物理学講義２

電子の物理学

目 次

第２章　電子の物理学

ミクロの世界の自然現象は基本的に電子の運動により支配されている。その運動は量子力学によって理解する事ができるので、まずは量子力学の基本を正確に理解する事が大切な作業となっている。この量子力学においては何が観測量になるかと言う問いかけが重要であり、それを自分の言葉で理解する必要がある。

日常生活における物理現象の大半はやはり電子の運動によって支配されている。この場合、マクロスケールの数の電子が関与していると、これは電磁気学の問題となっている。但しその時に現れる電流などは量子力学の問題でもあり、さらに多体問題としての複雑さもある。このため、まだきちんとは理解できていない現象が多数、存在している。またマクロスケールな自然現象では重力の影響を受ける場合があり、特に溶液における物理現象を理解するためには重力が何らかの役割をしていると考えられる。

2.1　量子論

量子論はミクロの世界を記述する理論体系であり、非常に信頼できるものである。現在までのところ、この量子論と矛盾する現象は見つかっていない。これは電磁気学と並んで自然界を記述する上での基礎理論体系としては最も重要である。

2.1.1　原子

原子の中心には原子核があり、その原子核は陽子と中性子で構成されている。その陽子と中性子は核子と呼ばれており、この核子間には強い相互作用が働いている。この核力により核子は強く束縛されていて、その束縛エネルギーは電子が原子に束縛されている場合 (数 eV) の約百万倍 (数 MeV) はある。

一方、原子の性質は原子核の周りに束縛されている電子によって決められている。最も小さな原子は水素原子であり、これはその中心に陽子が 1 個あり、電子が 1 個束縛されている。この時の相互作用はクーロン力であり、この電子の振る舞いを記述する方程式が Schrödinger 方程式と呼ばれている量子力学の基本方程式である。

2.1.2　Schrödinger 方程式

ここに Schrödinger 方程式を書いて解説するが、しかしこれを読んでいる読者に取っては簡単に理解できるところではないと思っている。特に、この方程式を解くには非常に多くの数学的な技術が必要であり、物理の専門家を目指さない限り「その解法」を覚える事が必須とは言えない。しかしこの方程式は非常に重要であり、その関連ででてくる考え方そのものをしっかり理解して各自の考える力をより高いレベルのものにして欲しいと考えている。特に、状態関数という物理量が量子力学の中心的な役割を果たしているので、これが物理的にどういう事なのかを自分で問いかけながら読み進めて欲しいと思う。

電子の運動は状態関数 $\Psi(\boldsymbol{r},t)$ で記述される。量子力学の根本はこの状態関数によって物理的な観測量、例えばエネルギー固有値などを計算する事である。その状態関数に対する方程式が Schrödinger 方程式であり

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\boldsymbol{r},t) \tag{2.1}$$

と書かれる．$\hat{H}$ はハミルトニアンと呼ばれ２階の微分を含む空間座標の関数である．この式 (2.1) の左辺に複素数「i」が現れているが、これは方程式が時間反転 $(t \to -t)$ に対して不変性を保つためである．一般に電子の束縛状態を取り扱う場合 $\boxed{\Psi(\boldsymbol{r},t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\psi(\boldsymbol{r})}$ と置いて時間依存性をはずして議論する．

• **時間に依らない Schrödinger 方程式：**　この場合 $\psi(\boldsymbol{r})$ に対する Schrödinger 方程式は

$$\hat{H}\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}), \quad 但し \quad \hat{H} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + U(r)\right] \tag{2.2}$$

となっていて、$\psi(\boldsymbol{r})$ は時間によっていない。ここでこのハミルトニアン $\hat{H}$ は１粒子系のものと仮定している．m は電子の質量，$U(r)$ は電子が感じるポテンシャルである．E は電子状態のエネルギーであり，これをエネルギー固有値と呼んでいる．ハミルトニアン $\hat{H}$ はエルミート演算子であり，従ってその固有値 E は常に実数である．この微分方程式を解くと波動関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ とエネルギー固有値 E が同時に求まる事になっている．その時に状態を指定する量子数 n が現われてくる．そしてこの量子数 n によって指定されるために，状態関数に n をくっ付けて $\psi_n(\boldsymbol{r})$ で表している．エネルギー固有値も同じで量子数 n によって指定されるので E_n と書くのが一般的である．

• **ポテンシャル $U(r)$ は他の粒子との相互作用：**　$U(r)$ は電子が感じるポテンシャルであり，座標 r はポテンシャルを生み出す中心から測られている．このポテンシャル $U(r)$ は電子以外の何者か，例えば，水素原子では陽子が作っているものである．この場合のポテンシャルはクーロン力 $(U(r) = -\frac{e^2}{r})$ であり、この引力で電子は陽子に束縛されている．この時，陽子は止まっているとしているが陽子は電子と比べて約２０００倍重いから充分良い近似である．

• **量子数：**　量子力学で最も重要な概念が量子数であり、これが状態を指定している。人間を識別する場合、身長や性別を用いる場合があるが、多少の類似性はある。電子の場合、それ自体を識別する方法はないし、一般的には識別する理由もない。しかし原子の中に幾つかの電子が存在する場合、どの電子が外場 (例えば光) との反応にアクティブなのかを知っておく必要があり、それを他の電子から識別する必要がある。この場合、その電子の状態関数に量子数を指定しておけば、確かに識別できるわけである。従って、この電子は $3s$ 電子であるなどと量子数をもって記述している。

2.1.3　Ehrenfest の定理

量子力学の方程式から Newton 方程式を導出する方法のことを古典力学極限と言う．それには $\hbar \to 0$ の極限をとる方法などが知られているが，ここでは Ehrenfest の定理を紹介しよう．Schrödinger 方程式から Newton 方程式を導出したのが Ehrenfest の定理と呼ばれるものである．この定理を紹介する前に、念のため期待値について簡単な解説をして置こう。

• **期待値：**　あるオペレータ (演算子) $\hat{\mathcal{O}}$ (基本的には $\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{p}$ の関数) の期待値とはこの演算子を状態関数で挟んで積分することである。式で書くと

$$\langle \Psi | \hat{\mathcal{O}} | \Psi \rangle \equiv \int \Psi^\dagger(\boldsymbol{r}) \hat{\mathcal{O}} \Psi(\boldsymbol{r}) d^3 r \tag{2.3}$$

である。ブラケットの表示は簡便さのためであり物理的な理由はない。

• **時間発展の方程式：**　今，演算子を $\hat{\mathcal{O}}$ としてその期待値の時間発展をみて行こう．Schrödinger 方程式はハミルトニアンを $\hat{H}$ とすると

$$i\frac{\partial \Psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\boldsymbol{r},t), \qquad -i\frac{\partial \Psi^\dagger(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi^\dagger(\boldsymbol{r},t) \tag{2.4}$$

である．この場合，演算子 $\hat{\mathcal{O}}$ の期待値 $\langle \Psi | \hat{\mathcal{O}} | \Psi \rangle$ に対する時間微分を行うと

$$i\frac{d}{dt}\langle \Psi | \hat{\mathcal{O}} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{\mathcal{O}} H | \Psi \rangle - \langle \Psi | H \hat{\mathcal{O}} | \Psi \rangle = \langle \Psi | [\hat{\mathcal{O}}, \hat{H}] | \Psi \rangle \tag{2.5}$$

である事がすぐに確かめられる．但し $\boxed{[A,B] \equiv AB - BA}$ である．

• **Newton 方程式：**　ここで最も簡単な場合として，$\hat{H}$ が

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + U(r) \tag{2.6}$$

で与えられる1粒子系を考えよう．$\hat{\mathcal{O}}$ として座標 $\boldsymbol{r}$ の時は式 (2.5) から

$$\frac{d}{dt}\langle \Psi | \boldsymbol{r} | \Psi \rangle = \frac{1}{m}\langle \Psi | \hat{\boldsymbol{p}} | \Psi \rangle, \qquad (\text{但し } \hat{\boldsymbol{p}} \equiv -i\hbar\boldsymbol{\nabla}) \tag{2.7}$$

となる．また，運動量 $\hat{\boldsymbol{p}}$ についても同じ計算を実行すると

$$\frac{d}{dt}\langle \Psi | \hat{\boldsymbol{p}} | \Psi \rangle = -\langle \Psi | \boldsymbol{\nabla} U | \Psi \rangle \tag{2.8}$$

と求まる．古典力学との対応を見やすくするために，古典的な物理量を

$$\boldsymbol{r} \equiv \langle \Psi | \boldsymbol{r} | \Psi \rangle, \quad \boldsymbol{p} \equiv \langle \Psi | \hat{\boldsymbol{p}} | \Psi \rangle, \quad \boldsymbol{\nabla} U(r) \equiv \langle \Psi | \boldsymbol{\nabla} U | \Psi \rangle \tag{2.9}$$

と定義しよう．この時，運動方程式は

$$m \frac{d^2 \boldsymbol{r}}{dt^2} = -\boldsymbol{\nabla} U(r) \tag{2.10}$$

となり，これは Newton 方程式そのものである．式 (2.9) から明らかなように古典力学の $\boldsymbol{r}$ の時間依存性はすべて Ψ から来ている．

• **力とポテンシャル：**　Schrödinger 方程式から Newton 方程式が導出された事には物理的に重要な意味がある．それは量子力学ではポテンシャル $U(r)$ により全て記述されていて，力 $\boldsymbol{F}$ は基本的な物理量ではないことである．従って，古典力学においても力はポテンシャルの微分として捉えるべきである．それでは様々な形の力は何故でてきたのであろうか？これは実は多体系の問題を１体問題に無理やり帰着させると，複雑なポテンシャルが現われるからである．

2.1.4　フェルミオンとボソン

電子はフェルミオンであり、フォトン (電磁波) はボソンである。フェルミオンはスピンと言う自由度を持っていて、それは $\frac{1}{2}$ である。安定なフェルミオンは電子、核子 (陽子と中性子、但し中性子は原子核中でのみ安定) そしてニュートリノである。一方、安定なボソンはフォトンだけである。ところがこのフォトンには静止系が存在しないため、理論的な取り扱いは容易ではない。不安定なボソンとしてウィークボソン ($W^{\pm}$, Z^0) がある。フォトンと同様、ベクトル粒子であり、このためそのスピンは１である。但し、このスピンは角運動量演算子の固有値ではないし、フォトンの状態関数 (偏極ベクトル) は角運動量の固有関数ではない。しかし回転群の表現からスピン１として扱って良い事がわかっている。

• **Pauli 原理：**　フェルミオンには非常に重要な性質がある。それは Pauli 原理と呼ばれているもので、一つの状態には１個のフェルミオンしか占有できないと言うものであり、これは厳密に成り立っている。この原理はフェルミオン場を反交換関係により量子化することにより導出される事が分かっているため、その意味では現在は原理と言うよりも法則となっている。

• **Bose 凝縮：**　Bose 凝縮と言う言葉があるが、これは単に理論的な主張で

あり現実の問題に当てはまる現象は存在していない。この理由として、安定な基本粒子としてはフォトンしか存在していないからである。ウィークベクトルボソンが確かに存在しているが安定な粒子ではない。このためこの粒子の統計的な性質を検証しようがない。さらにフォトンには静止系が存在しないため、統計的な性質は Planck 分布を議論する時に必要になる程度である。一方、複合粒子 (例えば原子) に対して、そのスピンが整数だと Bose 統計に従うはずであると言う主張がある。ところが、この複合粒子に対する Bose 統計と言う考え方に対して、理論的根拠は存在しないし実験的な確証はさらにない。

2.1.5　自由電子

量子力学において自由電子状態をきちんと理解する事はかなり難しく、物理学科の４年次の力では一般的には無理であろう。しかし非常に重要なのでここで解説をしておこう。自由粒子は束縛状態ではないので，その粒子は何処に存在しても構わない事になる．しかしその粒子が「月に存在する可能性」を議論する事は馬鹿げているし，実際には局在している電子を考えて充分である．このため，自由粒子を箱の中に閉じ込めた描像を取るのが正しい手法である．

• **自由粒子のシュレディンガー方程式：**　質量 m の質点が自由粒子の場合，そのシュレディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{2.11}$$

である．自由粒子なのでエネルギー E は正であることに注意しよう．ここで波数 k を $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ と定義すると式 (2.11) は

$$(\boldsymbol{\nabla}^2 + k^2)\psi(\boldsymbol{r}) = 0 \tag{2.12}$$

と書ける．この微分方程式 (2.12) はすぐに解けて，その一般解は

$$\psi(\boldsymbol{r}) = Ae^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + Be^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{2.13}$$

と書けている．ここで１個条件をつけることが必要となる．

• **運動量演算子の固有状態：**　自由粒子は運動量 $\hat{\boldsymbol{p}}$ の固有状態となっている必要がある．それは自由粒子のハミルトニアンと運動量 $\hat{\boldsymbol{p}}$ が交換するため、$\psi(\boldsymbol{r})$ はその同時固有関数になっているからである。よって

$$\hat{\boldsymbol{p}}\psi(\boldsymbol{r}) = \hbar\boldsymbol{k}\psi(\boldsymbol{r}) \tag{2.14}$$

である．この場合，この条件式から $A=0$ か $B=0$ である事がわかる．ここでは $B=0$ としよう．この時，式 (2.13) は $\boxed{\psi(\boldsymbol{r})=Ae^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}}$ となる．この状態関数の採用によって解の一般性が失われる事はない．

2.1.6 周期的境界条件

固有値を求めるためには境界条件が必要である．自由粒子の場合，粒子を箱の中に閉じ込めて，さらにそこに周期的境界条件を課している．今の場合，粒子を一辺が L の箱に閉じ込めたとして

$$\psi(x,y,z)=\psi(x+L,y+L,z+L) \tag{2.15}$$

が周期的境界条件である．この式に $\psi(\boldsymbol{r})=Ae^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ を代入すると $\boldsymbol{k}$ が

$$\boldsymbol{k}=\frac{2\pi}{L}\boldsymbol{n},\quad (n_x=0,\pm1,\pm2,\cdots,\ n_y=0,\pm1,\pm2,\cdots,\ n_z=0,\pm1,\pm2,\cdots)$$

と求められる．

- **固定端の境界条件：** 媒質を伝わる波の波動関数は実数 (sin と cos) である．この場合，境界条件として固定端の境界条件を使っている．媒質の振動は波の存在確率とは無関係であるため，その振動がゼロになっていても不思議な事ではない．それに対して量子力学における自由粒子の状態関数は存在確率と関係しているので，状態関数がゼロになる事はない．実際、$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ がゼロになる事は無く、従って周期的境界条件は自然な条件である．

- **規格化条件：** 自由粒子の状態 $\psi(\boldsymbol{r})$ は一辺が L で体積 $V=L^3$ の箱の中に閉じ込められている．従ってこの粒子の状態関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ は $\psi(\boldsymbol{r})=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}},\ \ \boldsymbol{k}=\frac{2\pi}{L}\boldsymbol{n}$ ($\boldsymbol{n}$ は整数) となっている．この状態関数が規格化条件を満たす事は簡単に示される．

- **自由粒子のエネルギー固有値 E_n：** これらの事より，自由粒子の状態のエネルギー固有値 (eigenvalue) E_n は

$$E_n=\frac{\boldsymbol{k}^2\hbar^2}{2m}=\frac{(2\pi\hbar)^2}{2mL^2}\boldsymbol{n}^2 \qquad (\boldsymbol{n}\text{ は整数})$$

と書かれている．ここでは，エネルギー固有値 E_n に箱の長さ L が入っている．この場合，実際の世界ではこの L は充分に大きいのでエネルギー固有値 E_n は連続スペクトルになっている．エネルギー固有値 E_n に L が現れるのは不思議に思われるかもしれないが，物理的な観測量はこの L には依存していない事がわかっている．

2.2　電子と電磁場

電子がマクロスケールの数で存在する場合、その物理的な性質は主に電磁気学の法則に支配される事になり、従ってその振る舞いは電磁気的な相互作用により理解する事ができる。

2.2.1　静電気

電気はすでに紀元前から知られていた．琥珀 (樹脂化石) を毛布で擦ると電気が起こる事がわかっており，従ってこれが Electron (ギリシャ語の琥珀) の起源である事は良く知られている．

- **摩擦帯電：**　ある種の物質 (誘電体) は摩擦により帯電する．これは幼い頃に誰でも経験した事だと思う．静電気によってビリッと来たと言う事である．物質間の摩擦でどちらが正に帯電し，どちらが負に帯電するかはその誘電体の性質によっている．この原因は勿論，電子がどちらかの誘電体からは取り去られ，その分がもう一つの物質に移動した事によっている．

2.2.2　クーロン力

静電気を起こしている力はクーロン力である。これは電荷を持っている粒子間に働く力であるが、その力の強さは荷電粒子の数に比例している。また電荷には正と負の状態があり、電子は負の電荷を持っている。正の電荷を持っている粒子は陽子である。同じ電荷同士には斥力が働き、異なる電荷には引力が働いている。

2.2.3　圧電効果

圧電効果とはある種の結晶体に機械的応力（圧力）を掛けるとそれに応じて電気分極が起こり，電束密度が生じる現象である．これは Pierre Curie が１００年以上も前に発見している．この現象は機械的な力が結晶構造の対称性を少し壊すため電気分極が起こり，これが電気現象に直接に結びついているものである．圧電効果は機械的な力と電気力を結びつける現象であるため，この応用は現在では非常に広範囲に渡っている．特に液晶画面に手で触れてそれを電気信号に変換する機構はこの圧電効果の応用そのものである．

2.2.4　電流と電池

電流の発見は Galvani による蛙の筋肉の痙攣実験から始まった事はよく知られている．この現象は異なった金属版の間に塩水を置くと電位差ができ，従ってここに電気力が生じる事により起こったものである．

• **電流：**　この現象の原因を実験で明確に示したのが Volta である．彼は２種類の金属間に塩水を含む紙などを置くことにより，この間に電位差が生じて電流が流れる事を示したのである．

• **電池：**　静電気を集めてもその利用は一瞬の放電でしかない．それに対して電池を作り電流を流してその電気力を利用する場合，電気を定常的に利用できる事になる．このためその利用価値は飛躍的に増大している．そして２種類の金属板の間に塩水を含む紙をはさんだものを単位としてこれを何層か重ねたものが電池の基礎となっている．

2.2.5　Maxwell 方程式

電磁気学を理解するためには Maxwell 方程式を覚える事がどうしても必要である．これは実験的に検証された最も信頼できる理論体系である。しかしながらこの講義ノートの読者にとって Maxwell 方程式を使いこなすことは難しすぎるので、この方程式を覚える事などは特に必要とは言えないであろう。

Maxwell 方程式は次の４個の方程式から成り立っている．

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0} \qquad \text{(Gauss の法則)} \tag{2.16}$$

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{B} = 0 \qquad \text{(磁荷がない)} \tag{2.17}$$

$$\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{E} + \frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t} = 0 \qquad \text{(Faraday の法則)} \tag{2.18}$$

$$\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{B} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t} = \mu_0\boldsymbol{j} \qquad \text{(Ampère-Maxwell の法則)} \tag{2.19}$$

ここで ρ と $\boldsymbol{j}$ は電荷密度と電流密度を表し，それらは物質が作っている．この ρ と $\boldsymbol{j}$ が最も複雑で良くわからない物理量である．例えば電流密度を理論的に理解しようとするとこれは量子力学の多体問題を解く事に対応している．

• **未知関数：**　この方程式は電場 $\boldsymbol{E}$ と磁束密度 $\boldsymbol{B}$ を未知関数としていて，その数は全部で６個 $(E_x, E_y, E_z, B_x, B_y, B_z)$ である．従って，Maxwell 方程式は６個の独立した方程式になっている．Gauss の法則が１個，磁荷がない式が

１個，Faraday の法則が２個そして Ampère-Maxwell の法則が２個となっている．Ampère-Maxwell の式は一見３個あるように見えるが，今の場合，連続方程式 $\boxed{\frac{\partial\rho}{\partial t}+\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{j}=0}$ が成り立つので２個となる．実際、式 (2.19) の左辺第２項は連続方程式が成り立つように Maxwell により導入された。

• **場の定義：**　ここで電場 $\boldsymbol{E}$ と磁束密度 $\boldsymbol{B}$ が「場」であるという意味を解説しておこう．これは単純で，電場も磁束密度もともに時間・空間の関数になっていると言う事である．すなわち，$\boldsymbol{E}=\boldsymbol{E}(t,\boldsymbol{r})$, $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{B}(t,\boldsymbol{r})$ であり，それらは場所によっている。従って「場」であり、それ以上の特別な意味はない。これは粒子的描像で座標の時間発展のみを扱う Newton 力学との対比である．実は電荷密度も電流密度ももとを正せば量子力学の波動関数 $\psi(t,\boldsymbol{r})$ に関係していて「場」で書けている．その意味では電磁気学と量子力学は同じ場の理論であり，さらに重力の問題もやはり同じレベルの定式化の枠組みに入っている．

2.2.6　電子と電磁場の相互作用

電子と電磁場の相互作用ハミルトニアンは

$$H'=-e\int\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})d^3r \tag{2.20}$$

と書かれる。ここで $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})$ は電子の電流密度を表している。この式は場の理論の表現を用いているが、非相対論的にはハミルトニアンで相互作用を求める方が便利であるので、その方法を紹介しよう。但しこの講義ノートの読者に取っては少し難しすぎるかもしれない。

• **非相対論的電子と電磁場のハミルトニアン：**　非相対論的量子力学において荷電粒子と電磁場のハミルトニアンは

$$H=\frac{1}{2m}\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]^2-\frac{Ze^2}{r} \tag{2.21}$$

と書かれている．但し，$\boldsymbol{\sigma}$ は Pauli 行列と呼ばれている２行２列のエルミート行列であり，次のように書かれている．

$$\boldsymbol{\sigma}=(\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z),\qquad \sigma_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\ \ \sigma_y=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\ \ \sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

ここで $\hat{\boldsymbol{p}}$ が演算子 ($\hat{\boldsymbol{p}}=-i\hbar\boldsymbol{\nabla}$) である事に注意して数学の公式

$$\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]^2=\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2-\frac{ie}{c}\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\times\boldsymbol{A}$$

を用いてハミルトニアンを書き直すと

$$H = \frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2 - \frac{Ze^2}{r} - \frac{e}{2mc}(\hat{\boldsymbol{L}} + \hbar\boldsymbol{\sigma}) \cdot \boldsymbol{B} \tag{2.22}$$

となる．ここで $\hat{\boldsymbol{L}}$ は角運動量 ($\hat{\boldsymbol{L}} = \boldsymbol{r} \times \hat{\boldsymbol{p}}$) であり、磁場 $\boldsymbol{B}$ は $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A}$ と書けている。ここでは一様磁場の場合を仮定している。この右辺第３項の $\boldsymbol{\sigma}$ の式がスピンの Zeeman 効果に対応する相互作用である．

• **傾斜磁場と MRI：** Zeeman 効果により水素原子中の陽子は分裂エネルギーに対応する電磁波を放出する．この電磁波の波長はかなり長いものであり，その電磁波測定からその電磁波放射の場所を特定する事は不可能である．しかし傾斜磁場の考えを使うと陽子の位置が計測できるという事が簡単に理解される．この考えを応用し発展させた処方が MRI (Magnetic Resonance Imaging) である．ここでその基本原理を簡単に紹介しよう．

• **Zeeman 効果のエネルギーと電磁波：** 陽子のスピンは $\frac{1}{2}$ であり，磁場を掛けると状態が２個に分裂する．この分裂のエネルギーは $\boxed{\Delta E = \frac{e\hbar B}{Mc}}$ であり，このエネルギーに対応して電磁波が放出される．

• **傾斜磁場：** ここで Lauterbur は傾斜磁場という概念を導入した．それは Zeeman 効果で分裂した状態間のエネルギーに対応する電磁波を測定してどこの陽子から放出されたかを特定できる手法である．陽子の Zeeman 分裂のエネルギーに対応するフォトンの振動数は $\boxed{\omega = \frac{eB}{Mc}}$ である．今，外部磁場 B に対してこれが特別な座標依存性を持つように設定しよう．簡単のために，１次元系を考える．この時，例えば B が $0 < x < a$ の範囲内で

$$B = B_0\, x \qquad (0 < x < a) \tag{2.23}$$

のような座標依存性がある場合を想定しよう．この場合，フォトンの振動数 ω と座標 x が一対一の対応をする事がわかる．それは $\boxed{x = \frac{\omega Mc}{eB_0}}$ の式から明らかである．すなわち，ω を測定す事によりその陽子がフォトンを発生する場所 x が特定できる事を意味している．今は１次元での議論であるが，この問題を３次元にうまく拡張できれば，例えば人間の体内における水分子の分布状況がわかる事になり，これが MRI 手法の基本的な機構である．

2.2.7 Lorentz 力

Lorentz 力 $\boldsymbol{F}$ として知られている力は磁場 $\boldsymbol{B}$ によって荷電粒子が受ける力であり，これも相互作用 H' が起源となっている．この Lorentz 力は

$$\boldsymbol{F} = e\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B} \tag{2.24}$$

であり $\boldsymbol{v}$ が荷電粒子の速度を表している．これは古典力学における力であり、従ってマクロスケールな荷電粒子系に対するものである。

2.2.8 モーター

モーターは磁場中に流れる電流が力を受ける事を利用している．Faraday の法則は磁場の時間変化が起電力を生み出すというものであるが，Lorentz 力は荷電粒子と磁場との相互作用を含んだ法則である．電磁気学全体として見たらそれぞれの法則がお互いに絡み合って電磁現象につながっている．モーターの原理に対応する回転力そのものは相互作用によっているが，その相互作用はベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$ で書けている．その意味において，モーターの動作機構全体としては電磁誘導と関係している．

• **モーターの整流子**：　磁場 $\boldsymbol{B}$ の下に置かれたコイルに電流を流すとこの電流を担っている電子 (その速度 $\boldsymbol{v}$) は Lorentz 力 $\boldsymbol{F} = e\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B}$ を受ける事になる．このコイル全体が力を受けて回転できるようにうまく工夫された機器がモーターである．この時，外部電流をコイルの回転方向に応じて切り替え，回転を一定方向に保つために工夫されたものが整流子である．

2.3 電流：導体と半導体

電流とは比較的自由に動ける電子が隣の格子 (原子) に一斉に飛び移る事を繰り返す現象である．従って A 点から B 点までマクロの距離でも電子が一斉に隣に飛び移れば，A 点から B 点まで即座に電流が流れた事になっている．すなわち，電流が A 点から B 点まで流れた（情報の流れ）時間は，大雑把には電子が隣の原子に飛び移る時間であるから，まさに瞬間である．

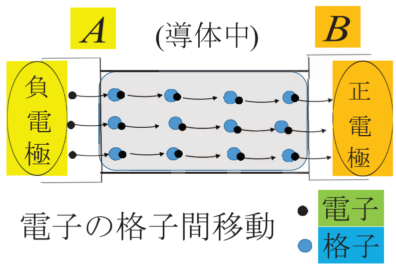

図 2.1: 電流の描像

2.3.1 導体

導体とは銅などの金属でその原子には隣に飛び移れる準自由電子の数が十分多く存在している物質である．

• **オームの法則：** オームの法則として知られている式は電流密度 $\boldsymbol{j}$ と電場 $\boldsymbol{E}$ の間に成り立っている $\boxed{\boldsymbol{j} = \kappa \boldsymbol{E}}$ という現象論的な関係式である．ここで κ は電気伝導率と呼ばれていて電流の流れ易さと関係している．従って，導体での電流の流れ易さは，まずは自由に動ける電子の数が多い事が条件になるが，同時に隣に飛び移る時に，その原子または分子を励起状態に持って行く確率にもよっている．しかしこの点でのミクロの理論計算はまだ知られていない．また、オームの法則は時間反転性を破っているため、基本方程式ではない。しかし物質によっては良く成り立っている。

2.3.2 半導体

よく半導体と言う言葉を見かけるがこれはある種の半導体が日常生活品に頻繁に使われているからである．特に半導体ダイオードが整流器に使われてから真空管のかわりに半導体がほとんど取って代わった程である．真空管ダイオードも半導体ダイオードも共に電流が少し流れて，しかも一方方向しか流れないので，整流効果がありよく利用されている．半導体物質としてはゲルマニウム

がよくあげられている．

• **水は半導体か？**：　それでは水はどうであろうか？例えば純水と海水を見るとこれらの電気抵抗率は

純水：$\sigma \sim 2.5 \times 10^5 \quad \Omega \cdot \mathrm{m}$
海水：$\sigma \sim 2.0 \times 10^{-1} \quad \Omega \cdot \mathrm{m}$

である．従って，海水は確かに半導体と言ってよい．この違いは勿論，海水には沢山のイオンが存在しているため，動ける電子の数が格段に多いという事に依っている．海水の伝導率はイオンのモビリティに依っている事が知られているが，これは伝導性電子の数に直接反映しているのであろう．

2.3.3　磁化と磁石

導体とはほぼ自由に近い状態で動ける電子が十分多く存在している物質である．従って外から磁場を掛けるとそれらの準自由電子は円運動をする．

• **磁化**：　円電流は磁気双極子に対応しているため，これが内部磁場を生成する．この磁場を全て集めたのが磁化である．磁化は外からの磁場を打ち消すように生成される．これは自然界は必ず物質中の磁場の全エネルギーが最小になるように選択するからである．

• **磁石**：　通常の物質は外部からの磁場を取れば内部磁化は消滅する．しかし内部磁場が消滅しない場合がありこれが磁石である．しかし磁荷がないので，磁石のように物質の内部で生成される磁場はすべて磁気双極子によるものである．通常は外部磁場をはずしたら磁気双極子の方向がいずれ揺らぎ始め，最終的には平均すればゼロになるはずである．しかし磁石は何らかの理由で $\boldsymbol{m}$ の方向が揃ったままの状態が半永久的に実現されている．現実の磁石では電子のスピンによる磁気双極子 ($\boldsymbol{m} \simeq \frac{e}{m}\boldsymbol{s}$) の方が円運動による磁化よりも重要である．従って最初に最外殻の電子のスピンを揃わせるのは外から掛けた磁場であろう. しかし一度揃ってしまうと磁石では何らかの理由でスピンが揃ったままの状態が優先され, ランダムにはならない．しかし，この強磁性体の現象は理論的にはまだほとんど分かっていなく、今後の重要課題の一つである．

2.4　電子の物理学：まとめ

日常生活の様々な現象の大半は電子の動力学によって理解する事ができている。ミクロスケールの物理現象である原子や分子の性質はすべて電子の動力学が正確に計算できれば、基本的なところは理解できている。

2.4.1　電荷とは何か？

電磁気学だけでなく、量子場の理論としてみても「電荷とは何か？」と言う問題をきちんと理解しておく必要がある。恐らく、ほとんどの物理屋はこの問題を正しい意味合いで理解しているとは考えにくいのが現状である。現実問題として、電荷とは何かと質問すると『それは「e」だと思う』と言う答えが大半であろう。しかしそれは勿論、間違いである。「e」は相互作用の強さを表していて電荷ではない。電荷とはその粒子が持っている量子数のことである。

- **フェルミオンの電荷の量子数：** 例えば、電子は電荷の量子数として「-1」を持っている。一方、陽子は「$+1$」である。これらはフェルミオンであるが、この場合、電磁気的な相互作用をするためには電荷の量子数がゼロとは異なる必要がある。例えば、ニュートリノは電荷の量子数がゼロであり電磁気的な相互作用はしない。中性子の電荷はゼロであるがこれは電磁的な相互作用をしている。実際、中性子には磁気能率が有限である。これはしかし中性子がクォークで構成されている事と関係している。

- **ボソンの電荷の量子数：** 一方、基本粒子としてのボソンはベクトルボソンのみが知られている。この場合、例えば $W^{\pm}$ は電荷の量子数を持っている。しかしこれは勿論、直接的な電磁相互作用は知られていない。高次項では電磁気的な相互作用をする可能性は指摘されているが、その検証は実験的には難しいであろう。

2.4.2　電流とは何か？

電流とは何か？と言う問いかけに対してこの講義では準自由電子が隣の格子に一斉に飛び移る事であるとしている。従って、電気抵抗とはこの準自由電子が格子と相互作用して何らかの形でエネルギーを失い、格子がそのエネルギーを熱エネルギーとして獲得する現象である。ところが、この理論計算は非常に難しくてまだ第０近似での計算さえも実行されていない。

● **超伝導現象：** 電気抵抗が理論的に全く分かっていない段階で、超伝導の現象を理論的に理解する事は容易なことではない。超伝導現象とは電気抵抗がほとんどゼロになっている物理現象である。これまでの理論としてはBCS理論が良く知られていて、これは一定以下の温度ではある種の導体においては電子の状態にエネルギーギャップが生じるため、電流が流れて電子が格子と衝突しても励起できないとしている。このため、電流が抵抗なしで流れ続けて、従って超伝導状態になっていると言うものである。しかしこのBCS理論では散乱問題を計算したわけではなく、相互作用の一部を近似的に計算に取り込んだだけの単純な理論計算である。エネルギーギャップがあれば確かに超伝導現象を説明できるが、これは条件として強すぎるものである。実際、これで超伝導現象が理解できたとはとても言えなく、今後の進展を見てゆく必要があると考えられる。

2.5 Homework Problems

以下の問題を自分の言葉で回答する事。特にネット上での物理学関連の「知識」は到底、信用できるとは言えないので、自分の頭でしっかり考えること。

2.5.1 問題 1

状態関数 (波動関数とも言うが同じもの) $\psi(\boldsymbol{r})$ は複素関数となっている。従って $\psi(\boldsymbol{r})$ は観測できない。それで $|\psi(\boldsymbol{r})|^2$ を考えるが、これは確率密度に対応している。何故だと思うか？

ヒント：$\int |\psi(\boldsymbol{r})|^2 d^3r = 1$ である事と関係している。この式を波動関数の規格化と言う。

2.5.2 問題 2

量子力学の方程式を近似する事によって古典力学の方程式が導かれた。この場合、自由度の数がどうなったか述べよ。

2.5.3 問題 3

自由粒子の状態関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ は $\psi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$, $(\boldsymbol{k} = \frac{2\pi}{L}\boldsymbol{n}$, $\boldsymbol{n}$ は整数, $V = L^3)$ となっている．この状態関数が規格化されている事を示せ.

2.5.4 問題 4

Ehrenfest の定理では座標の期待値 $\langle \boldsymbol{r} \rangle$ に対する時間発展から古典力学の方程式が導かれた。期待値が古典論に対応したと言う物理的な理由を各自、自分の言葉で述べよ。

2.5.5 問題 5

量子力学ではハミルトニアン H が重要な役割を果たしている。実際 Schrödinger 方程式は $\hat{H}\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r})$ であった。但し、ここでは運動量は微分演算子として取り扱われている。一方、古典力学でもハミルトニアン H を使う事があり、

実際、ハミルトン方程式は $\dot{\boldsymbol{r}} = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}}, \quad \dot{\boldsymbol{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{r}}$ と書けている。この場合、ハミルトニアン H の物理的な意味を考察せよ。

2.5.6　問題 6

古典力学のハミルトニアンに現れるポテンシャルの基準点の取り方には任意性がある事が知られている。これは何故だと思うか？量子力学の場合、ポテンシャルの基準点はどのように決められていると思うか考察せよ。

2.5.7　問題 7

フェルミオンには Pauli 原理が働いている。もしフェルミオンの質量がゼロの場合を考えるとその粒子に対する Pauli 原理がどうなるか考察せよ。

ヒント：粒子の質量がゼロだとその慣性系が指定できない。

2.5.8　問題 8

量子力学における自由粒子は単純な1粒子問題であり直線運動となっている。一方、古典的な波である音波などの媒質の振動はその取り扱いが非常に難しいものとなっている。何故、難しいのかその理由を述べよ。

2.5.9　問題 9*

演算子 A, B が交換する場合、すなわち $[A, B] = 0$ の時、A と B は同時固有関数を持つ事を証明せよ。
(注：これは希望者のみの宿題)

2.5.10　問題 10

雷は雲と雲あるいは雲と地上との間に電流が流れる事によって起こっている現象である。この時、何故、ピカッと光ると思うか答えよ。またゴロゴロとなる音は何の音だと思うか自分の考えを述べよ。

2.5.11 問題 11

Maxwell 方程式は６個の独立した方程式である事を自分の言葉で確めよ。

2.5.12 問題 12

MRI(Magnetic Resonance Imaging) 法において、陽子の分布が測定できるメカニズムについて自分のイメージを作り、解説せよ。

2.5.13 問題 13

電磁波を用いた携帯電話の通信速度と電話回線を用いた固定電話の通信速度がほとんど同じである。これは何故だと思うか？

2.5.14 問題 14

オームの法則 $\boldsymbol{j} = \kappa \boldsymbol{E}$ は時間反転不変性を破っている事を示せ。
(時間反転不変性とは $t \to -t$ で方程式が同じになること。)

2.5.15 問題 15

電流とは最外殻の電子が隣の格子に一斉に飛び移る事だとしたら、電気抵抗とは物理的にどのような現象であると思うか、自分のピクチャーを作れ。

2.5.16 問題 16

モーターにおける整流子のメカニズムを具体的にその図を書いて解説せよ。

2.5.17 問題 17*

ある種の物質に磁場を掛けると円電流が生成されて内部磁場ができる。これを磁化と言う。この磁化は必ず、掛けられた磁場を打ち消すよう生成される。何故、打ち消すように生成されるのだと思うか考えよ。

2.5.18　問題 18

電荷はその粒子が持っている量子数である。ウィークベクトルボソン $W^{\pm}$ は電荷を持っているが通常の電磁的な相互作用はしない。何故だと思うか？
(注：これは希望者のみの宿題)

関連図書

[1] J.D. Bjorken and S.D. Drell, "Relativistic Quantum Mechanics", (McGraw-Hill Book Company,1964)

[2] J.J. Sakurai, "Advanced Quantum Mechanics", (addison-Wesley,1967)

[3] K. Nishijima, "Fields and Particles", (W.A. Benjamin, INC, 1969)

[4] T. Fujita, "Symmetry and Its Breaking in Quantum Field Theory"　(Nova Science Publishers, 2011, 2nd edition)

[5] T. Fujita and N. Kanda, "Fundamental Problems in Quantum Field Theory"　(Bentham Publishers, 2013)