

はじめに

地球環境への配慮や福利厚生への関心が高まるなか、これまでの大量消費型の社会からエコロジカルな社会への転換が進みつつある。自動車や家電製品には省エネルギーやリサイクルが求められるようになり、経済性の極めて高いものづくりが義務づけられている。産業の活性化のためには、科学の様々な分野でのブレイクスルーが必要である。工学系に限っても、太陽光発電、電気自動車、ロボット、宇宙ステーションなど今後の発展が期待されているものがいくつもあるが、高機能かつ高効率なシステムの構築には、いかに小さくつくるかということが深く関わっているといってもよい。電子・光デバイスのナノスケール化はそのようなシステム実現のための土台となっている。量子力学が本領を發揮するのは、まさにこうしたナノの世界である。新しい技術の開発のために量子力学の知識がますます不可欠になっている。

難解で知られる量子力学の修得には、これまで努力と時間が必要であった。しかし、多忙な昨今の学生にとって、効率よく学習できるテキストが強く望まれよう。できるだけ少ないページで、必須事項をやさしくわかりやすく盛り込み、自学自習に最適な演習中心の書籍として送り出した「理工系のための解く！量子力学」は、幸いにも多くの読者に迎えられた。一方、科学の発展とともに、これまでアドバンストコースに組み込まれていたトピックスのいくつかは、むしろ基礎事項として学習すべきものになってきている。量子力学の理論的枠組みは、一言でいってしまえばユニタリー変換であるが、こうした認識が、たとえば量子情報処理の分野などでは常識となっている。そこで、時代のニーズにあった現代的な視点で捉えた量子力学の入門書を上梓することにした。いま学べき量子力学、それが本書のスタイルである。

最少の労力で量子力学の中核をつかめるように内容を厳選している。特に、量子計算、ナノデバイス、超伝導、高密度磁気記録といった先端技術の基礎となっている概念や計算手法を演習形式で習得できるように工夫している。第1章と第2章では、量子力学の基本構造について学ぶ。ハミルトニアンを生成元とするユニタリー演算子が、物理系の時間発展を司ることを理解しよう。次の第3章でシュレーディンガー方程式を実際に解いてみる。量子井戸とトンネル効果は工科系の

はじめに

学生にとって必修のテーマである。後半の3つの章では、量子力学を実際に使う上でキーポイントとなる道具立てを行う。第4章で場の演算子を、第5章で角運動量を、第6章で密度演算子を取りあげる。いずれもやや高度な内容を含むが、線形代数の初歩とごく簡単な近似展開および微分方程式の解法を知っていれば、ほとんど数学の予備知識なしで読み進めることができるようになっている。姉妹編「理工系のための解く！量子力学」と相補的に学習していただければより効果的である。

今回も、企画から出版まで、講談社サイエンティフィクの瀬戸晶子氏には大変お世話になった。あらためて謝意を表したい。また、本書のために貴重な写真を提供いただいた三洋半導体株式会社、キヤノン株式会社、シャープ株式会社、住友電気工業株式会社、NEC エレクトロニクス株式会社、株式会社バッファロー、浜松ホトニクス株式会社、JR 東海の方々と日本大学久保康則教授、高橋博樹教授へお礼を申し上げる。量子力学の魅力をどれほど伝えられたかは心もとないところであるが、本書を活用してもっともっと多くの人に量子力学を学んでもらいたいと願う次第である。

2009 年晩秋

伊藤 治彦

理工系のための解く！先端技術の量子力学 目次

はじめに	iii
第1章 量子状態	1
1.1 光子 / 1	
1.2 状態ベクトル / 3	
1.3 基底の変更 / 9	
1.4 直交性と完全性 / 12	
1.5 確率振幅 / 16	
1.6 量子計算 / 19	
第2章 量子力学の定式化	22
2.1 エルミート演算子 / 22	
2.2 シュレーディンガー方程式 / 27	
2.3 エネルギー固有状態 / 30	
2.4 連続スペクトル / 34	
2.5 運動量演算子 / 38	
2.6 オブザーバブルの両立 / 42	
2.7 不確定性原理 / 44	
2.8 エーレンフェストの定理 / 46	
2.9 ハイゼンベルグの運動方程式 / 48	
第3章 波動力学	51
3.1 波動関数 / 52	
3.2 波動方程式 / 54	
3.3 自由粒子 / 58	
3.4 ド・ブロイ波長 / 60	
3.5 1次元のポテンシャル / 62	
3.6 量子井戸 / 64	
3.7 量子ドット / 69	
3.8 トンネル効果 / 72	
3.9 エネルギーバンド / 76	
第4章 場の量子化	81
4.1 調和振動子 / 82	
4.2 消滅・生成演算子 / 85	
4.3 格子振動 / 89	

目次

- 4.4 波動場の量子化 / 94
- 4.5 電磁場の量子化 / 98
- 4.6 第 2 量子化：ボソン / 103
- 4.7 第 2 量子化：フェルミオン / 106
- 4.8 超伝導 / 111

第 5 章 角運動量 117

- 5.1 角運動量演算子 / 117
- 5.2 軌道角運動量 / 123
- 5.3 角運動量の合成 / 127
- 5.4 スピン-軌道相互作用 / 134
- 5.5 ゼーマン効果 / 139
- 5.6 交換相互作用 / 141

第 6 章 量子アンサンブル 147

- 6.1 密度演算子 / 147
- 6.2 量子リウヴィル方程式 / 151
- 6.3 2 準位系 / 153
- 6.4 観測による混合 / 158
- 6.5 非局所相関 / 162

練習問題 詳解 165

- 第 1 章 / 165
- 第 2 章 / 167
- 第 3 章 / 171
- 第 4 章 / 175
- 第 5 章 / 183
- 第 6 章 / 188

索引 193

$$\epsilon = \frac{6.63 \times 10^{-34} \times 3.00 \times 10^8}{4.05 \times \text{(b)} \times 1.60 \times 10^{-19}} = \text{(c)} \text{ eV}$$

(b) 10^{-7}
(c) 3.07

物質が光を吸収するとき、その内部の電子が励起される現象を**光電効果**という。光電効果には、電子が物質表面から放出される外部光電効果と、物質内部の伝導電子が増加する内部光電効果がある。光電効果が起こる最も長い波長（限界波長）を λ_c とすると、 $\lambda_c = \frac{hc}{\Delta}$ が成り立つ。ここで、 Δ は、外部光電効果では仕事関数を、半導体における内部光電効果ではバンドギャップのエネルギーを表す。

❖ 練習問題 1.1 ❖

図 1.3 のように、半導体の pn 接合に光を照射すると、光子のエネルギーがバンドギャップよりも大きいならば、価電子帯の電子はその光子を吸収して伝導帯に上がり、価電子帯にはホールが残る。光電子は n 型半導体に、ホールは p 型半導体に移動して、起電力が発生する。この現象は**光起電力効果**と呼ばれていて、太陽電池に利用されている。単結晶の GaAs のバンドギャップのエネルギーは 1.43 eV である。この材料が太陽光の高い変換効率を得るのに適していることを示せ。 詳細は 165 ページ

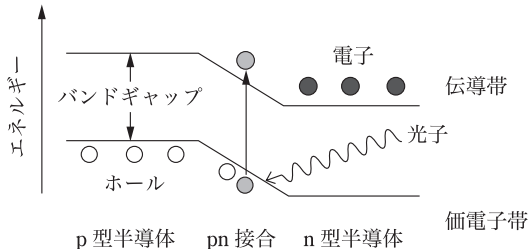


図 1.3 光起電力効果

1.2 状態ベクトル

空間を伝搬する光は、電界および磁界が進行方向に対して垂直に振動する横波になっている。進行方向を z 軸にとると、電界の振動方向として x 軸または y

軸を選ぶことができる．可能な振動方向の数は偏光の**自由度**と呼ばれ，伝搬光の場合は 2 である．光波の状態は，振動数，波数ベクトル，偏光によって決まる．これに対応して，光子の状態は，エネルギー，運動量ベクトル，偏光の 3 つの物理量によって決まる．以下の議論では，単一振動数で発振するレーザー光のようにエネルギーと運動量ベクトルが同じ光子の集団を考えて，偏光の違いだけを問題にしよう．すなわち，とり得る量子状態が 2 つしかない最も簡単な場合を考える．

太陽からやってくるような自然の光では電界の振動方向は不定であるが（無偏光），セロハンやポリマーのフィルムのような特定の方向の電界を吸収する物体に通すと，振動方向が不変である**直線偏光**となって出てくる．直線偏光をつくる素子を偏光板という．図 1.4 に，2 つの直線偏光状態を示す．

鉱物の一種である石英（クオーツ）は SiO_2 の結晶体で，無色透明のものは水晶（クリスタル）と呼ばれている．図 1.5 のように，水晶のある方向から線をながめると，2 本に分かれてみえる．これは，光が結晶を通るときに 2 つの光線，常光線と異常光線，に分かれるためであり，2 つの直交した偏光の向きに対して屈折率が異なることに起因する．このような性質を**複屈折**という．なお，石英からつくられるガラス（シリカ）は耐熱性や透明度に優れ，化学器具や光学機器などに広く用いられている．汎用の光ファイバーはシリカでつくられている．

図 1.6 のように，複屈折を有する透明な結晶に偏光していない光線を入射すると，互いに直交する 2 つの直線偏光に分かれて出てくる．すなわち，入射光は x 偏光と y 偏光の 2 成分からできている．光子に置きなおすと，入射前の光子は， x 偏光状態と y 偏光状態の 2 つが重なった状態にあると考えることができる．これは，光子の偏光状態が，一種の 2 次元ベクトルのように表せることを示唆する．

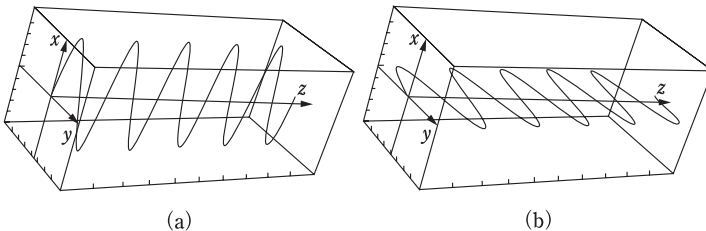


図 1.4 直線偏光：(a) x 偏光，(b) y 偏光

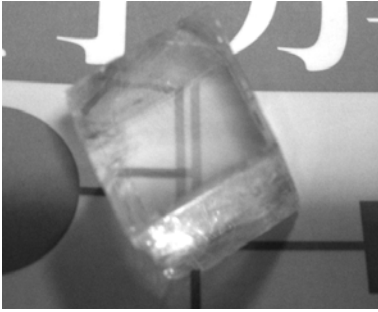


図 1.5 方解石における複屈折. 水晶でも同様の現象が起こる.

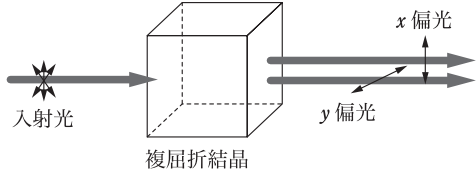


図 1.6 x 偏光と y 偏光の分離

英国の物理学者ディラックは、量子の状態を表す抽象的なベクトルを**ケット**と呼び、記号 $|\rangle$ を用いて表した。

x 偏光状態を表すケットを $|\pi_x\rangle$ 、 y 偏光状態を表すケットを $|\pi_y\rangle$ とすると、光子の状態を表すケット $|\alpha\rangle$ は、2つの係数 c_1, c_2 を用いて、 $|\alpha\rangle = c_1|\pi_x\rangle + c_2|\pi_y\rangle$ と書ける。このように線形結合で表せることを**重ね合わせの原理**という。2次元平面の位置ベクトル $\mathbf{r} = (a, b)$ を、直交する2つの単位基底ベクトル \mathbf{e}_x と \mathbf{e}_y を用いて、 $\mathbf{r} = a\mathbf{e}_x + b\mathbf{e}_y$ のように表す場合と比較すると、 $|\pi_x\rangle$ と $|\pi_y\rangle$ がここで考えている抽象的なベクトル空間の**基底**となっていることがわかる。

図 1.7 のように、反時計回りに 45° 回転した x' 軸および y' 軸方向の直線偏光を考えよう。位置 $\mathbf{r} = (x, y, z)$ 、時刻 t における波の状態は、波動関数 $\psi(\mathbf{r}, t)$ によって与えられる。光波の場合、電界ベクトル $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ が波動関数となる。 z 軸の正の向きに進む光の電界 $E(z, t)$ は、振幅を E_0 とすると、三角関数を用いて、 $E(z, t) = E_0 \cos(kz - \omega t + \phi_0)$ のように書ける。波数 k および角振動数 ω は、 $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ 、 $\omega = 2\pi\nu$ で定義される。また、 ϕ_0 は適当な初期位相である。 x 偏光および y 偏光の電界ベクトルは、それぞれ、次のようになる。

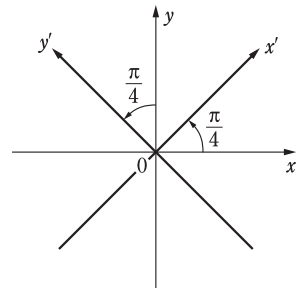


図 1.7 $45^\circ (= \frac{\pi}{4} \text{ rad})$ 回転した直線偏光

$$\mathbf{E}_x(z, t) = E_0 \mathbf{e}_x \cos(kz - \omega t + \phi_x), \quad \mathbf{E}_y(z, t) = E_0 \mathbf{e}_y \cos(kz - \omega t + \phi_y)$$

x' 偏光の光子のケットを求めるために、まず x' 偏光の波動関数 $\mathbf{E}_{x'}$ を x 偏光の波動関数 \mathbf{E}_x と y 偏光の波動関数 \mathbf{E}_y で表し、次に \mathbf{E}_x を基底ケット $|\pi_x\rangle$ に \mathbf{E}_y を基底ケット $|\pi_y\rangle$ に置き換える。

例 1.2 x' 偏光状態のケット $|\pi_{x'}\rangle$ を、基底ケット $|\pi_x\rangle$ と $|\pi_y\rangle$ で表そう。

振幅 E_0 の x' 偏光の波動関数 $\mathbf{E}_{x'}$ は、 $\phi_x = \phi_y = 0$ として

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{x'}(z, t) &= \left(E_0 \cos \frac{\pi}{4}\right) \mathbf{e}_x \cos(kz - \omega t) + \left(E_0 \sin \frac{\pi}{4}\right) \mathbf{e}_y \cos(kz - \omega t) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{E}_x(z, t) + \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{E}_y(z, t) \end{aligned}$$

ここで置き換え $\mathbf{E}_{x'}(z, t) \rightarrow |\pi_{x'}\rangle$, $\mathbf{E}_x(z, t) \rightarrow |\pi_x\rangle$, $\mathbf{E}_y(z, t) \rightarrow |\pi_y\rangle$ を行うと

$$|\pi_{x'}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\pi_x\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |\pi_y\rangle \tag{1.1}$$

解 例 1.2 にならって以下の空欄 (a)~(f) を埋めよう。

◆ y' 偏光状態のケット $|\pi_{y'}\rangle$ を、基底ケット $|\pi_x\rangle$ と $|\pi_y\rangle$ で表そう。◆

振幅 E_0 の y' 偏光の波動関数 $\mathbf{E}_{y'}$ は

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{y'}(z, t) &= - \left(E_0 \sin \overset{(a)}{\square} \right) \mathbf{e}_x \cos(kz - \omega t) && (a) \frac{\pi}{4} \\ &\quad + \left(E_0 \cos \overset{(b)}{\square} \right) \mathbf{e}_y \cos(kz - \omega t) && (b) \frac{\pi}{4} \\ &= - \frac{1}{\overset{(c)}{\square}} \mathbf{E}_x(z, t) + \frac{1}{\overset{(d)}{\square}} \mathbf{E}_y(z, t) && (c) \sqrt{2} \\ &&& (d) \sqrt{2} \end{aligned}$$

ここで置き換え $\mathbf{E}_{y'}(z, t) \rightarrow |\pi_{y'}\rangle$, $\mathbf{E}_x(z, t) \rightarrow |\pi_x\rangle$, $\mathbf{E}_y(z, t) \rightarrow |\pi_y\rangle$ を行うと

答え

$$|\pi_{y'}\rangle = -\frac{1}{(e)}|\pi_x\rangle + \frac{1}{(f)}|\pi_y\rangle \quad (1.2)$$

$$(e) \sqrt{2}$$

$$(f) \sqrt{2}$$

❖ 練習問題 1.2 ❖

図 1.8 のように、反時計回りに θ [rad] 回転した $x(\theta)$ 軸および $y(\theta)$ 軸方向の直線偏光に対応する光子のケット $|\pi_{x(\theta)}\rangle$ と $|\pi_{y(\theta)}\rangle$ を、基底ケット $|\pi_x\rangle$ と $|\pi_y\rangle$ で表せ。

詳解は 165 ページ

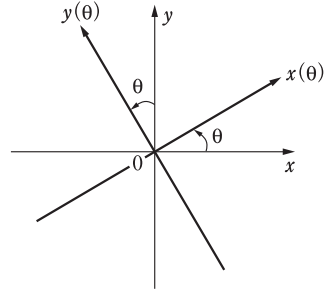


図 1.8 θ [rad] 回転した直線偏光

図 1.9 に示すように、電界ベクトルの先端が円を描くように伝搬する光を**円偏光**という。回転方向によって、右回り円偏光と左回り円偏光の 2 つの異なった状態が存在する。なお、進行方向にみるか、対向してみるかによって右と左が入れ替わることに注意しよう。ここでは、図 1.9(a) を右回り、図 1.9(b) を左回りと呼ぶことにする。水晶や方解石などの複屈折結晶では、ある方向において直交する 2 つの直線偏光成分の間に光が通過する距離に応じた位相差を生じる。位相差 $\frac{\pi}{2}$ を与えるように結晶の向きと厚さを調整した素子を $\frac{\lambda}{4}$ 板といい、直線偏光を円偏光（あるいはその逆）に変換するのに使われる。

z 軸の正の向きに進む右回り円偏光の電界ベクトル $\mathbf{E}_R(z, t)$ は、 x 偏光と位相が $\frac{\pi}{2}$ ずれた y 偏光の和として

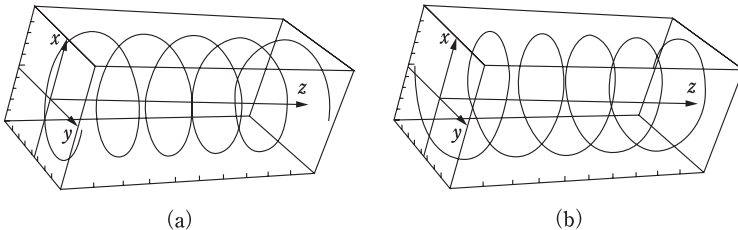


図 1.9 円偏光：(a) 右回り，(b) 左回り