を

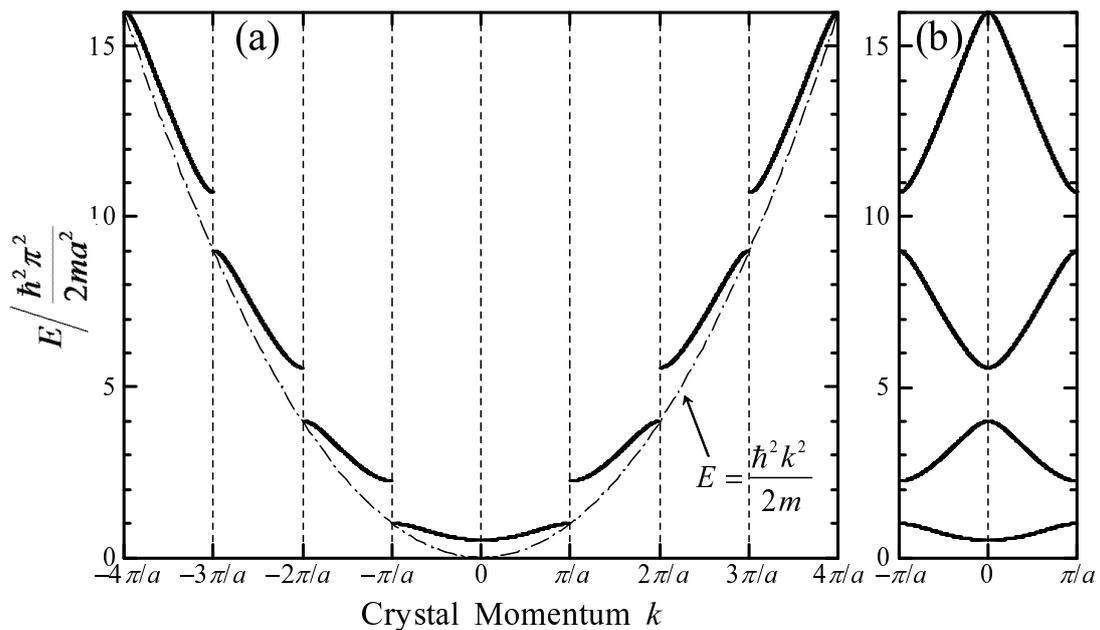


図 17 Kronig-Penney ポテンシャル ($\gamma = 3\pi/2$) 中の電子の分散関係。(a) は拡張ゾーン形式、(b) は還元ゾーン形式でプロットした。(a) の一点鎖線は自由電子の分散関係を示している。

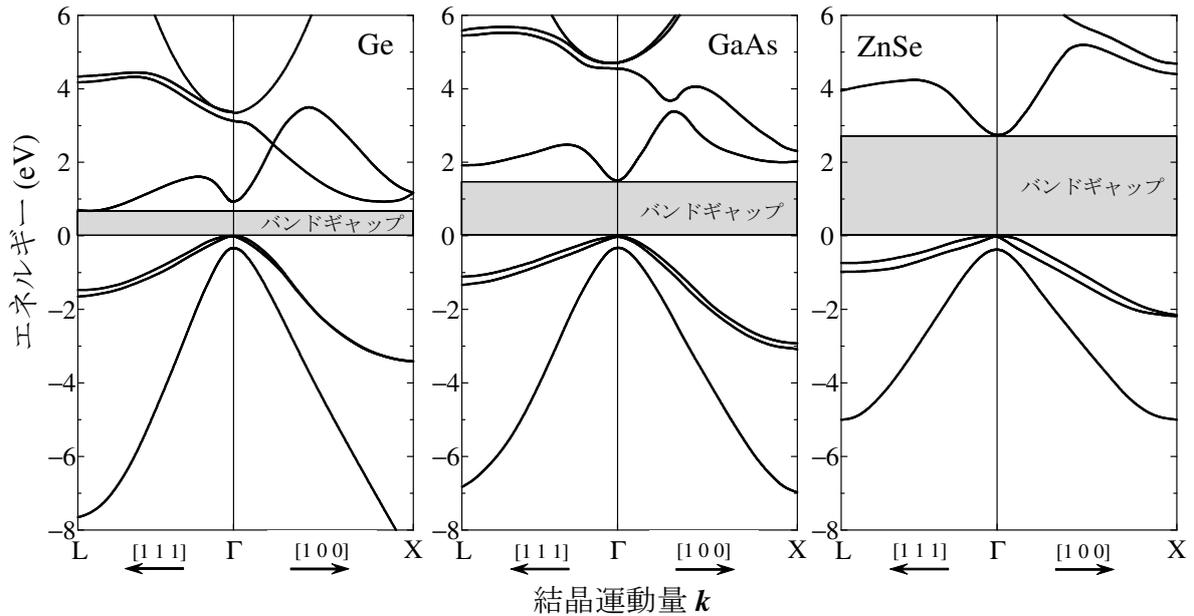


図 18 Ge, GaAs, ZnSe のバンド構造

運動する電子のエネルギーにはある一定の幅の存在し得ない領域が存在する。これは、結晶運動量 k が π/a の整数倍の点での分散関係の不連続な飛びに対応している。これを禁制帯 (**forbidden band**), あるいはエネルギーギャップ (**energy gap**), バンドギャップ (**band gap**) とよぶ。これに対して、電子が持つエネルギーが存在し得る範囲を許容帯 (**allowed band**) という。このように、周期ポテンシャル中の電子のエネルギーには、特有のエネルギーバンド構造 (**energy-band structure**) が生じる。

演習問題 2.10

結晶のバンドギャップエネルギーの大きさは、図 17 から、 $\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$ 程度の大きさであることがわかる。 $a = 0.3 \text{ nm}$ としてこのエネルギーの大きさを見積もれ。

ところで、Kronig-Penney ポテンシャル中の電子の分散関係を記述する式 (2.69) において、

$$\cos \left[\left(k \pm \frac{2n\pi}{a} \right) a \right] = \cos (ka \pm 2n\pi) = \cos(ka) \quad (2.70)$$

なので、結晶運動量 k は $2\pi/a$ の整数倍だけ増減してもかまわないことがわかる。そこで、図 17(a) の分散関係のグラフの横軸を $2\pi/a$ の整数倍だけ動かして、図 17(b) のようにすべて $-\pi/a < k \leq \pi/a$ の領域 (この領域を第一ブリルアンゾーンという) に集めてしまう表し方が広く使われている。この表示法を還元ゾーン形式という。

ここで議論した事柄は、結晶中での電子の振る舞いと密接に関係している。Bloch の定理は、結晶中においても電子はほぼ自由に (平面波的に) 動き回れることを意味している。また、Bloch 電子は特有のエネルギー構造をとり、これが結晶における各種の基本的物性を決定づける電子状態、すなわちエネルギーバンド構造に対応している。典型的な半導体材料である Ge と GaAs, ZnSe のバンド構造を図 18 にしめす。

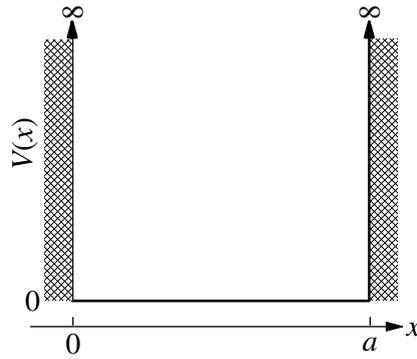


図 19 無限大障壁井戸型ポテンシャル

2.6.5 一次元井戸型ポテンシャル中の電子

量子力学的な系の一例として、図 19 のような一次元ポテンシャル中の電子の運動について考えよう。このような構造を量子井戸 (**quantum well**) とよぶ。ポテンシャルの低い部分を井戸 (**well**)、ポテンシャルの高い（この場合には無限大）部分を障壁 (**barrier**) という。

ポテンシャル井戸 ($0 \leq x \leq a$) では電子は自由粒子 (**free particle**) として振舞い、そのシュレーディンガー方程式は

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0 \quad 0 \leq x \leq a \quad (2.71)$$

である。障壁領域のポテンシャルは $+\infty$ でこの領域に電子が存在する確率は 0 であるので、 $x < 0$ 、 $a < x$ では $\psi(x) = 0$ でなければならない。また、波動関数 $\psi(x)$ は電子の位置の目安であるので、 $\psi(x)$ は一価でかつ連続でなければならない。すなわち、

$$\psi(0) = \psi(a) = 0 \quad (2.72)$$

である。これがこの問題に課される境界条件である。

式 (2.71) の一般解は

$$\psi(x) = A \cos kx + B \sin kx \quad (2.73)$$

である。ここで、

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{2\pi\sqrt{2mE}}{h} \quad (2.74)$$

である。境界条件 $\psi(0) = 0$ より $A = 0$ 、 $\psi(a) = 0$ より

$$\psi(a) = B \sin ka = 0 \quad (2.75)$$

すなわち、

$$ka = n\pi \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.76)$$

が得られる。式 (2.74) を用いると

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{8ma^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.77)$$

となる。エネルギー固有値 E_n に対応する固有関数は

$$\psi_n(x) = B \sin \frac{n\pi x}{a} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.78)$$

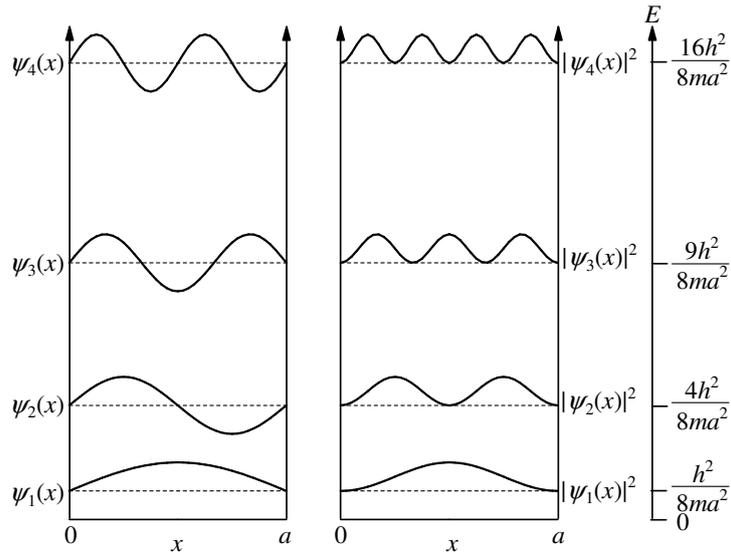


図 20 無限大障壁井戸型ポテンシャル中のエネルギー準位と波動関数 $\psi_n(x)$ (左) および確率密度 $|\psi_n(x)|^2$ (右)

である。電子を x と $x + dx$ の間に見いだす確率は $\psi_n^*(x)\psi_n(x) dx$ なので、

$$\int_0^a \psi_n^*(x)\psi_n(x) dx = |B|^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx = 1 \quad (2.79)$$

でなければならない。 $\int_0^a \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx = a/2$ なので、 $B = \sqrt{2/a}$ となる。結局、規格化波動関数 (normalized wavefunction) は

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.80)$$

となる。量子井戸中の電子のエネルギーは離散的 (discrete) な値しかとれない。このような状態を、この系の電子のエネルギーが量子化されている (quantized) という。式 (2.77), (2.78) に現れる整数 n は量子数 (quantum number) とよばれる。各固有状態のエネルギーレベルと波動関数 $\psi_n(x)$, 確率密度 $|\psi_n(x)|^2$ を図 20 にしめす。

この量子井戸中の電子の位置の期待値は

$$\langle x \rangle = \int_0^a \psi_n^*(x) x \psi_n(x) dx = \frac{2}{a} \int_0^a x \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx = \frac{a}{2} \quad (2.81)$$

となる。ここで、 $\int_0^a x \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx = a^2/4$ をもちいた。この結果は物理的に妥当なものである。一方、運動量 p_x (対応する演算子は $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$) の期待値は

$$\langle p_x \rangle = \int_0^a \psi_n^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi_n(x) dx = \frac{\hbar}{i} \frac{2\pi n}{a^2} \int_0^a \sin \frac{n\pi x}{a} \cos \frac{n\pi x}{a} dx = 0 \quad (2.82)$$

となる。固有関数 (2.78) は右向きに進行する平面波 $\frac{B}{2i} \exp(i\frac{n\pi}{a}x)$ と左向きに進行する平面波 $-\frac{B}{2i} \exp(-i\frac{n\pi}{a}x)$ の重ねあわせなので、この結果も極めて妥当である。

量子井戸中の電子について位置の不確定性を計算しよう。

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2}{a} \int_0^a x^2 \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx = \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2n^2\pi^2} \quad (2.83)$$

なので、位置の不確定性は

$$\Delta x = \frac{a}{2\pi n} \sqrt{\frac{\pi^2 n^2}{3} - 2} \quad (2.84)$$

となる。一方、

$$\langle p_x^2 \rangle = \int_0^a \psi_n^*(x) \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi_n(x) dx = \frac{2n^2 \pi^2 \hbar^2}{a^3} \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{a^2} \quad (2.85)$$

なので、運動量の不確定性は

$$\Delta p_x = \frac{n\pi\hbar}{a} \quad (2.86)$$

となる。式 (2.84), (2.86) は、井戸幅が広がると位置の不確定性が a に比例して大きくなり、同時に、運動量の不確定性が a に反比例して小さくなることを示している。この量子井戸では

$$\Delta x \Delta p_x = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{\pi^2 n^2}{3} - 2} \quad (2.87)$$

が成り立つ。

演習問題 2.11

井戸幅 $a = 10 \text{ \AA}$ の 1 次元量子井戸中の電子の基底状態 ($n = 1$) と第一励起状態 ($n = 2$) 間のエネルギー差 (励起エネルギー) を求めよ。これに対応する光の波長、波数はいくらになるか。

演習問題 2.12

井戸幅 $a = 5.0 \text{ cm}$ の 1 次元量子井戸中のパチンコ玉 (質量 $m = 5.5 \text{ g}$) のエネルギー準位について論ぜよ。

異なる半導体材料を原子レベルで接合した半導体ヘテロ構造の技術が究極まで進歩しており、これを用いて様々な量子効果デバイスが作製されている。特に、半導体レーザーなどの光デバイスの分野では、量子化によるエネルギー変化やそれに伴う数々の好ましい特性変化がデバイスの特性向上に積極的に利用されている。

3 マクスウェル方程式と電磁波・光

3.1 数学的準備—ベクトル場の発散と回転

任意のベクトル場 $\mathbf{h}(\mathbf{r})$ の流束を以下のように定義する。

$$(\text{流束}) = \iint_{\text{閉曲面 } S} \mathbf{h} \cdot \mathbf{n} da \quad (3.1)$$

ここで、積分は体積 V の領域を取り囲む閉曲面 S 上の表面積すべてにわたっておこない、 da は閉曲面上の点の微小面積要素、 \mathbf{n} はその点での閉曲面 S に対する (外向きの) 法線単位ベクトルである (図 21 左を参照のこと)。ベクトル \mathbf{h} が流体の速度ベクトルならば、これはこの領域から表面を通して流れ出す流体の総量を与える。考えている領域の体積を無限に小さくしていった極限 (すなわち、流束の体積密度)

$$\text{div } \mathbf{h} = \nabla \cdot \mathbf{h} = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{1}{V} \iint_{\text{閉曲面 } S} \mathbf{h} \cdot \mathbf{n} da \quad (3.2)$$

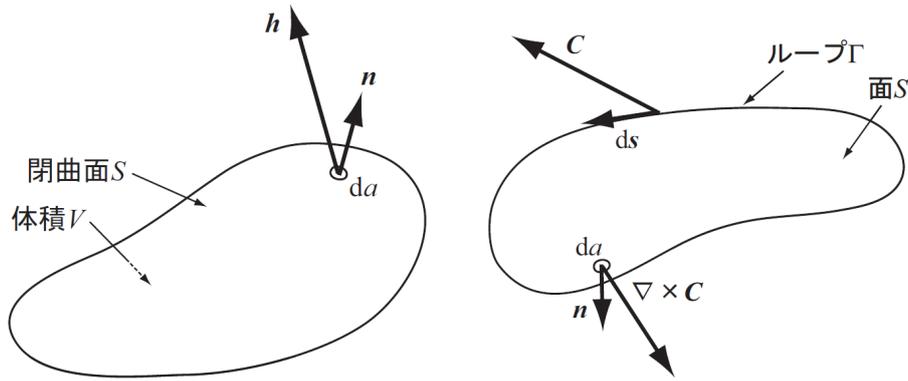


図 21 左: 平曲面 S 上の \mathbf{h} の法線成分の面積分をベクトル場 $\mathbf{h}(\mathbf{r})$ の流束という。これは閉曲面内の体積 V での $\nabla \cdot \mathbf{h}$ の体積積分に等しい。右: ループ Γ 上の \mathbf{C} の接線成分の線積分を $\mathbf{C}(\mathbf{r})$ の循環という。これは閉曲線内の平面での $\nabla \times \mathbf{C}$ の法線成分の面積分に等しい。

を、このベクトル場 $\mathbf{h}(\mathbf{r})$ の点 \mathbf{r} における発散 (divergence) とよぶ。直交座標系では、発散は

$$\nabla \cdot \mathbf{h} = \frac{\partial h_x}{\partial x} + \frac{\partial h_y}{\partial y} + \frac{\partial h_z}{\partial z} \quad (3.3)$$

で与えられる。発散 $\nabla \cdot \mathbf{h}$ がある点で正の値を持てば、そこから流れ出す流束は正であり、この点をわき出しとよぶ。これに対して、 $\nabla \cdot \mathbf{h}$ が負になる点を吸い込みという。式 (3.1) の流束は

$$\iint_{\text{閉曲面 } S} \mathbf{h} \cdot \mathbf{n} \, da = \iiint_{S \text{ 内の体積 } V} \nabla \cdot \mathbf{h} \, dV \quad (3.4)$$

のように、発散の体積積分と等しい (ガウスの定理 (Gauss's theorem))。

ベクトル場 $\mathbf{C}(\mathbf{r})$ の循環は次の式で定義される。

$$(\text{循環}) = \oint_{\text{ループ } \Gamma} \mathbf{C} \cdot d\mathbf{s} \quad (3.5)$$

ここで、積分はある面 S を取り囲むループ Γ 上で一周にわたって実行し、 $d\mathbf{s}$ はループの接線方向を向いた微小線要素である (図 21 右を参照)。ベクトル \mathbf{C} が流体の速度ベクトルならば、これはこの領域の周囲の流れの循環 (渦量) を与え、ベクトルがどれほど渦的 (回転的) であるかを与える指標となっている。この領域の面積を小さくした極限 (すなわち、循環の面積密度) から

$$(\text{rot } \mathbf{C}) \cdot \mathbf{n} = (\nabla \times \mathbf{C}) \cdot \mathbf{n} = \lim_{S \rightarrow 0} \frac{1}{S} \oint_{\text{ループ } \Gamma} \mathbf{C} \cdot d\mathbf{s} \quad (3.6)$$

で定義されるベクトル量 $\nabla \times \mathbf{C}$ を、このベクトル場 $\mathbf{C}(\mathbf{r})$ の点 \mathbf{r} における回転 (rotation) という。その大きさはその点 \mathbf{r} でのベクトル場 \mathbf{C} の回転性を表し、その向きは回転面に対して垂直 (右ねじの進行方向) となる。直交座標系では、回転は

$$\nabla \times \mathbf{C} = \left(\frac{\partial C_z}{\partial y} - \frac{\partial C_y}{\partial z} \right) \mathbf{i} + \left(\frac{\partial C_x}{\partial z} - \frac{\partial C_z}{\partial x} \right) \mathbf{j} + \left(\frac{\partial C_y}{\partial x} - \frac{\partial C_x}{\partial y} \right) \mathbf{k} = \begin{pmatrix} \frac{\partial C_z}{\partial y} - \frac{\partial C_y}{\partial z} \\ \frac{\partial C_x}{\partial z} - \frac{\partial C_z}{\partial x} \\ \frac{\partial C_y}{\partial x} - \frac{\partial C_x}{\partial y} \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

で与えられる。式 (3.5) の循環は、以下のように、回転の面積分に等しい (ストークスの定理 (Stokes's theorem))。

$$\oint_{\text{ループ}\Gamma} \mathbf{C} \cdot d\mathbf{s} = \iint_{\Gamma\text{内の平面 } S} (\nabla \times \mathbf{C}) \cdot \mathbf{n} \, da \quad (3.8)$$

実は、ベクトル場の回転の直感的理解には以下の関係式 (なぜか名前がついていないのだが...) の方がより有用である。

$$\iint_{\text{閉曲面 } S} \mathbf{n} \times \mathbf{C} \, da = \iiint_{S\text{内の体積 } V} \nabla \times \mathbf{C} \, dV \quad (3.9)$$

演習問題 3.1

次のベクトル場を図示し、それぞれ、 $\nabla \cdot \mathbf{A}$ と $\nabla \times \mathbf{A}$ を計算せよ。

$$1) \mathbf{A}(\mathbf{r}) = vx\mathbf{i} + vy\mathbf{j} + vz\mathbf{k} = v \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$2) \mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\omega y\mathbf{i} + \omega x\mathbf{j} = \omega \begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix}$$

3.2 マクスウェル方程式

電磁気学の基本法則であるマクスウェル (Maxwell) 方程式は、以下のような微分形式でまとめられる。

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (3.10a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (3.10b)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (3.10c)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{i} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (3.10d)$$

ここで、 \mathbf{E} は電場 (electric field), \mathbf{D} は電束密度 (electric flux density), \mathbf{H} は磁場 (magnetic field), \mathbf{B} は磁束密度 (magnetic flux density), ρ は電荷密度 (charge density), \mathbf{i} は電流密度 (current density) である。式 (3.10a) はガウス (Gauss) の法則, 式 (3.10b) は磁束密度に対するガウスの法則で磁気単極子が存在しないことを意味し, 式 (3.10c) はファラデー (Faraday) の電磁誘導の法則, 式 (3.10d) はアンペール (Ampère) の法則である。

ガウスの定理とストークスの定理を用いると、微分形式の式 (3.10a)–(3.10d) は、以下のように積分

形式に書き直すことができる。

$$\iint_{\text{閉曲面 } S} \mathbf{D} \cdot \mathbf{n} \, da = \iiint_{S \text{ 内の体積 } V} \rho \, dV \quad (3.11a)$$

$$\iint_{\text{閉曲面 } S} \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} \, da = 0 \quad (3.11b)$$

$$\oint_{\text{ループ } \Gamma} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{s} = -\frac{d}{dt} \iint_{\Gamma \text{ 内の平面 } S} \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} \, da \quad (3.11c)$$

$$\oint_{\text{ループ } \Gamma} \mathbf{H} \cdot d\mathbf{s} = \iint_{\Gamma \text{ 内の平面 } S} \mathbf{i} \cdot \mathbf{n} \, da + \frac{d}{dt} \iint_{\Gamma \text{ 内の平面 } S} \mathbf{D} \cdot \mathbf{n} \, da \quad (3.11d)$$

すなわち、

$$\text{閉曲面を貫く } \mathbf{D} \text{ の流束} = \text{閉曲面内の全電荷} \quad (3.12a)$$

$$\text{閉曲面を貫く } \mathbf{B} \text{ の流束} = 0 \quad (3.12b)$$

$$\text{閉曲線の周りの } \mathbf{E} \text{ の循環} = -\frac{d}{dt} (\text{閉曲線内を貫く } \mathbf{B} \text{ の流束}) \quad (3.12c)$$

$$\text{閉曲線の周りの } \mathbf{H} \text{ の循環} = \text{閉曲線内を通る全電流} + \frac{d}{dt} (\text{閉曲線内を貫く } \mathbf{D} \text{ の流束}) \quad (3.12d)$$

である。

演習問題 3.2

マクスウェル方程式（積分型）(3.11a) を用いて、電荷 Q の点電荷（大きさは無視してよい）の周囲の電場分布を計算せよ。ただし、電荷は真空中に置かれているとし、 $\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \epsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r})$ の関係があることを使ってよい。

演習問題 3.3

マクスウェル方程式（積分型）(3.11d) を用いて、電流 I の流れる直線状導線（太さは無視してよい）の周囲の磁場分布を計算せよ。

3.3 物質の電磁場に対する応答

物質は電子や陽子などの電荷を持つ粒子によって構成されている。これらの電荷は、外界から印加された電場・磁場の影響を受けて運動する。静電場や静磁場が印加された場合、物質中の荷電粒子は若干の過渡的運動の後、適当な平衡位置に落ち着くであろう。^{*22} その平衡位置は外場のない場合と比べて変位しているに違いない。その結果、物質中には電荷の偏りによる微視的な電気双極子や、微視的な磁気双極子モーメントが発生する。これらの電気・磁気双極子モーメントは新たな電場・磁場を発生させる。物質中の電磁場は、結局、外から印加された電磁場と物質内の各双極子モーメントの作る付加的な電磁場の総和となる。

まず、誘電体の電場に対する応答を考えよう。外部から誘電体に電場が印加されると、クーロン力によって物質中の電荷が変位し、微視的な電気双極子モーメントが発生する。固体中では、物質を構

^{*22} ここでは、金属中の伝導電子は考慮していないことに注意。以下では、誘電体の電場・磁場に対する応答と磁性体の磁場に対する応答についてのみ議論していることになる。

成する原子の原子核（正の荷電粒子）と電子（負の荷電粒子）が互いに逆の方向に変位し、電気双極子モーメントの源となる。極性分子の気体や液体では、これに加えて、極性分子の向きが電場の方向へ配向するという効果も微視的双極子モーメントに寄与する。巨視的に見た物質の応答は、個々の原子や分子の持つ微視的な電気双極子を平均化したもので議論することができる。個々の微視的電気双極子モーメントを \mathbf{p}_i としたとき、その体積密度

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \lim_{\delta V \rightarrow 0} \frac{1}{\delta V} \sum_i \mathbf{p}_i \quad (3.13)$$

を電気分極 (**electric polarization**)、あるいは単に分極 (**polarization**) とよぶ。電束密度は、一般に以下の式で定義される。

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \epsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}) + \mathbf{P}(\mathbf{r}) \quad (3.14)$$

ここで、 $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} \text{ C}/(\text{V} \cdot \text{m})$ は真空の誘電率である。電束密度はマクスウェル方程式の第一式（式 (3.10a)）によって規定されているので、真電荷 ρ の分布によってのみ決定される。これに分極の影響が付加されたものが電場 $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ であり、これが荷電粒子に対するクーロン力の源泉である。

電場がそれほど強くない範囲では、次のように、分極 \mathbf{P} は電場 \mathbf{E} に比例するとみなしてよい。^{*23}

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \epsilon_0 \chi(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) \quad (3.15)$$

ここで、 χ は電気感受率 (**electric susceptibility**) とよばれる量で、通常の誘電体の場合、1~10 程度の大きさとなる。^{*24}この場合は、式 (3.14) は、

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \epsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}) + \epsilon_0 \chi \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \epsilon_0 (1 + \chi) \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \epsilon_0 \epsilon_r \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \epsilon \mathbf{E}(\mathbf{r}) \quad (3.16)$$

と書ける。ここで、

$$\epsilon_r = 1 + \chi \quad (3.17)$$

は物質の比誘電率 (**relative dielectric constant**)、

$$\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r = \epsilon_0 (1 + \chi) \quad (3.18)$$

は物質の誘電率 (**dielectric constant**) である。

磁性体の磁場に対する応答についてもほぼ同様の議論が可能である。外部磁場によって物質中に誘起された微視的な磁気双極子モーメント \mathbf{m}_i の体積平均

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \lim_{\delta V \rightarrow 0} \frac{1}{\delta V} \sum_i \mathbf{m}_i \quad (3.19)$$

を磁化 (**magnetization**) という。磁束密度は、一般に以下の式で定義される。

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \mu_0 \mathbf{H}(\mathbf{r}) + \mathbf{M}(\mathbf{r}) \quad (3.20)$$

ここで、 $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ H}/\text{m}$ は真空の透磁率である。常磁性体中では、

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \mu_0 \chi_m(\mathbf{r}) \mathbf{H}(\mathbf{r}) \quad (3.21)$$

^{*23} 電場が強くなるとこの比例関係は成り立たなくなる。特に、レーザー光のような強い電磁波（光）は極めて強い電場を物質に印加するので、線形からのずれ＝非線形性 (**nonlinearity**) が重要な役割を果たすことになる。これを扱う学問・技術分野を非線形光学 (**nonlinear optics**) という。

^{*24} 強誘電体や水などでは、低周波領域でこの値が $10^2 \sim 10^4$ のオーダーにもなる。光のような高周波領域では、どのような物質に対しても、 $\chi \approx 10^0 \sim 10^1$ 程度である。

のように、磁化 \mathbf{M} は磁場 \mathbf{H} に比例する。ここで、 χ_m は磁気感受率 (**magnetic susceptibility**) とよばれる量である。^{*25} 磁束密度 \mathbf{B} と磁場 \mathbf{H} の間には、

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \mu_0 \mathbf{H}(\mathbf{r}) + \mu_0 \chi_m \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mu_0 (1 + \chi_m) \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mu_0 \mu_r \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mu \mathbf{H}(\mathbf{r}) \quad (3.22)$$

の関係が成り立つ。ここで、

$$\mu_r = 1 + \chi_m \quad (3.23)$$

は物質の比透磁率 (**relative magnetic permeability**),

$$\mu = \mu_0 \mu_r = \mu_0 (1 + \chi_m) \quad (3.24)$$

は物質の透磁率 (**magnetic permeability**) である。

3.3.1 物質の電磁応答の応用—キャパシタ

面積 S の 2 枚の平板電極が間隔 d で互いに平行に配された平行平板コンデンサについて考えよう。上部の電極が $+Q$ に、下部の電極が $-Q$ に帯電している場合を考えて、このコンデンサの静電容量 C を計算しよう。面積 S が十分に大きく、かつ、間隔 d が十分に小さい場合、電極中央付近では電場は電極に垂直な成分しか持たないと考えてよい。マクスウェル方程式 (積分型) (3.11a) を用いると、電場は電極間にしか存在せず、その大きさは電極間のどの場所でも一様で

$$E = \frac{Q}{\epsilon S} \quad (3.25)$$

となることがわかる。電極間の電位差 (電圧) は

$$V = Ed = \frac{Qd}{\epsilon S} \quad (3.26)$$

であるので、このキャパシタの静電容量は

$$C = \frac{Q}{V} = \frac{\epsilon S}{d} \quad (3.27)$$

となる。平行平板コンデンサの静電容量が電極間の誘電体の誘電率に比例するのは、誘電体内に誘起される電気分極が誘電体表面に作る分極電荷 $\sigma_P = P = \epsilon_0 \chi E = \epsilon_0 (\epsilon_r - 1) E$ が外部から印加された電場を弱める効果 (遮蔽効果) に起因している。

3.4 電磁波と光

3.4.1 真空中の電磁波・光

まず最初に、真空中でのマクスウェル方程式の解について考えてみよう。真空中では、

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} \quad (3.28a)$$

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} \quad (3.28b)$$

^{*25} 常磁性体の場合、たかだか $\chi_m \approx 10^{-4}$ 程度であるが、強磁性体では $\chi_m \approx 10^3 \sim 10^5$ となる。

の関係が成り立つ。また、当然、 $\rho = 0$, $\mathbf{i} = 0$ である。この場合のマクスウェル方程式は

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0 \quad (3.29a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (3.29b)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (3.29c)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (3.29d)$$

となる。

式 (3.29c) の両辺に $\nabla \times$ をかけ、式 (3.29d) を用いると

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = -\frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{B} = -\epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \quad (3.30)$$

となる。ベクトル恒等式

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A} \quad (3.31)$$

を左辺に適用し、式 (3.29a) を用いると、波動方程式

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (3.32)$$

が得られる。

演習問題 3.4

ベクトル恒等式 (3.31) が成り立つことを確認せよ。なお、 $\nabla \phi(\mathbf{r}) = \text{grad } \phi(\mathbf{r})$ は勾配 (**gradient**) とよばれる演算で、

$$\text{grad } \phi = \nabla \phi = \frac{\partial \phi}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \mathbf{j} + \frac{\partial \phi}{\partial z} \mathbf{k} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \phi}{\partial x} \\ \frac{\partial \phi}{\partial y} \\ \frac{\partial \phi}{\partial z} \end{pmatrix}$$

で与えられる。

ほぼ同様の手順で、磁束密度に関する波動方程式

$$\nabla^2 \mathbf{B} - \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} = 0 \quad (3.33)$$

も得られる。これらの波動方程式は、電場と磁束密度がともに位相速度

$$c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} = 2.99792458 \times 10^8 \text{ m/s} \quad (3.34)$$

の波動として伝搬することを示している。これがまさに**電磁波 (electromagnetic wave)** である。光は電磁波の一種である。電磁波の分類を図 22^{*26} に示す。通常は、波長 1 mm 程度から 10 nm 程度までの間の電磁波を光と呼ぶ。

これらの方程式の最も単純な解として

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \phi) \quad (3.35a)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{B}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \phi) \quad (3.35b)$$

^{*26} ここで用いた量の一つである波数は $\bar{\nu} \equiv 1/\lambda$ (λ は波長) で定義される。今まで用いてきた波数ベクトルと紛らわしいが、波数ベクトルの大きさは $k = 2\pi/\lambda$ で、ここで出てきた波数 $\bar{\nu}$ と異なるので混同しないように。なお、波数 $\bar{\nu}$ の単位は、習慣的に、必ず cm^{-1} (wavenumber と読む) を用いることになっている。

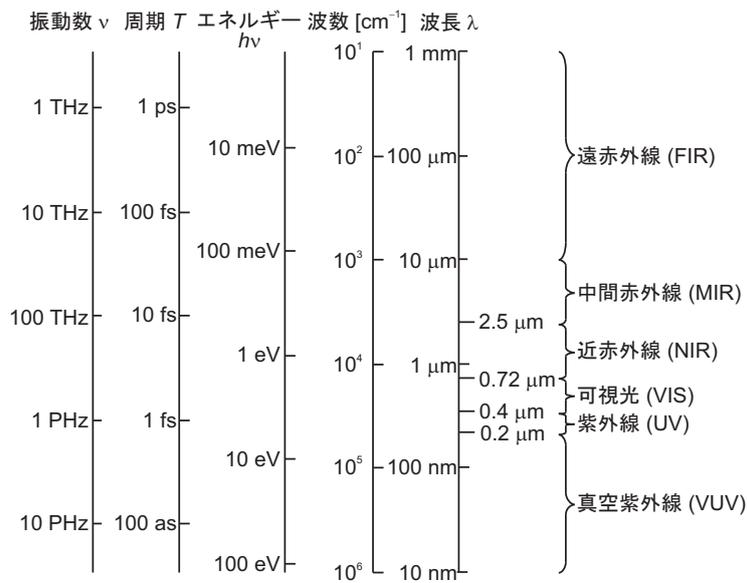
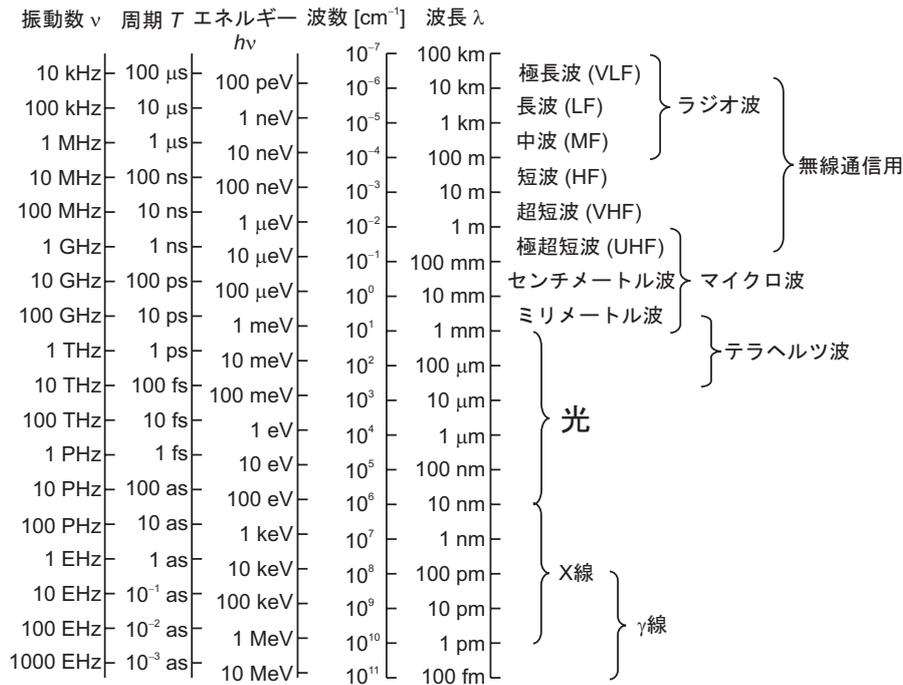


図 22 電磁波と光の分類

のような平面波を考えよう。式 (3.35a), (3.35b) を波動方程式に代入すると

$$\omega = c|\mathbf{k}| \tag{3.36}$$

という分散関係が得られる。さらに、式 (3.35a), (3.35b) をマクスウェル方程式 (3.29a)–(3.29c) に代入すると、

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}_0 = \mathbf{k} \cdot \mathbf{B}_0 = 0 \tag{3.37a}$$

$$\mathbf{k} \times \mathbf{E}_0 = \omega \mathbf{B}_0 \tag{3.37b}$$

が得られる。すなわち、 \mathbf{k} , \mathbf{E} , \mathbf{B} は互いに直交しており (つまり、電磁波は横波である!), \mathbf{k} , \mathbf{E} , \mathbf{B} の順で右手系をなしている。

演習問題 3.5

実際に、式 (3.35a), (3.35b) を (3.29a)–(3.29c) に代入して、式 (3.37a) と (3.37b) を導出せよ。

演習問題 3.6

式 (3.35a), (3.35b) を (3.29d) に代入すると何が得られるか。これは上記の議論と矛盾しないか。

3.4.2 物質中の電磁波・光

電気的に中性な誘電体 ($\rho = 0, \mathbf{i} = \mathbf{0}$) 中を伝搬する電磁波・光について考えよう。構成方程式

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \epsilon_r \mathbf{E} \quad (3.38a)$$

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mu_r \mathbf{H} \quad (3.38b)$$

を用いると、マクスウェル方程式は

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0 \quad (3.39a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (3.39b)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (3.39c)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \epsilon_r \mu_r \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (3.39d)$$

となる。このマクスウェル方程式から、波動方程式

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \epsilon_r \mu_r \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (3.40a)$$

$$\nabla^2 \mathbf{B} - \epsilon_r \mu_r \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} = 0 \quad (3.40b)$$

が導かれる。これから、物質中での光の位相速度は

$$v = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_r \mu_r \epsilon_0 \mu_0}} = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_r \mu_r}} \quad (3.41)$$

であることがわかる。ここで、屈折率 (**refractive index**)

$$n = \sqrt{\epsilon_r \mu_r} \quad (3.42)$$

を導入することで、おなじみの

$$v = \frac{c}{n} \quad (3.43)$$

の関係が得られる。通常の誘電体では、ほぼ $\mu_r = 1$ なので、

$$n = \sqrt{\epsilon_r} \quad (3.44)$$

である。^{*27}

物質中での光の位相速度が屈折率の分だけ遅くなるのはなぜであろうか。これは、物質中に誘起される分極による付加電場の影響であると考えることができる。光のような高周波の電磁波では、物質

^{*27} 最近になって、光の領域で、 $\epsilon_r \neq 1$ かつ $\mu_r \neq 1$ であるような物質を人工的に作製できるようになってきた。このような物質をメタマテリアル (**metamaterial**) という。適切に設計することによって、 $\epsilon_r < 0$ かつ $\mu_r < 0$ を満たすようなメタマテリアルを作り出すことができる。この場合には、 $n < 0$ 、すなわち屈折率が負になるという通常考えられないような状況が出現する。このような負の屈折率 (**negative index**) を利用しようという研究が進められている。

中で動くことのできる荷電粒子は電子だけである。電子は電磁波の電場成分によってクーロン力を受け、運動する*28。運動する電荷は、再び電磁波を放射するので、物質中の電磁波は、結局、外から入射した電磁波と物質内の各電荷の作る付加的な電磁波の総和となる。

x 軸上を加速度運動している電荷 q の荷電粒子を考えよう。時刻 t における電荷の座標を $x(t)$ とすると、この電荷から距離 r 離れた点に生じる電場大きさは

$$E(t) = -\frac{q}{4\pi\epsilon_0 c^2} \frac{\cos\theta}{r} \ddot{x}\left(t - \frac{r}{c}\right) \quad (3.45)$$

で与えられる*29。ここで、 θ は電荷から観測点を結ぶベクトル \mathbf{r} と x 軸とのなす角である。また、その電場の向きは、 \mathbf{r} と x 軸を含む平面内で、かつ、 \mathbf{r} に垂直である。次に、単振動的に運動する電荷が xy 面内 ($z=0$ としよう) で面密度 η で均一に分布している場合について考える。すべての電荷は同位相で振動しているとし、 $x(t) = x_0 \exp(-i\omega t)$ とする。この場合には、観測点 $z (> 0)$ での電場は、それぞれの電荷からの寄与を足し合わせたものとなるので、

$$\begin{aligned} E_r(z, t) &= \iint \frac{q\omega^2}{4\pi\epsilon_0 c^2} \frac{\cos\theta}{r} \exp\left[-i\omega\left(t - \frac{r}{c}\right)\right] dx dy \\ &\simeq -i\omega \frac{\eta q x_0}{2\epsilon_0 c} \exp\left[-i\omega\left(t - \frac{z}{c}\right)\right] \end{aligned} \quad (3.46)$$

となる。このことを踏まえて、 $z=0$ にある上述の電荷シートの左側 $z = -\infty$ から x 方向に振動する電場を有する平面波 $E_i(z, t) = E_i^0 \exp[i(kz - \omega t)]$ が入射したときに $z > 0$ のある点での電場がどうなるかを求めてみよう。電荷が入射電場 $E_i(0, t) = E_i^0 \exp(-i\omega t)$ に即座に追従して同位相で運動するならば、その座標は $x(t) = x_0 \exp(-i\omega t)$ となるので、観測点におけるトータル電場は以下ようになる。

$$\begin{aligned} E^{\text{total}}(z, t) &= E_i(z, t) + E_r(z, t) \\ &\simeq E_i^0 \exp[i(kz - \omega t)] - i\omega \frac{\eta q x_0}{2\epsilon_0 c} \exp\left[-i\omega\left(t - \frac{z}{c}\right)\right] \\ &= E_i^0 \exp[i(kz - \omega t)] \left(1 - i \frac{\omega \eta q x_0}{2\epsilon_0 c E_i^0}\right) \\ &\simeq E_i^0 \exp[i(kz - \omega t)] \exp\left(-i \frac{\omega \eta q x_0}{2\epsilon_0 c E_i^0}\right) \end{aligned} \quad (3.47)$$

この式は、電荷シートのために、ある位置 z での光の位相が $\frac{\omega \eta q x_0}{2\epsilon_0 c E_i^0}$ だけ進むことを意味している。すなわち、物質中では電荷が光電場に追従して振動するために、ある場所で見光の位相の進みが早くなり、その結果、波長が短く、すなわち、位相速度が遅くなるのである。これが屈折率としてよく知られた量の物理的起源である。

最近になって、物質に光の波長と同程度のサイズの周期構造を作り込むことによって、その中を伝搬する光の振る舞いを制御しようという試みが広くおこなわれるようになった。これは、周期ポテンシャル中を運動する電子がバンド構造に象徴されるように、真空中とまったく違う振る舞いを示すようになることと同じ原理を用いている。周期的な屈折率変調を持つ構造中を伝搬する光も、結晶中の電子と同様、真空中（あるいは均質な物質中）を伝搬する光とまったく異なる振る舞いを示す。こうした新しい人工的物質のことを、電子の周期ポテンシャルを有する結晶とのアナロジーから、**フォトリック結晶 (photonic crystal)** とよぶ。フォトリック結晶を用いれば、負の屈折に相当する現象や極

*28 電荷は磁場によるローレンツ力も受けるが、こちらは電場によるクーロン力に比べるとはるかに小さいので、通常は無視できる。

*29 この式の導出は省略する。興味がある人は適当な電磁気学の教科書を参照すること。

端に伝搬速度の遅い光を実現したり，光を波長程度のサイズの領域に閉じ込める，あるいは波長程度のサイズで急峻に曲げることなどができるようになり，小型で高機能な光機能集積回路が実現できるものと期待されている。

付録

この講義に関連する（かもしれない）基礎定数

表 2 基礎定数 (<http://physics.nist.gov/cuu/Constants/>)

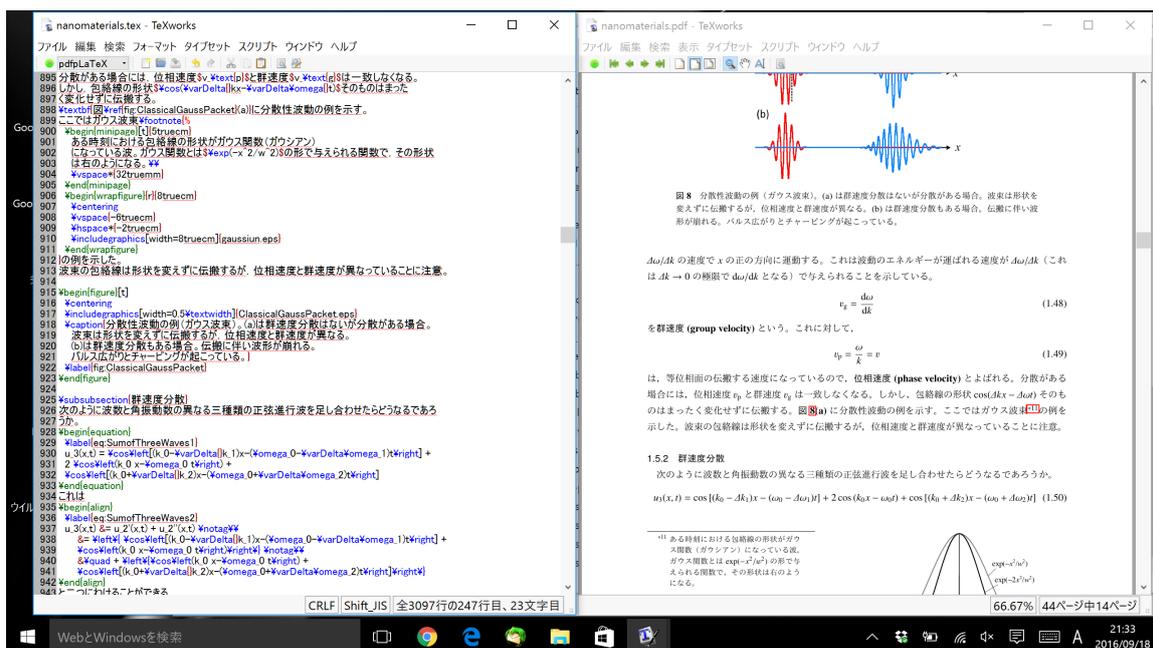
プランク定数	Planck constant	h	$6.626070040(81) \times 10^{-34} \text{ J s}$
	Planck constant over 2π	\hbar	$1.054571800(13) \times 10^{-34} \text{ J s}$
電気素量	elementary charge	e	$1.6021766208(98) \times 10^{-19} \text{ C}$
真空の誘電率	electric constant	ϵ_0	$8.854187817 \times 10^{-12} \text{ C V}^{-1} \text{ m}^{-1}$
真空中の光速	speed of light in vacuum	c	$2.99792458 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$ (定義値)
電子の静止質量	electron mass	m_e	$9.10938356(11) \times 10^{-31} \text{ kg}$
陽子の静止質量	proton mass	m_p	$1.672621898(21) \times 10^{-27} \text{ kg}$
原子質量単位	atomic mass constant	m_u	$1.660539040(20) \times 10^{-27} \text{ kg}$
ボルツマン定数	Boltzmann constant	k_B	$1.38064852(79) \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$
アヴォガドロ定数	Avogadro constant	N_A	$6.022140857(74) \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

レポート作成に役立つ（かもしれない）ツール

毎年聞かれるので、この講義ノートを作成する際に使用したツールを紹介しておく。

講義ノートは $\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ ($\text{pL}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X} 2_{\epsilon}$) を使用して書いている。 $\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ 自体については参考書も多いので情報入手には困らないだろう。書籍としては「[改訂第 6 版] $\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X} 2_{\epsilon}$ 美文書作成入門」(奥村晴彦・黒木裕介著, 技術評論社), ウェブでは $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ Wiki (<http://texwiki.texjp.org/>) あたりをあげておこう。

$\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ ソースの編集は長い間 NTEmacs と AUCT E X を使ってきたが、最近 PC を変えたのを機に TeXworks に乗り換えた。グラフは gnuplot (<http://www.gnuplot.info/>) や Plots32 (<http://hp.vector.co.jp/authors/VA007663/>) などを使用して描いている。下のスナップショットは編集中のデスクトップの一例。



目次

0	はじめに	1
0.1	講義の目標	1
0.2	教科書・参考書	2
0.3	講義の概要と進め方	2
1	波動現象の基礎	3
1.1	波動方程式 (Wave Equation) と正弦進行波の解	3
1.1.1	1次元の場合	3
1.1.2	3次元の場合	5
1.2	1次元波動方程式の一般解	6
1.3	両端を固定された弦の振動 (境界条件による離散化)	7
1.4	フーリエ級数, フーリエ変換と波動現象	10
1.4.1	フーリエ級数	10
1.4.2	波動現象とフーリエ級数	11
1.4.3	波動現象とフーリエ変換	12
1.5	分散がある場合の波動の振る舞い	13
1.5.1	位相速度と群速度	13
1.5.2	群速度分散	14
2	シュレーディンガー方程式	15
2.1	数学的準備—複素平面と複素数の指数関数表示	15
2.2	時間に依存するシュレーディンガー方程式	16
2.3	時間に依存しないシュレーディンガー方程式	17
2.4	量子力学の要請—考え方と波動関数の意味	18
2.5	不確定性関係 (uncertainty relation)	20
2.6	一次元の量子力学的系の例	21
2.6.1	自由粒子	21
2.6.2	ポテンシャル障壁による自由粒子の反射	23
2.6.3	トンネル効果	26
2.6.4	1次元周期ポテンシャル	27
2.6.5	一次元井戸型ポテンシャル中の電子	31
3	マクスウェル方程式と電磁波・光	33
3.1	数学的準備—ベクトル場の発散と回転	33
3.2	マクスウェル方程式	35
3.3	物質の電磁場に対する応答	36
3.3.1	物質の電磁応答の応用—キャパシタ	38
3.4	電磁波と光	38
3.4.1	真空中の電磁波・光	38
3.4.2	物質中の電磁波・光	41
付録		44
	この講義に関連する (かもしれない) 基礎定数	44
	レポート作成に役立つ (かもしれない) ツール	44