

まえがき

電子に起因する物質の性質（物性）を電子工学に応用する「電子物性工学」の基本原理は、量子力学によっています。本書の目的は、量子力学の基本を（水素原子、パウリの原理まで）学び、電子材料や電子デバイスにどのように応用されているかを習得するとともに、近年誕生した「量子情報工学」の基本を理解することにあります。

とかく難解であると受け止められている量子力学を興味深く、また分かりやすく学ぶために次のような工夫をしました。

- * 量子情報工学の分野で、量子力学の原理を利用して驚くべき高性能の「量子コンピュータ」などの開発研究が行われているホットな話題から出発しました。そして
- * 量子力学が誕生し、自然科学を革新するとともに応用技術を生み出した歴史を現在から過去にさかのぼりました。量子力学が「なぜ生まれたか」を次々と時間を逆転してたどれば、量子力学に対する心理的な抵抗感がなくなると期待されます。更に
- * 量子力学が、古代から発達した光学に関する研究と密接に関連して生み出された経緯を、原著論文を踏まえて探りました。それによって
- * 量子力学を生み出した偉大な先人たちの歩みから、科学理論は観測データと合理的な思考だけから必然的に生み出されるのではなく、苦闘の中から構築され、その正しさは実験事実と一致することによって保証されていることを示しました。このような“科学理論の発見のプロセス”の現場を知れば、とっつきにくく感じた量子力学も身近に感じられるようになることでしょう。また
- * とかく煩雑な計算過程の詳細は、付録や演習問題また他書に譲り、見通しよく量子力学の本質を把握できるようにしました。更に
- * 関連する興味深い理論的背景やその展開を付録として収録しました。
- * 従来の入門書では扱われなかった「量子力学の観測問題」の本質をできる限りやさしく解説しました。そして、これに関する論争から、現在では“情報”こそが量子力学が扱うミクロ世界を支配する鍵であることが明らかにされつつあり、量子力学の原理を直接利用する量子情報工学が生まれた経緯を述べました。

本書によって、最先端技術や、電子材料・電子デバイスに応用されている量子力学の基本を学ぶだけでなく、量子力学の不思議さと面白さをも味わい、自然の奥深さにふれ、科学の本質についても興味を抱くようになれることを願っています。

本書は、筆者が東京工業大学 電気電子工学科で担当している授業科目「量子力学」の講義内容から書き下ろしました。受講された学生諸君から有益な示唆や意見を受ける機会が与えられ、また特に中野恭兵君には原稿の校正を手伝っていただいたことを感謝します。

東京工業大学 電子物理工学専攻の古屋一仁教授および玉川大学 メディアネットワーク学科の山崎浩一教授から有益なご指摘をいただき、更に、東京工業大学 電子物理工学専攻の真島 豊准教授から、 C_{82} 分子の STM 写真を提供していただいたことを厚く御礼申し上げます。

コロナ社の皆様方には、いろいろとご尽力いただき、誠に有り難うございました。

2008年3月

阿 部 正 紀

1. “逆さ量子力学史” と電子物性工学

1.1 量子情報工学——量子力学が開く未来のIT	2
談話室 坂本竜馬の開眼——量子力学の“難解さ克服” へのヒント ...	4
1.2 電子物性工学の最前線	5
1.3 量子力学のルーツ	7
本章のまとめ	8
理解度の確認	8

2. 光から生まれた量子力学

2.1 光に関する謎——量子力学誕生のきっかけ	10
2.1.1 黒体放射とプランクのエネルギー量子仮説	10
2.1.2 光電効果とアインシュタインの光量子説	13
2.1.3 水素原子スペクトルとボーアの原子模型	16
2.2 ハミルトンの光学理論から生まれた物質波と波動方程式	20
2.2.1 粒子と光の統合をめざしたハミルトン	20
2.2.2 ド・ブロイ波の提案	24
談話室 科学理論の先駆と模倣	27
2.2.3 シュレーディンガー方程式の導出	28
談話室 「科学的真理発見」における“ひらめき”と自然科学の本質 ...	30
本章のまとめ	31
理解度の確認	32

3. 量子力学の基本原理

3.1 確率波の解釈	34
3.1.1 回折現象と確率波	34
3.1.2 確率波と観測問題	37
3.2 不確定性原理	41
談話室 ハイゼンベルクの不確定性原理を超えた日本人	43
3.3 古典的因果律の破綻	44
3.4 量子力学の要請——状態・物理量・測定値	45
談話室 虚数と自然科学	46
本章のまとめ	50
理解度の確認	50

4. 定常状態と井戸型/凸型ポテンシャル

4.1 定常状態の波動関数と波動方程式	52
4.2 一次元自由粒子	53
4.3 一次元井戸型ポテンシャル中の粒子	55
4.3.1 無限に深い井戸型ポテンシャル	55
4.3.2 有限の深さの井戸型ポテンシャル	57
4.4 凸型ポテンシャル障壁とトンネル効果	61
4.5 三次元自由粒子と井戸型ポテンシャル問題	65
本章のまとめ	68
理解度の確認	68

5. 演算子の性質とその応用

5.1 演算子の線形性と重ね合わせの原理/波束の収縮	70
5.2 演算子の交換関係と不確定性原理	73
談話室 知の限界	75
本章のまとめ	76
理解度の確認	76

6. 水素原子と軌道角運動量

6.1	波動方程式の解法	78
6.2	動径関数と電子雲の広がり	82
6.3	角運動量と空間の量子化	86
6.4	電子雲の方向依存性	88
	本章のまとめ	90
	理解度の確認	90

7. スピン角運動量と電子配置

7.1	軌道磁気モーメント	92
7.2	スピン磁気モーメント	94
7.3	パウリの原理と電子配置	97
	本章のまとめ	100
	理解度の確認	100

8. 観測問題と量子情報工学

8.1	「量子力学の観測問題」今昔	102
8.1.1	ノイマンの観測理論——意識が状態を収縮させる？	102
8.1.2	シュレーディンガーの猫——観測が猫の生死を決定する？	103
8.1.3	EPR パラドックス——自然は非局所的か？	105
	談話室 アインシュタインとボーア：論争と友情	107
8.1.4	ベルの定理とアスペの実験——遠隔相関と非局所性を実証！	107
8.1.5	多世界解釈	108
	談話室 “オッカムのかみそり” と多世界	109
8.2	“情報” と量子力学	110
8.2.1	量子消去——量子情報を消して過去を変える!?	111
8.2.2	量子コンピュータと量子暗号通信	114
	談話室 アリストテレスの謎と量子力学	117

本章のまとめ	118
理解度の確認	118

付 録

1. フェルマーの原理と蜃気楼	119
2. ハミルトンの原理とハミルトン・ヤコビの方程式	123
3. 近接場光の応用	126
4. エルミート演算子・完全直交系と演算子の行列表示	128
5. スピン測定と不確定性原理	131

引用・参考文献	133
理解度の確認；解説	134
索 引	139

“逆さ量子力学史” と電子物性工学

電子物性工学の基礎である量子力学は難解であるとされてきた。それは量子力学で扱うマイクロ世界の原理が、我々の常識からかけ離れているからであろう。本章では、この難解さを克服するために、時代を現在から過去にさかのぼって、量子力学の誕生とその応用技術の発展の歴史を概観した。樋口清之著「うめぼし博士の逆（さかさ）・日本史 昭和→大正→明治」（祥伝社、1994年）のお知恵を拝借し、「なぜ」という疑問をタテ糸にして歴史を遡^{さかのぼ}っていく方法」（同書「まえがき」p.4）を採用したのである。

まず、量子力学そのものを利用して、驚くべき高性能を発揮する量子コンピュータなどの開発が行われている最先端研究からさかのぼって、量子力学が20世紀の科学を革新して、数々の応用技術を生み出した歴史を学ぶ。そして、量子力学が20世紀初頭に誕生した歴史的な背景を探り、それが古代から発達した幾何光学にまでさかのぼれることを示す。

1.1 量子情報工学 量子力学が開く未来のIT

たった1台で数億台のパソコンに匹敵する、途方もなく高性能な「量子コンピュータ」を開発する遠大な研究プロジェクトが今や世界中で行われている（図1.1）。もし、量子コンピュータが実現されると、現在インターネット上などで用いられている「公開鍵暗号」技術によるセキュリティが破られてしまうのではないかと懸念される。そこで、「量子暗号通信」の研究開発が行われている。量子暗号通信によれば、盗聴されたか否かを常に監視できるので、究極のセキュリティを確保できると期待されている。

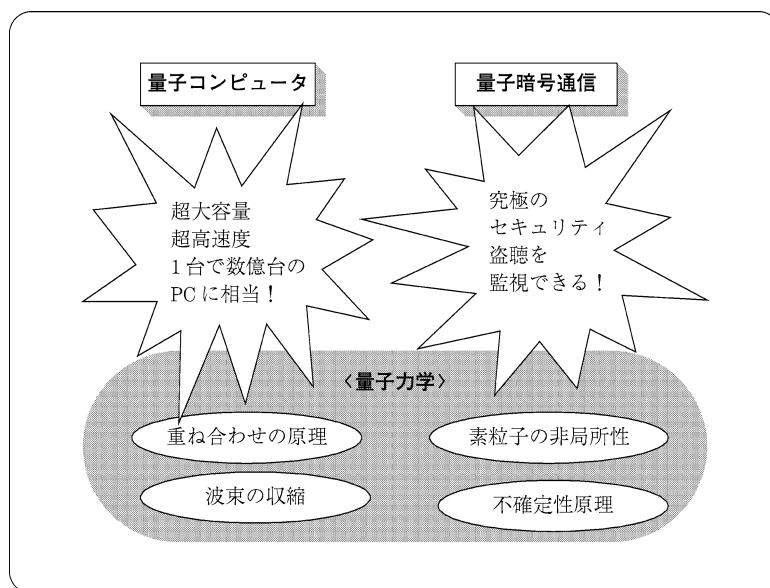


図1.1 量子情報工学の二大テーマ——量子コンピュータと量子暗号通信——で用いられている量子力学の原理

量子コンピュータと量子暗号通信（8.2.2項）では、量子力学の基本原則である“重ね合わせの原理”（p.70），“波束の収縮”[†]（p.73），“不確定性原理”（p.43），“素粒子の非局所性”（p.106）に基づく“遠隔相関”（p.106）などが利用されている。例えば、量子コンピュータでは、電子や光などの素粒子——今後、量子的粒子と呼ぶ——に関する重ね合わせの

[†] 波動として広がっていた粒子——波束という——が観測によって一点に局在化する現象。

原理に基づいて、無数の情報を一括して演算を行い、波束の収縮を利用して計算結果を求めるので超高速演算が可能になる。一方、量子暗号通信では、不確定性原理または二つの量子的粒子が遠く離れてもあたかも結び合わされているかのようにふるまうという非局所性などに基づいて盗聴を見破る。

量子コンピュータや量子暗号通信のように、量子力学の原理そのものを利用して情報処理や通信を行う分野を「量子情報工学」という（同名の図書が本書と同じレクチャーシリーズで刊行が予定されている）。

量子情報工学で応用されている波束の収縮などの量子力学の基本原理は、常識的な判断や伝統的な哲学と真っ向から対立するので、量子力学の誕生の当初（20世紀前半）から異論が唱えられてきた。これを量子力学の観測問題という。しかし量子力学は、成功につぐ成功をおさめた。量子力学の成果は、物理学、化学、生物学などの基礎科学を発展させて宇宙論

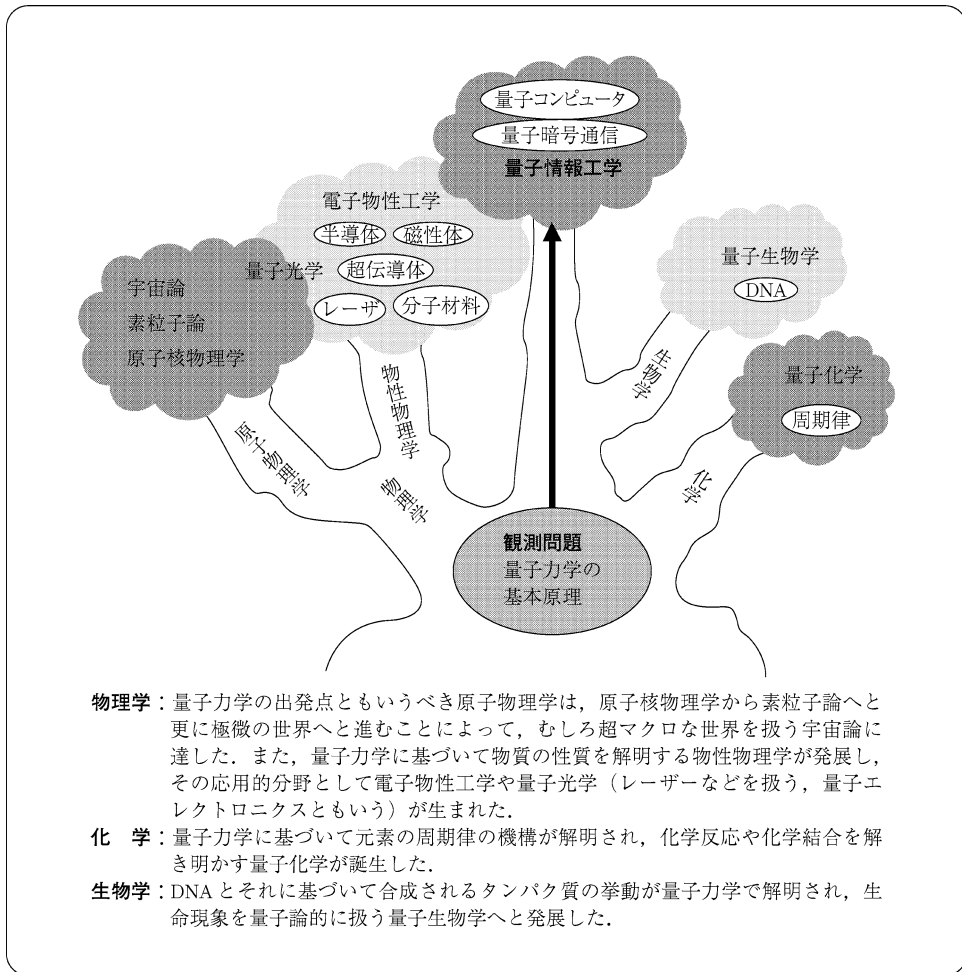


図 1.2 量子力学が生み出した学問分野とその応用

4 1. “逆さ量子力学史”と電子物性工学

にまで及ぶとともに、広範囲な工業的応用を作り出している (図 1.2).

それゆえ、誰もが量子力学の有効性を認めている。かつてパラドックス (矛盾, 逆説) とみなされていた基本原理から予測されるとおりに量子的粒子 (光子や電子) が振る舞うことが実験から明らかにされ、これを利用した量子コンピュータと量子暗号通信の開発研究が行われている。

近年、量子的粒子の振舞いが、ますます我々の日常感覚や常識とかけ離れていることが実証されている。特に我々が量子的粒子に関して持つ“情報”が量子的系の状態を決めていることが分かりつつあり、観測問題は更に謎を深めている。量子情報工学はこの観測問題を未解決のまま棚上げして、量子力学の基本原理から予測される結果だけを利用しているのである (8.2.2 項)。

☞ 談 話 室 ☞

坂本竜馬の開眼——量子力学の“難解さ克服”へのヒント

「勝先生、わしを弟子にして仕^{つか}アされ」(司馬遼太郎：竜馬がゆく 1 (司馬遼太郎全集 3), p.535, 文藝春秋, 1972 年)。

暗殺するために同志と二人で勝海舟の屋敷に乗り込んだ坂本竜馬。ところが、海舟の持論を聞かされて、その場で弟子入りする破目となった。海舟の壮志が竜馬を開眼したのである。

海舟は、物騒な客人を地球儀の前に連れて行き、当時の世界情勢を説明した。国を開き、貿易を行って国力をつければ、外国勢による日本への侵略はありえないという「航海貿易論」を展開し、そのための海軍構想を披瀝した。それは、軍艦 270 隻、兵員 6 万人の艦隊群をつくるという大計画。たった 4 隻の黒船に皆が腰を抜かしていたこの時代には氣^{きう}宇^う壮大すぎる構想であった。しかし、深くうなずくところがあった竜馬は、この日を境に、攘夷論者から一転して開国論者に飛躍した。

いまや、1 台で数億台の PC にも匹敵する「量子コンピュータ」の開発研究が行われている。量子コンピュータでは、量子力学の基本原理である、「波束の収縮」や、「素粒子の非局所性」などを利用する。これらは、常識や哲学に逆らうので、観測問題として量子力学の創成当時から強く疑念を投げかけられてきた。しかし、これらの原理から予測されるとおりの現象が起こることが実験で示された (p.108)。そこで、観測問題を棚上げして、実際に起こる量子力学的な現象を利用して、量子コンピュータおよび量子暗号通信の開発が進行している。

このような現実を理解すれば、量子力学は受け入れ難い、という心理的な抵抗感から

開放されるのではないか。人は、聞きなれない奇妙な事柄に拒否反応を示し、理解することに困難を感じる。しかし、いかに奇妙であっても、そのことが現実に関起り、世界を動かしていることを知れば、心理的な障壁が壊されて、受け入れることができるようになるのではないだろうか。竜馬が開国論を受け入れたように。

1.2 電子物性工学の最前線

現在、最先端研究として、ナノメートル ($1\text{ nm} = 10^{-9}\text{ m} = 10\text{ \AA}$) サイズの超微細加工をほどこして、量子力学的な効果 (量子効果) を利用する「量子効果ナノデバイス」の研究開発が盛んに行われている。量子効果ナノデバイスの代表例は、電子を一つずつ制御する**単一電子デバイス**、および1個の電子から光子を1個ずつ放出する**単一光子レーザー**である。

単一電子デバイスの研究が行われるようになった背景には、**図 1.3(a)**に示すように、トランジスタの寸法が年々小さくなったために生じた問題がある。今やトランジスタのサイズがナノメートルの領域に入った。このため、量子力学によれば、電子は波動として振る舞い、トンネル効果 (**図(b)**) を示すので、電流が漏れて雑音を生じトランジスタとしての特

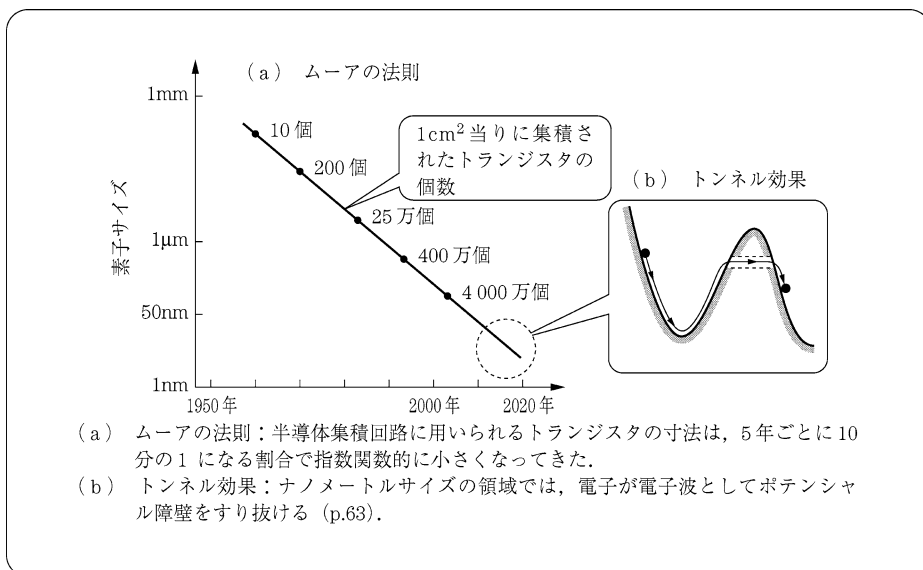


図 1.3 ムアの法則とトンネル効果

索

引

【あ】

アイコナル ……21
アイコナル方程式 ……22
アインシュタイン ……8, 34, 105

【い】

イオン化エネルギー ……82
意識 ……103
位相速度 ……28, 30
一次元井戸型ポテンシャル ……55
一般解 ……61
井戸型ポテンシャル ……55
因果律 ……44

【う】

ウィーンの公式 ……11
運動量演算子 ……54

【え】

エネルギー保存則 ……124
エネルギー量子 ……13
エバネッセント光 ……60, 126
エルミート演算子 ……73, 128
エルミート行列 ……130
遠隔作用 ……106
遠隔相関 ……2, 106, 108
演算子 45, 48, 49, 70, 73, 129

【か】

解析力学 ……8, 20, 26
可換 ……74
可干渉性 ……114
角運動量 ……87
角運動量演算子 ……79
角運動量ベクトル ……86, 92
確率 ……54
確率波 ……37, 40
—の解釈 ……34, 36
確率密度 ……47, 84
隠れた変数 ……107
重ね合わせ状態 ……70, 73
重ね合わせの原理 ……2, 70, 114
完全系 ……128
完全直交関数系 ……128
観測 ……40, 102, 111

観測操作 ……111
観測問題 ……3

【き】

規格化 ……47, 80
規格化因子 ……48
規格完全直交関数系 ……128
規格直交関数系 ……72
幾何光学 ……8, 20, 26
期待値 ……45, 49, 73, 85
基底状態 ……19, 56, 68
軌道運動 ……79
軌道角運動量 ……87
軌道角運動量演算子 ……95
球関数 ……86
境界条件 ……47, 57, 80
共通の固有関数 ……74
行列の基礎関数系 ……130
行列表示 ……128, 129
行列力学 ……128, 129
極座標 ……78
虚数 ……46
キルヒホッフ ……10
近接作用 ……106
近接場光 ……60, 126

【く】

空間の量子化 ……87
空洞放射 ……10, 11
クロネッカーのデルタ ……72
群速度 ……30

【け】

系の状態 ……46
限界振動数 ……14
原子捕獲 ……126
原子模型 ……16
原子モデル ……17
減衰波 ……58
弦の振動 ……26, 56

【こ】

公開鍵暗号 ……116
交換可能 ……74
交換子 ……74
交換不可能 ……74

光子 ……14, 34
—の運動量 ……14
—のエネルギー ……14
光子エネルギー ……16
光電効果 ……13, 14
光量子 ……14
光量子説 ……8
黒体 ……11
黒体放射 ……10, 11
古典的因果律の破綻 ……44
古典的粒子 ……63
古典物理学 ……8
古典論 ……8
コヒーレンス ……114
コヒーレント ……114
コペンハーゲン解釈 ……110
固有関数 ……49, 54, 80, 128
固有状態 ……73
固有振動 ……26
固有振動モード ……26
固有値 ……45, 49, 73, 80
固有値方程式 ……28
固有値問題 ……70, 130
固有モード ……14
コンプトン効果 ……15, 16

【さ】

最小作用の原理 ……21, 126
作用量積分 ……22
作用量子 ……13

【し】

時間を含まないシュレーディンガー方程式 ……52
磁気モーメント ……92
磁気量子数 ……81, 82, 94, 96
仕事関数 ……57, 58
実在論 ……105
自由電子 ……58, 82
自由電子状態 ……83
自由粒子 ……53
縮退 ……68, 82, 83
シュテルン・ゲルラッハの実験 ……94, 102, 131
主量子数 ……81, 82
シュレーディンガー ……28, 103

——の猫103, 104
 シュレーディンガー方程式
 ...8, 28, 30, 49, 52, 70, 78, 79
 状態45
 情報111, 115
 蟹気楼119, 122
 真空準位15
 振動数条件18

【す】

水素原子78
 ——のエネルギー83
 ——の固有状態82
 水素原子エネルギー18
 水素原子スペクトル ...8, 16, 19
 水素原子模型92
 スネルの法則119
 スピン94, 95, 96
 スピン座標96, 97
 スピン磁気量子数96
 スピントランジスタ6
 スピントロニクス6
 スピントネル磁気抵抗効果 ...6
 スピン量子数96
 スペクトル10

【せ】

前期量子論8
 線形演算子70, 128

【そ】

走査型トンネル顕微鏡63
 測定41, 102
 測定精度42
 測定値45, 49
 束縛状態83

【た】

大数の法則36, 44, 49
 多世界解釈108, 110
 単一光子レーザ5
 単一電子デバイス5

【ち】

調和振動子12
 直交71
 直交関数系71, 72

【て】

定常軌道17
 ——の条件18
 定常状態52, 54, 78
 定常波25, 26
 ディラック定数43, 48

電子軌道90
 電子スピン95
 電子線回折26
 電子配置100
 電子物性工学6
 伝搬ベクトル21

【と】

等位相面22
 透過波61
 透過率62
 統計的因果律44, 49
 ド・プロイ8, 24
 ド・プロイ波8, 25
 ド・プロイ波長 ...24, 25, 42, 54
 トンネル効果 ...5, 63, 65, 103
 トンネル電流63

【な】

内積71
 ナノ技術60
 ナノフォトニクス127
 ナノ粒子40

【に】

二重スリット111
 ニュートンの運動方程式 ...123

【の】

ノイマンの観測理論102

【は】

ハイゼンベルク42
 パウリの原理98
 波数54
 波数ベクトル67
 波束2, 30
 ——の収縮 ...2, 73, 102, 114
 波動関数 34, 45, 46, 49, 54, 78
 ——の方向依存性88
 波動性34
 波動方程式28
 ハミルトニアン48, 124
 ハミルトニアン演算子 ...48, 79
 ハミルトン8, 20
 ——の原理123, 124
 ——の主関数23, 126
 ハミルトン・ヤコビの方程式
23, 123, 126
 波面22
 反射率62

【ひ】

非可換74

光の回折現象34
 非局所性2, 106
 左進行波61, 73
 標準偏差75
 表皮の厚さ60

【ふ】

フェルマーの原理20, 119
 フェルミ準位15
 不確定性関係43
 不確定性関係式75
 不確定性原理2, 43, 75, 116
 物質波8, 25, 26
 物理量45, 48, 49, 70, 73
 フラレン41
 プランク12
 ——の公式13
 ——の量子仮説13
 プランク定数13, 48
 フントの規則98

【へ】

ベルの不等式108
 変数分離52
 変分原理21

【ほ】

ボーア8, 17
 ——の原子模型18
 ボーア磁子93
 ボーア半径18, 19
 方位量子数81, 82
 方向の量子化87, 94
 保存系52
 ポテンシャル障壁61, 63
 ポテンシャルの壁56
 ボルン34

【み】

右進行波61, 73

【む】

ムーアの法則5
 無限に深い井戸型ポテンシャル
55, 65

【や】

ヤングの干渉実験 ...37, 38, 39

【よ】

要請46

【ら】

ラグランジェの方程式125

ラグランジュアン124
 ラゲールの陪関数81
 ラザフォードの α 線の散乱実験
17

【り】

粒子性34
 粒子・波動の二重性41
 リュードベリ定数16
 量子暗号通信2, 116
 量子エレクトロニクス3
 量子化軸87
 量子化条件18
 量子効果5
 量子光学3
 量子効果ナノデバイス5

量子コンピュータ
2, 109, 114, 115
 量子消去111, 113, 114
 量子情報工学3, 111
 量子数28
 量子生物学3
 量子的粒子2, 37, 42, 45
 量子もつれ合い110
 量子力学の観測問題102
 量子論8

【る】

ルジャンドルの陪関数81

【れ】

零点エネルギー56

レイリー・ジーンズの公式 ...12

【E】

EPR パラドックス105
 EPR ペア 108, 111, 112, 114

【M】

MRAM6

【S】

STM63

【ギリシャ】

γ 線顕微鏡42

— 著者略歴 —

阿部 正紀 (あべ まさのり)

1972年 東京工業大学大学院博士課程修了 (電子工学専攻)
工学博士 (東京工業大学)

2009年 東京工業大学名誉教授

基礎電子物性工学—量子力学の基本と応用—

Introduction to Electronic Materials

— Fundamentals and Applications of Quantum Mechanics —

© 社団法人 電子情報通信学会 2008

2008年5月7日 初版第1刷発行

2011年5月10日 初版第3刷発行

検印省略

編者 社団法人
電子情報通信学会
<http://www.ieice.org/>
著者 阿部正紀
発行者 株式会社 コロナ社
代表者 牛来真也

112-0011 東京都文京区千石 4-46-10

発行所 株式会社 コロナ社

CORONA PUBLISHING CO., LTD.

Tokyo Japan Printed in Japan

振替 00140-8-14844・電話 (03) 3941-3131 (代)

<http://www.coronasha.co.jp>

ISBN 978-4-339-01826-4

印刷：壮光舎印刷／製本：グリーン



本書のコピー、スキャン、デジタル化等の無断複製・転載は著作権法上での例外を除き禁じられております。購入者以外の第三者による本書の電子データ化及び電子書籍化は、いかなる場合も認めておりません。

落丁・乱丁本はお取替えいたします