電子工学05

津山工業高等専門学校情報工学科講師
電気通信大学先進理工学科協力研究員
藤田 一寿

ver. 20161108

前回までの復習

- 電子の持つエネルギーは飛び飛びの値を取る（連続の値ではない）
- エネルギーが最も低い状態を基底状態という
- 高いエネルギー状態に電子が変わることを励起という。
  - エネルギーが高い状態を励起状態という。
- エネルギーが高い状態（励起状態）から低い状態に変わることを脱励起という。

前回までの復習

- ボーア模型
  - 電子の軌道を円と仮定
  - 電子の物質波は軌道上で連続な定在波として存在する
  - 水素原子に関して実験的事実をうまく説明できる（ボーア模型からリュードベリ定数を計算できるため）

ボーアモデルの限界

- ボーアモデルは電子の軌道が円軌道であることを前提としている
- 水素では実験的事実を説明できたが、それ以外の元素では説明できなかった。
- 円軌道に限らなければ他の元素に対しても説明できる
  - ゾンマーフェルトの量子条件

量子数

- ボーア模型では主量子数のみで説明されていたが、実際には3つの量子数で電子の軌道が決まる
  - 主量子数 n
  - 方位量子数(角運動量量子数) l
  - 磁気量子数 m

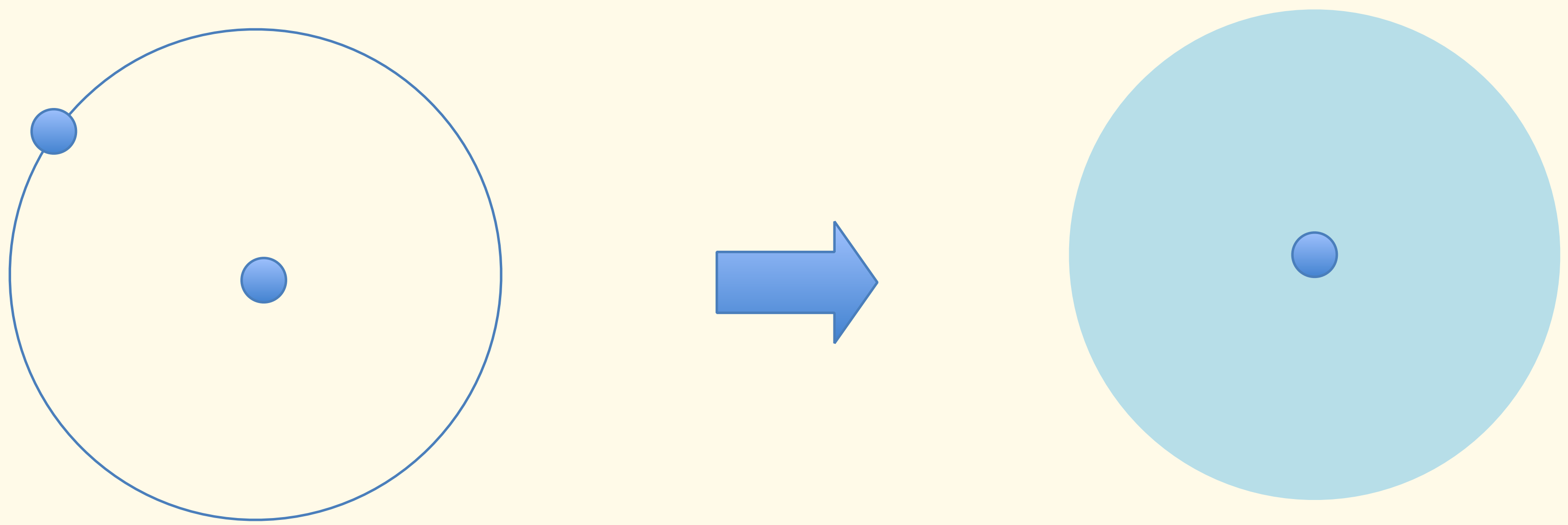
電子の軌道に関してはこれ以上深入りしないよ…

スピンってなんだ

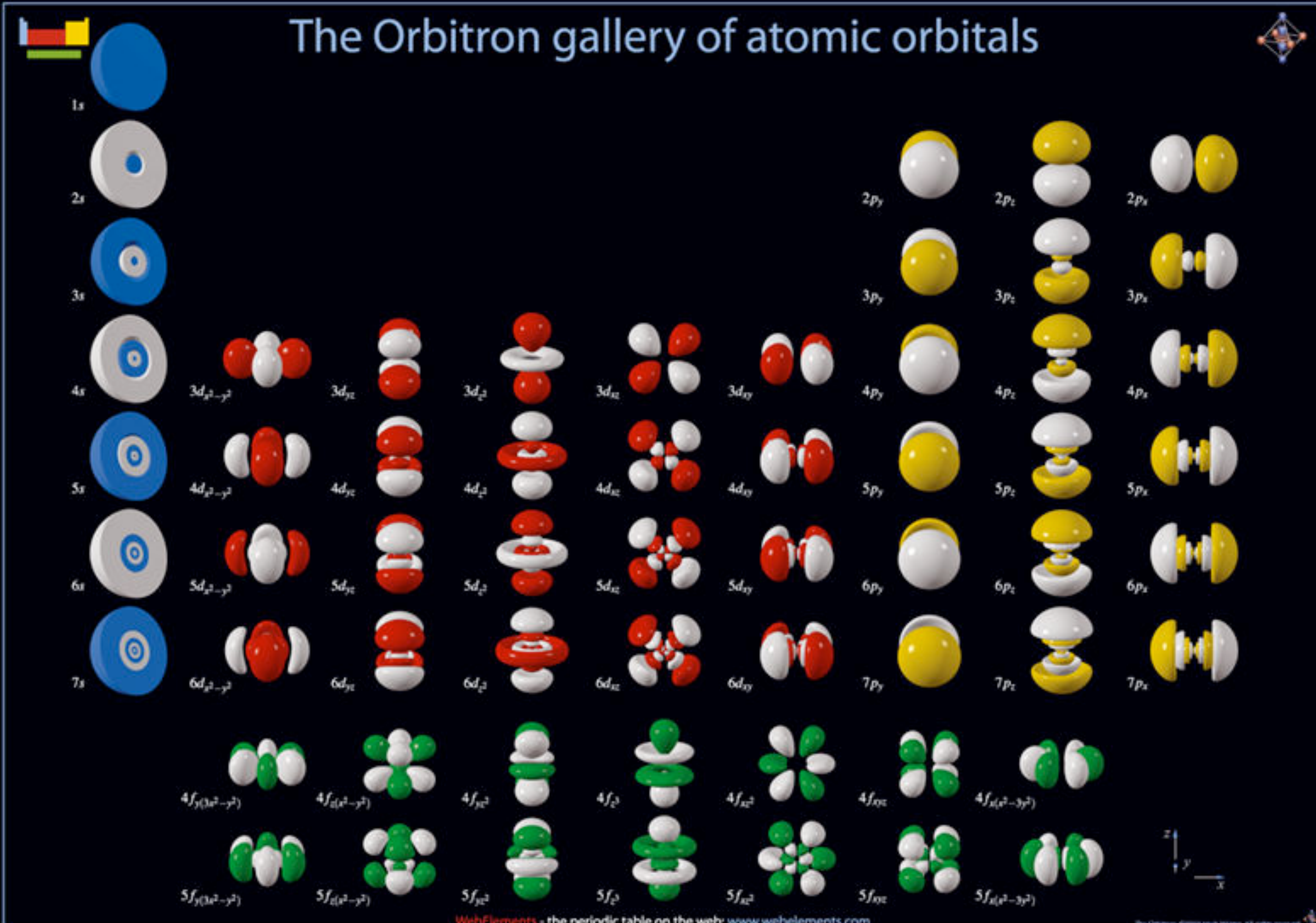
- 電子のスピン
  - 電子は自転しない
    - 電子が自転していると すると色々問題がある
    - 自転という概念自体が古典論的
  - 電子が持つ物理量の一つ
    - 古典的世界感では説明できない

原子モデル

- 実際の電子の軌道はラザフォードの原子モデルのような太陽系の惑星のように電子が原子核の周りを回っているわけではない。
- 原子核の周りに雲のようにぼやっと存在している(電子雲)



ラザフォードの原子モデル


The Orbitron gallery of atomic orbitals
1s
2s
3s
4s
5s
6s
7s
$2p_y$
$2p_z$
$2p_x$
$3p_y$
$3p_z$
$3p_x$
$3d_{x^2-y^2}$
$3d_{yz}$
$3d_{z^2}$
$3d_{xz}$
$3d_{xy}$
$4p_y$
$4p_z$
$4p_x$
$4d_{x^2-y^2}$
$4d_{yz}$
$4d_{z^2}$
$4d_{xz}$
$4d_{xy}$
$5p_y$
$5p_z$
$5p_x$
$5d_{x^2-y^2}$
$5d_{yz}$
$5d_{z^2}$
$5d_{xz}$
$5d_{xy}$
$6p_y$
$6p_z$
$6p_x$
$6d_{x^2-y^2}$
$6d_{yz}$
$6d_{z^2}$
$6d_{xz}$
$6d_{xy}$
$7p_y$
$7p_z$
$7p_x$
$4f_{y(3x^2-y^2)}$
$4f_{z(x^2-y^2)}$
$4f_{yz^2}$
$4f_{z^3}$
$4f_{xz^2}$
$4f_{xyz}$
$4f_{x(x^2-3y^2)}$
$5f_{y(3x^2-y^2)}$
$5f_{z(x^2-y^2)}$
$5f_{yz^2}$
$5f_{z^3}$
$5f_{xz^2}$
$5f_{xyz}$
$5f_{x(x^2-3y^2)}$
z
y
x
WebElements - the periodic table on the web: www.webelements.com

量子力学

- 小さな粒子の振る舞いはニュートン力学では記述できない
  - 粒子なのに波の性質を持つ
- 小さな粒子の振る舞いを扱う力学が量子力学

シュレディンガー

- 1887年ウィーン生まれ
- 1926年シュレディンガー方程式(39歳)
- 1933年ノーベル物理学賞受賞
- 1935年シュレディンガーの猫提唱
- 物理をやめて生物をやる
- 1944年「生命とは何か」を出版
  - 分子生物学の道を開く
  - 遺伝子について考察
    - ワトソンとクリックに影響を与える

シュレディンガー方程式

- 量子力学の基礎方程式はシュレディンガー方程式

$$\mathcal{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

Hはハミルトニアン(演算子)

Ψは波動関数(粒子の状態を表す)

ポテンシャルエネルギー

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \boxed{V(\boldsymbol{r})}$$

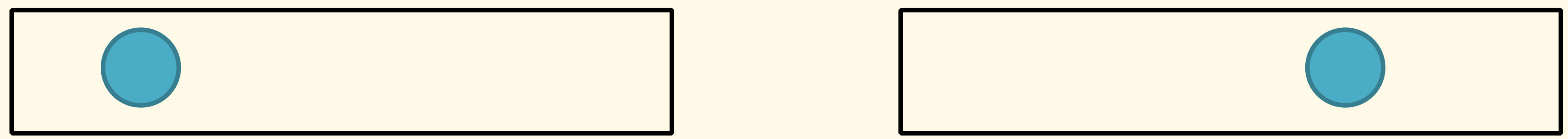
シュレディンガー方程式がなぜそうなるか気にしない

時間に依存しない1次元のシュレディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x)$$

波動関数とは何か

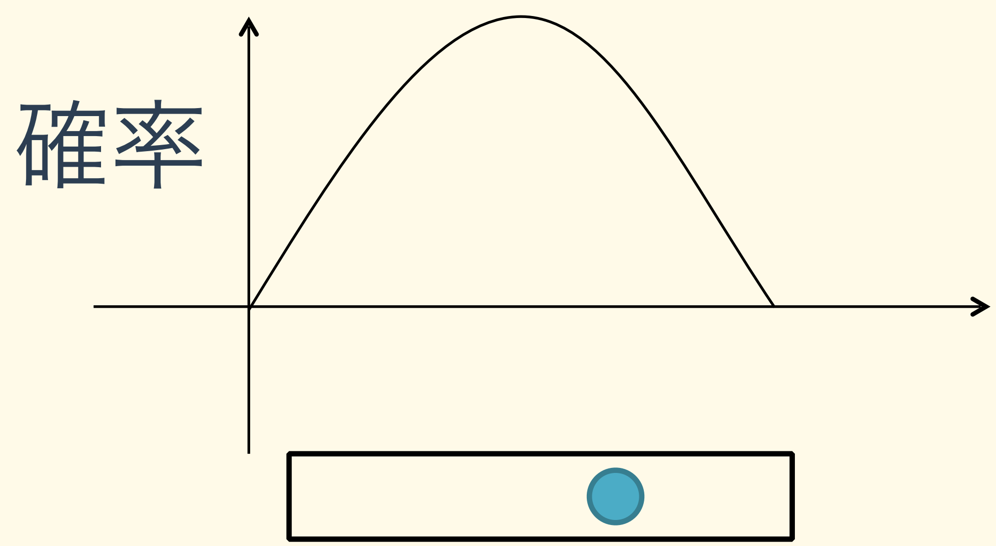
1次元の箱にある粒子は箱のどこにあるかまでは正確に分からない。



どこにある？

確率で考える

波動関数と関係する



見えないなら確率で考えよう

波動関数とは何か

- 波動関数の絶対値の自乗が粒子の存在確率を表すと考えるとなぜか実験と合う

$$|\Psi|^2 = \Psi\Psi^*$$

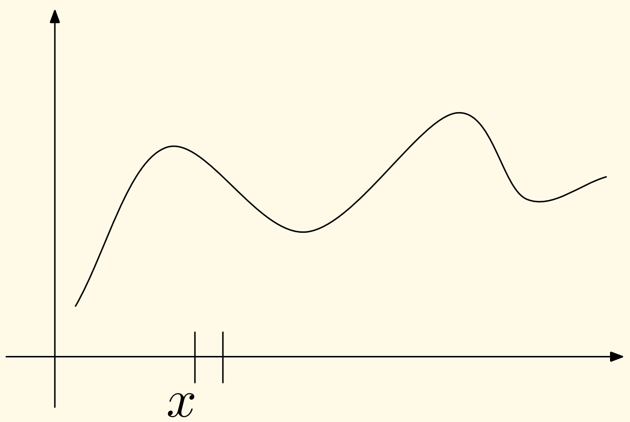
存在確率(発見確率)

波動関数は、実は虚数も許されるので複素共役とかけることで存在確率になる

規格化条件

- 波動関数の自乗は確率密度関数になる.
- 当然、確率密度関数は全空間で積分すれば1となる

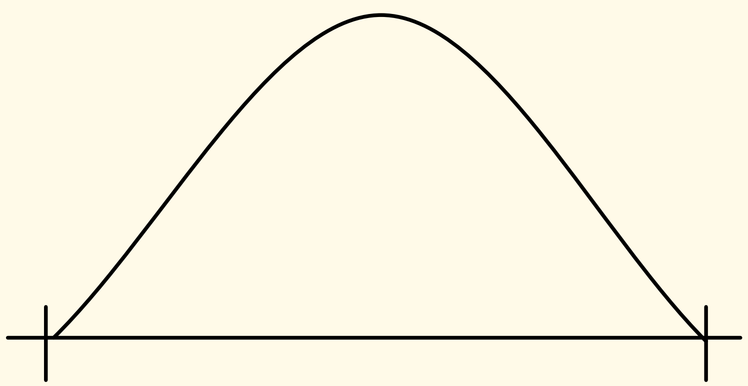
$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1$$



規格化条件という。
要は、全空間のどこかには粒子はあるということを意味する。
もし1でなければ、空間内に存在しない可能性もある。

波動関数の収縮

- 観測前の波動関数



どこにあるかわからないので、
波動関数は広がりを持っている

- 観測後の波動関数
  - 観測すると位置が特定されるので波動関数は
  δ関数となる（広がりがなくなる）。

どこにあるかわかっているので、波動関数は観測した場所のみ1となる。

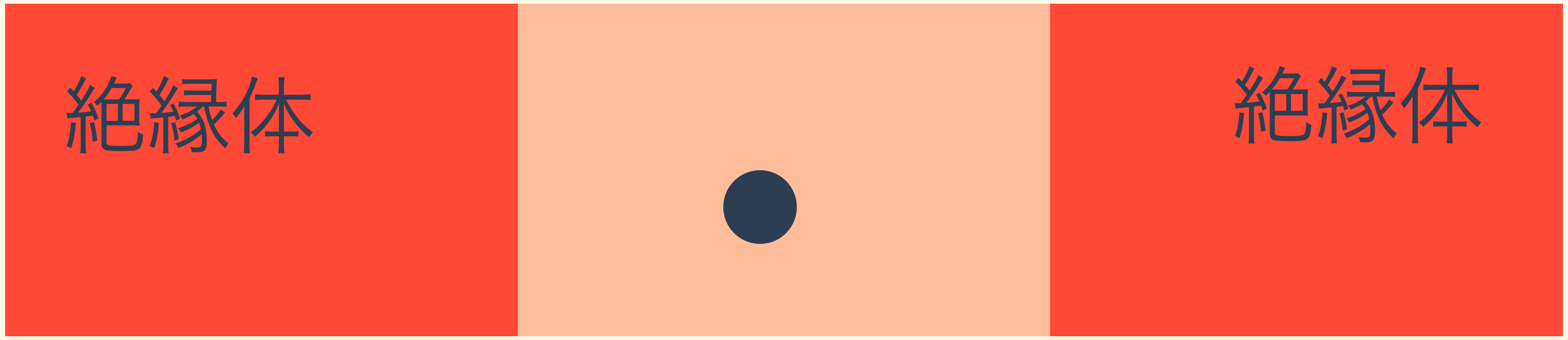
無限に深い井戸型ポテンシャル

絶対外に出ることができない箱のなかに粒子がある状態。

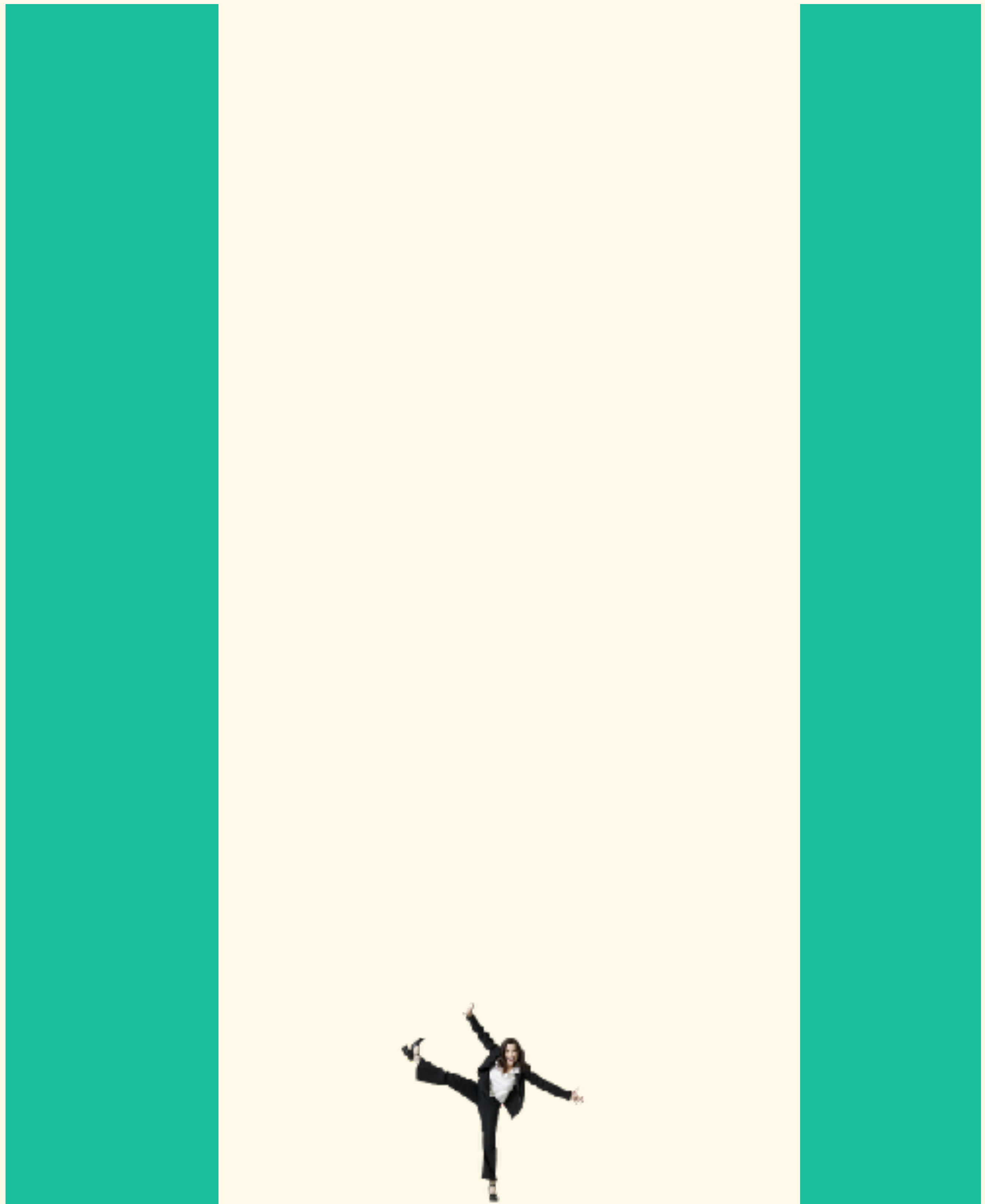
具体的な系

導体が絶縁体の間に挟まれている(絶縁体なので伝導電子は存在しない)。

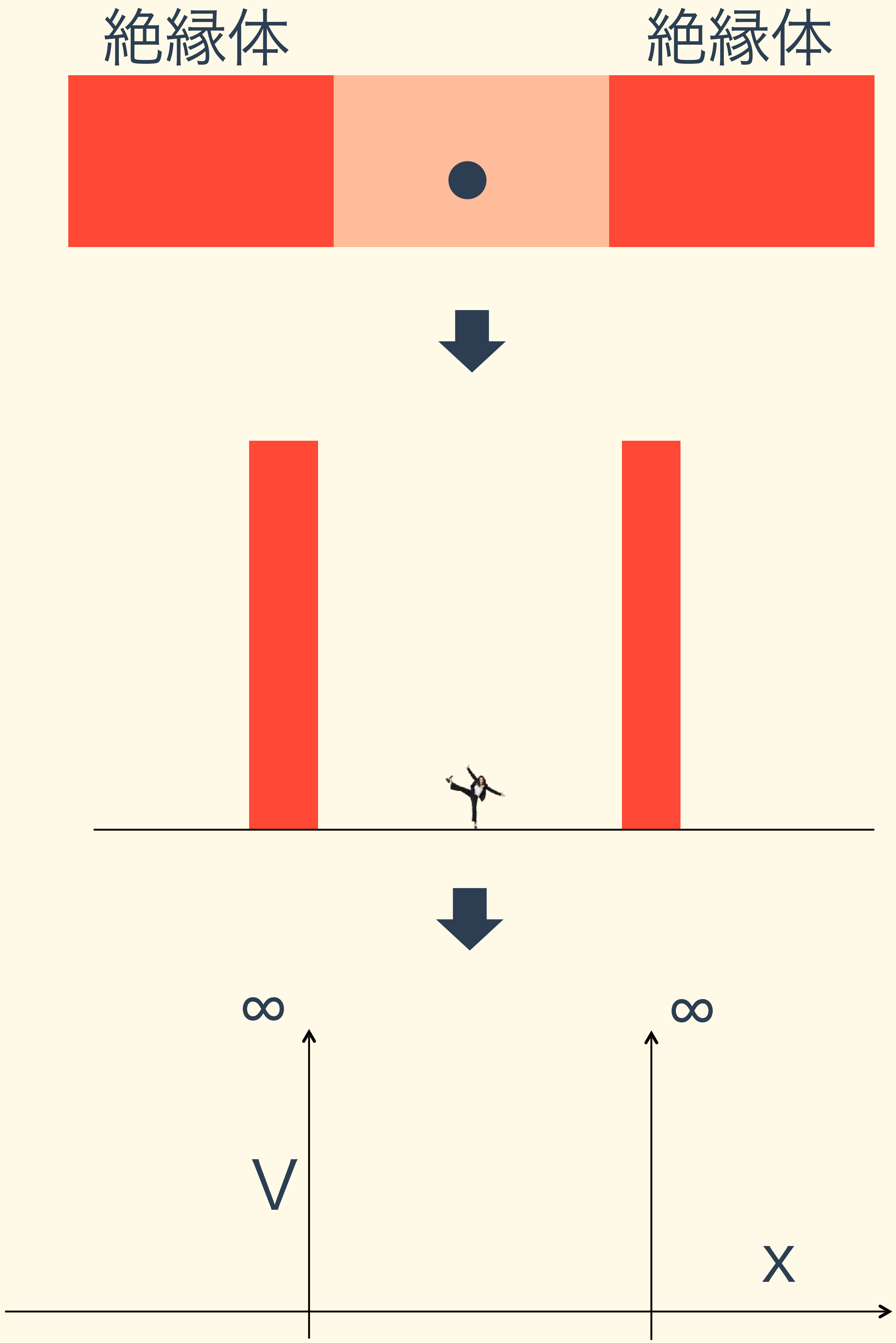
導体の中に伝導電子が1つある。



人間で例えると

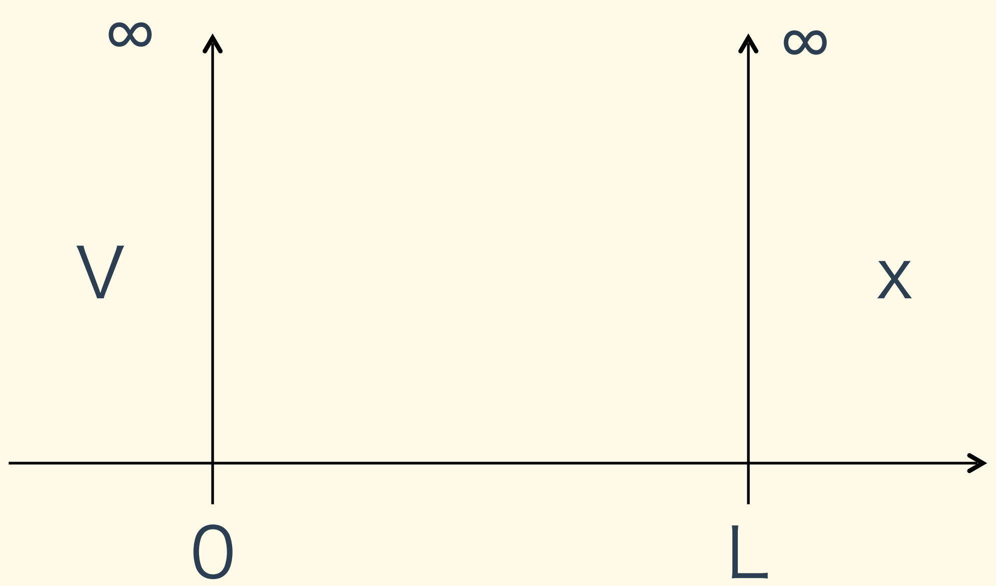


とてつもなく
高い壁に囲ま
れている


絶縁体
絶縁体
∞
∞
V
X

ド・ブロイの関係式から考えてみる

ド・ブロイ波は定在波として存在しているとすると、定在波の最大波長は2Lなので



$$n\lambda = 2L$$

$$\lambda = 2L/n$$

ド・ブロイ波は波なので正弦波か余弦波である。

x=0,Lのとき粒子は存在しないので正弦波となる。

$$\phi = A\sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right) \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

本当はシュレディンガー方程式を解かなければなりません

無限に深い井戸型ポテンシャルの波動関数

規格化条件より

$$\int_0^L (A\sin(\frac{\pi n x}{L}))^2 dx = 1$$

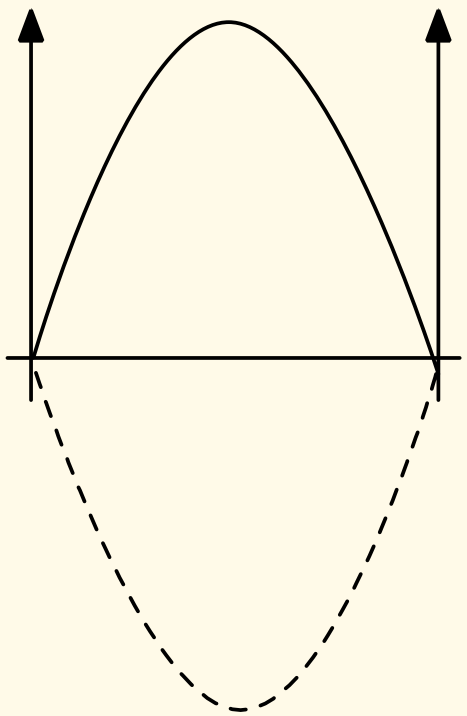
なので

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

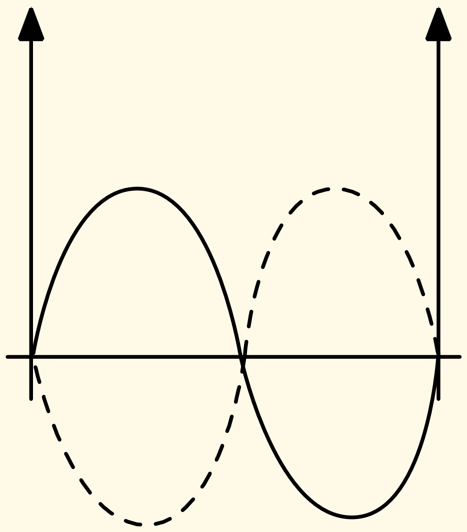
よって無限に深い井戸型ポテンシャルの波動関数は

$$\phi = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{\pi n x}{L})$$

n=1の時の波動関数



n=2の時の波動関数

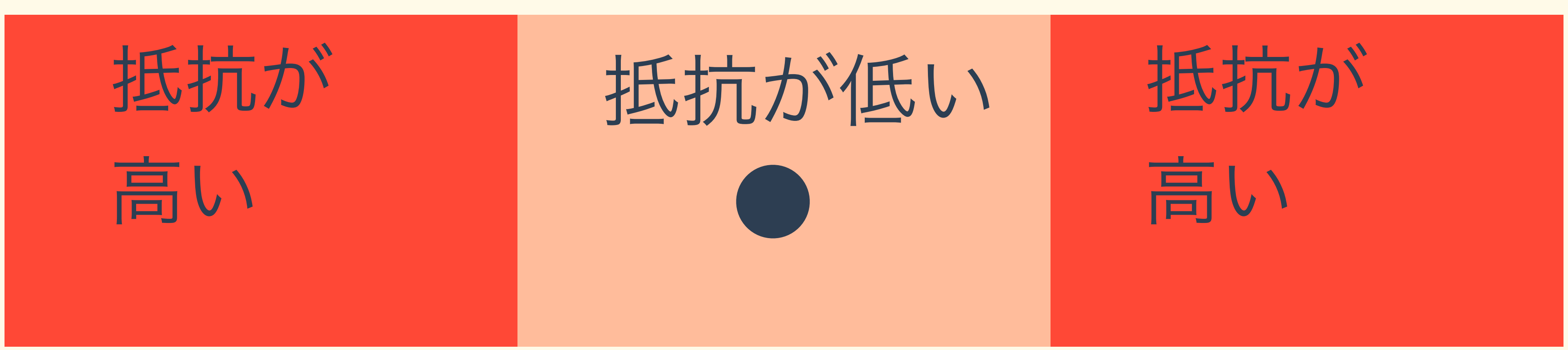


有限の深さの井戸型ポテンシャル

少し高い壁に囲まれたなかに粒子がある状態。

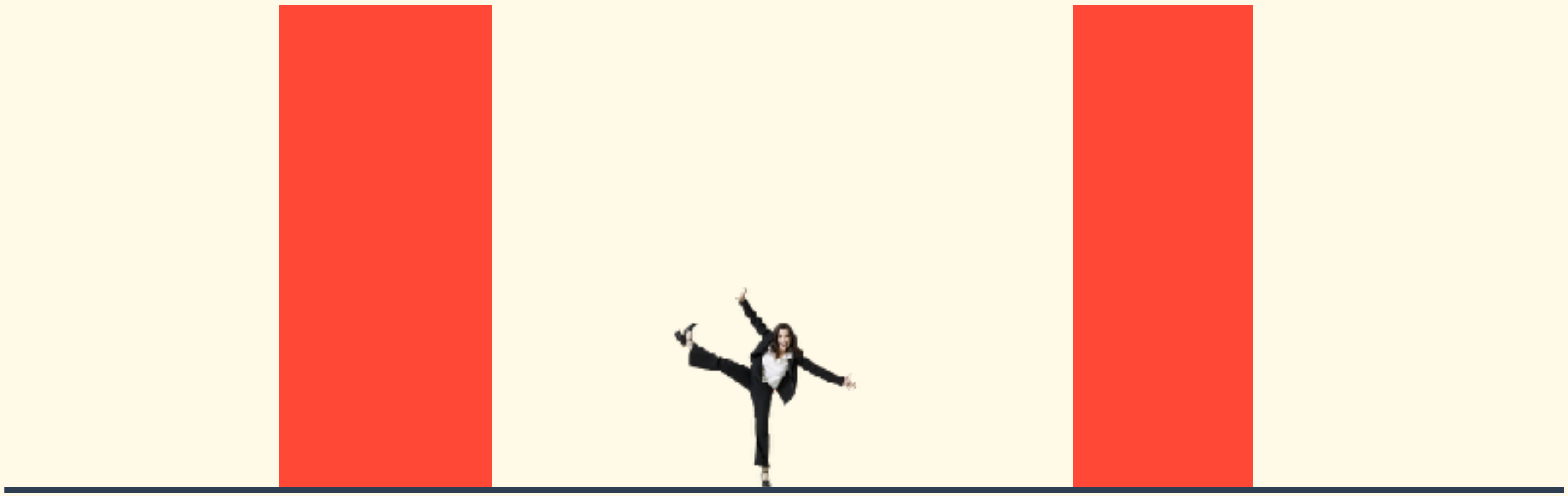
具体的な系

導体が抵抗が高い物質の間に挟まれている(普通は伝導電子は少ない)。
導体の中に伝導電子が1つある。

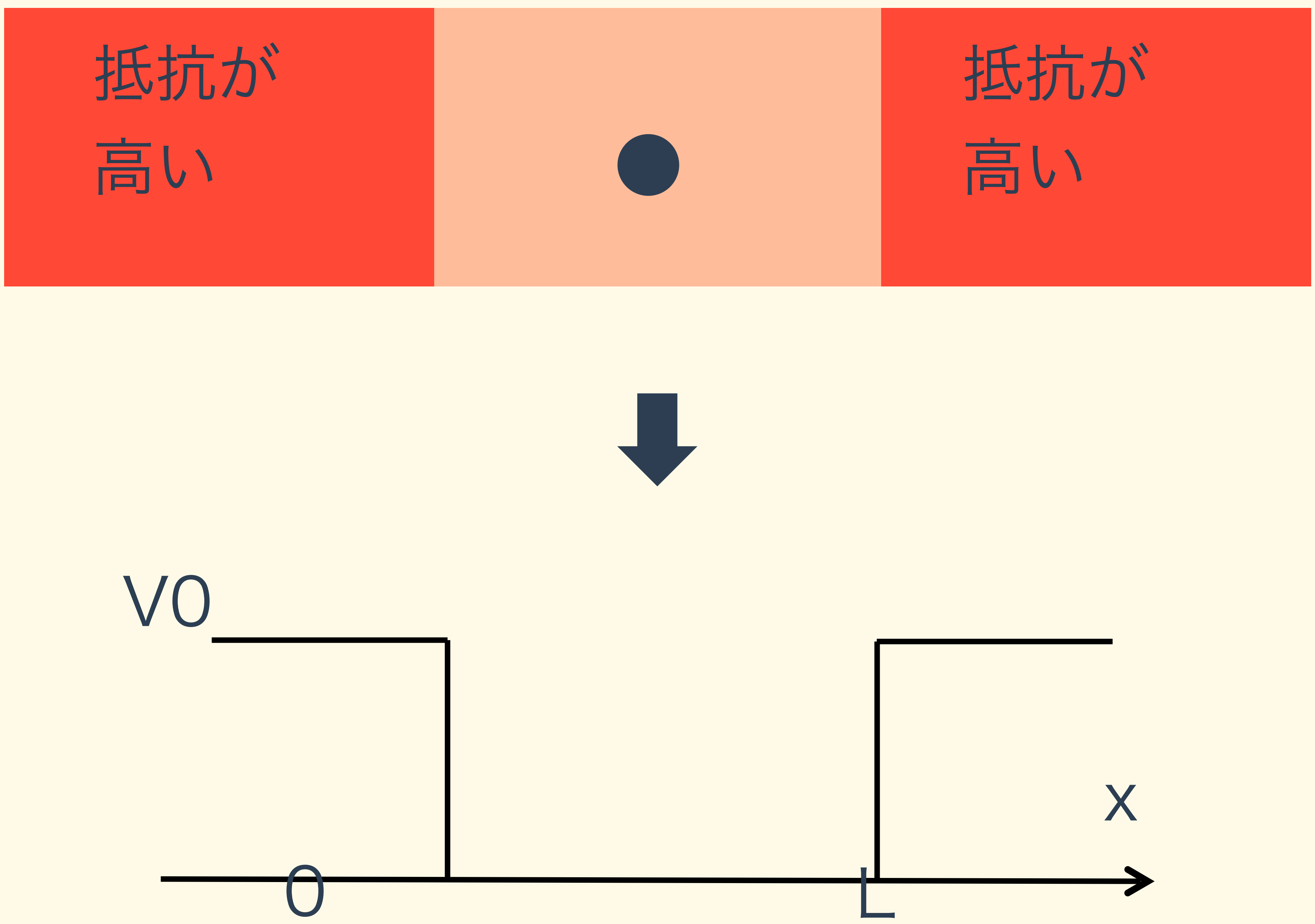


人間で例えると

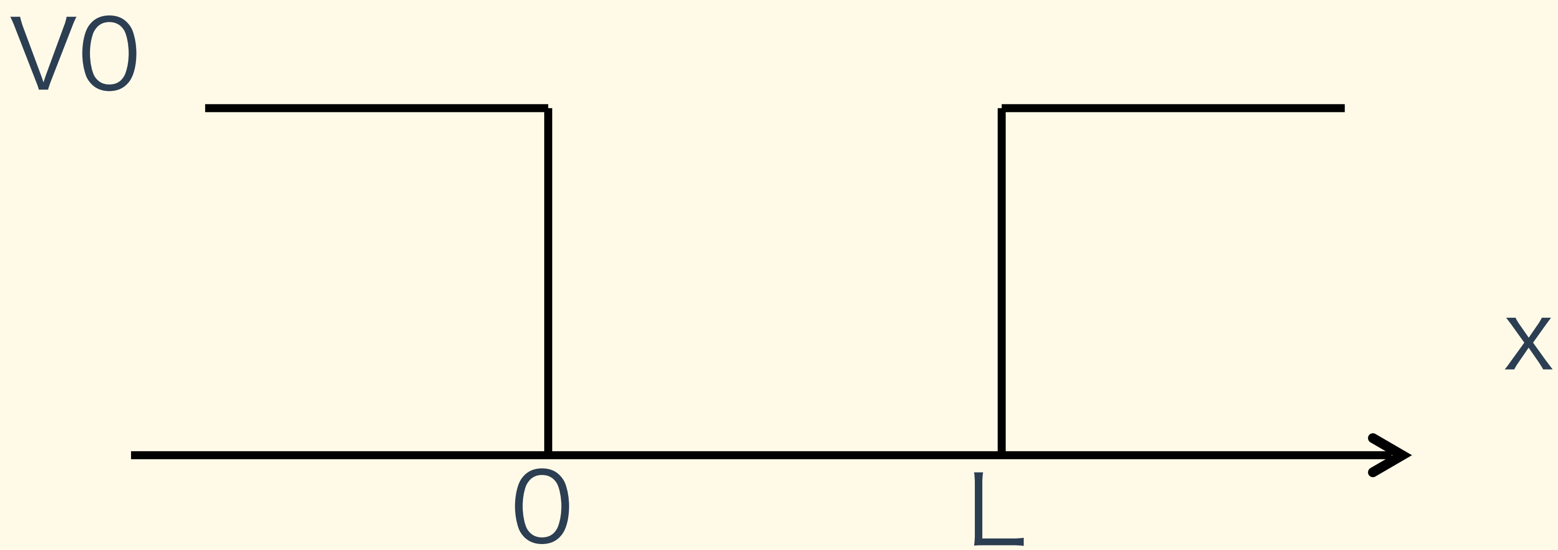
飛び越えられない程度の壁がある



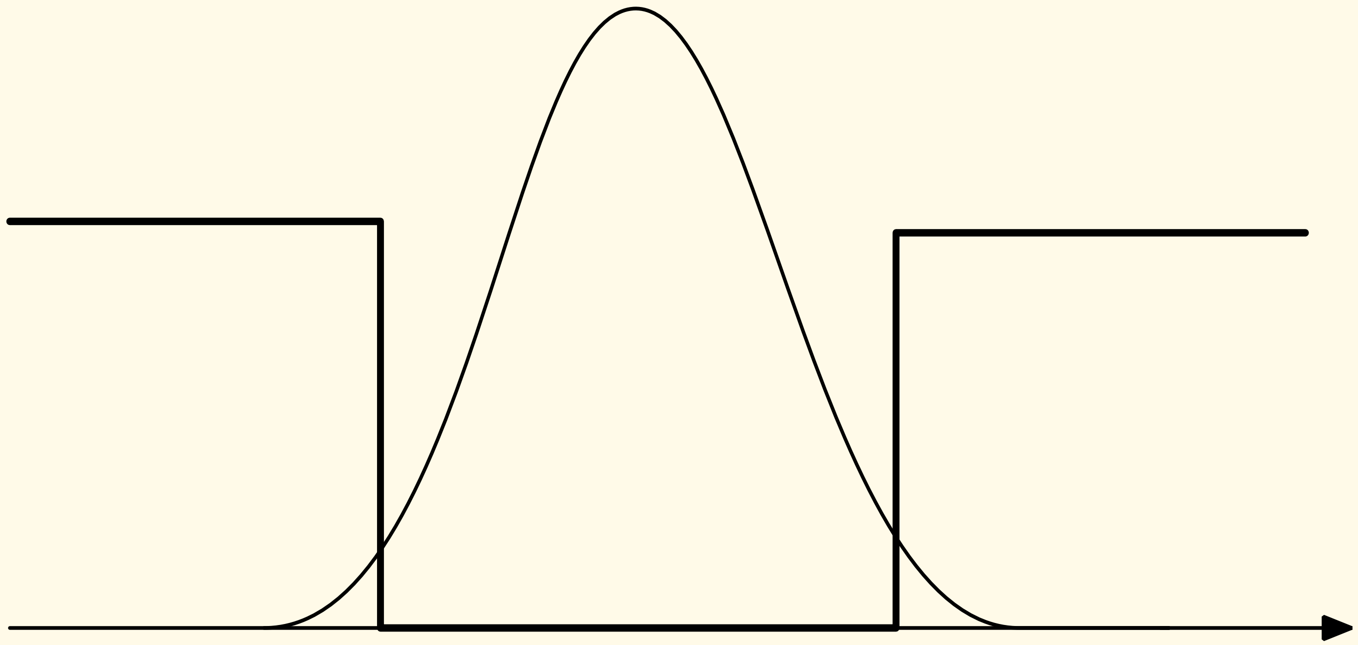
有限の深さの井戸型ポテンシャル



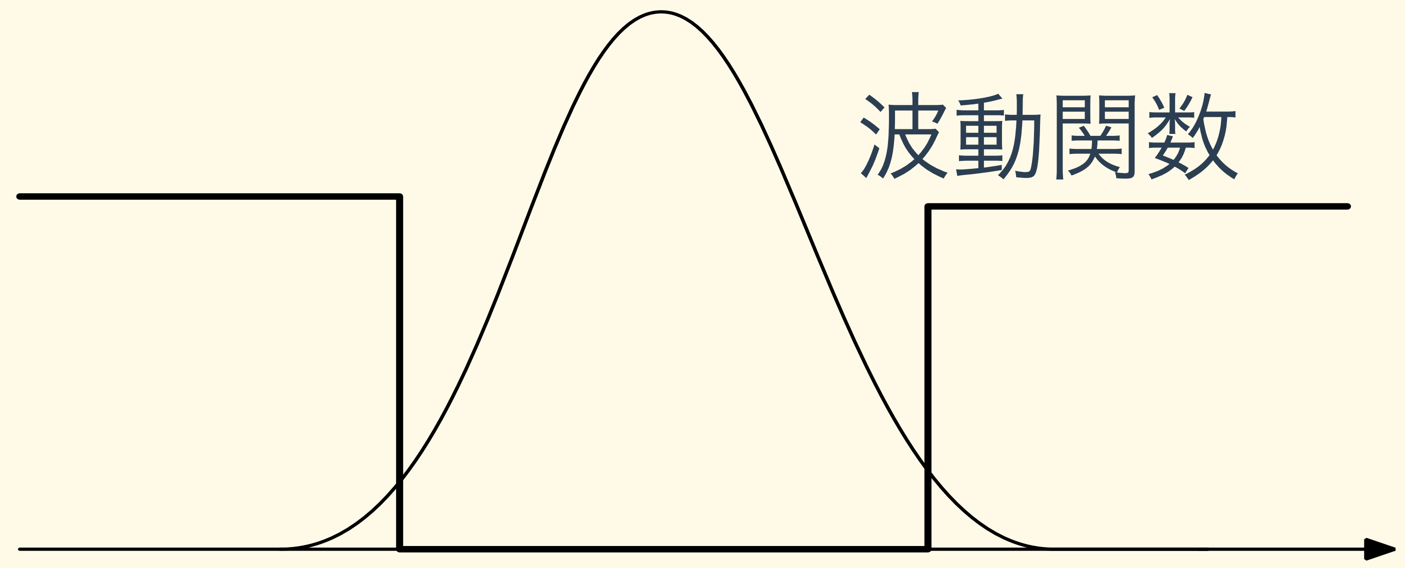
有限井戸型ポテンシャルの波動関数

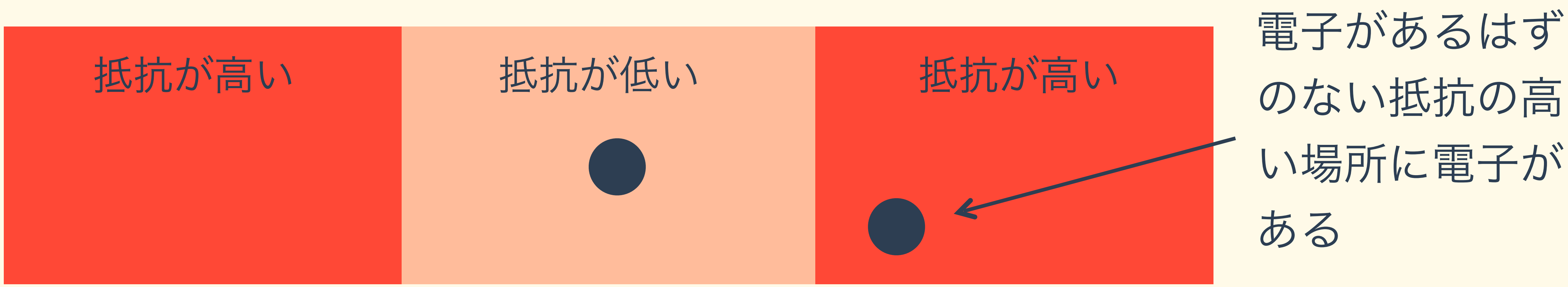


波動関数(粒子の存在確率)



波動関数の染み出し





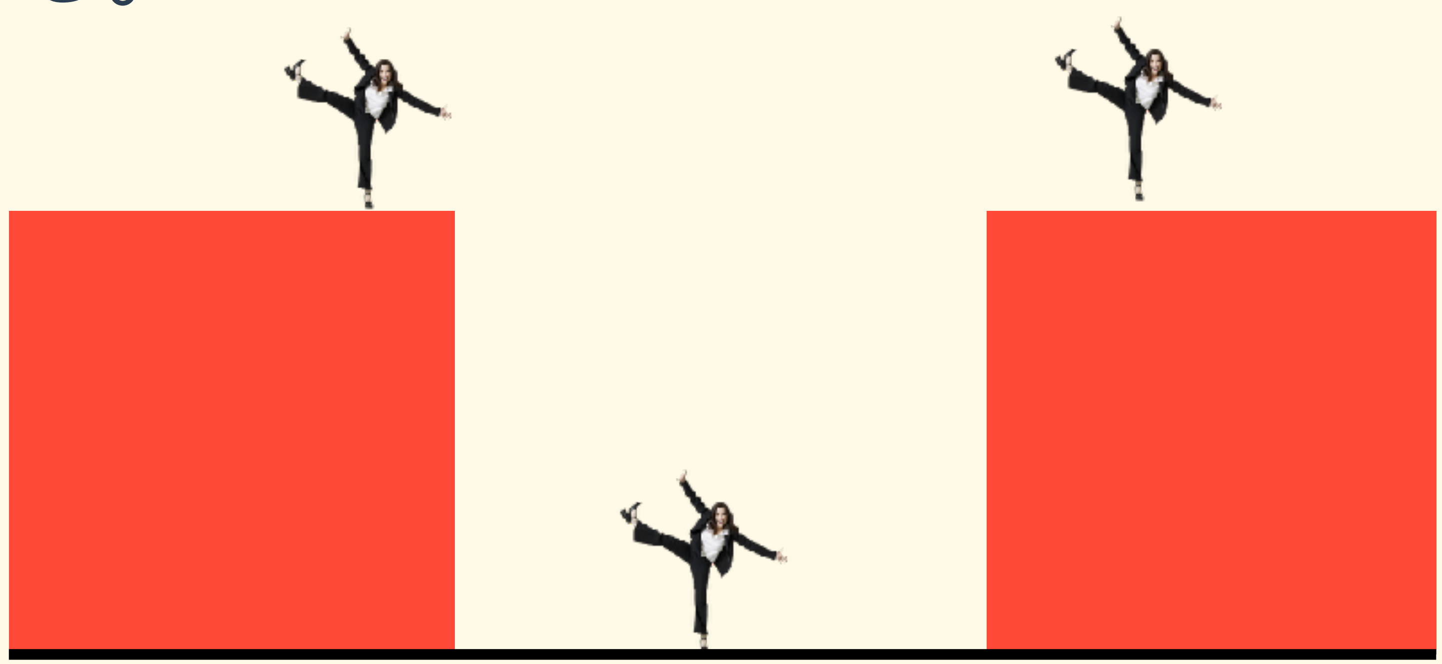
ポテンシャルが高い場所(抵抗が高い場所)にも波動関数は値を持っている（波動関数の染み出し）。
回路の例では、抵抗が高い場所にも電流が流れる可能性がある。

波動関数の染み出しの意味

古典的な世界では、壁が高ければ外に出られない

ジャンプしても
外に出られない

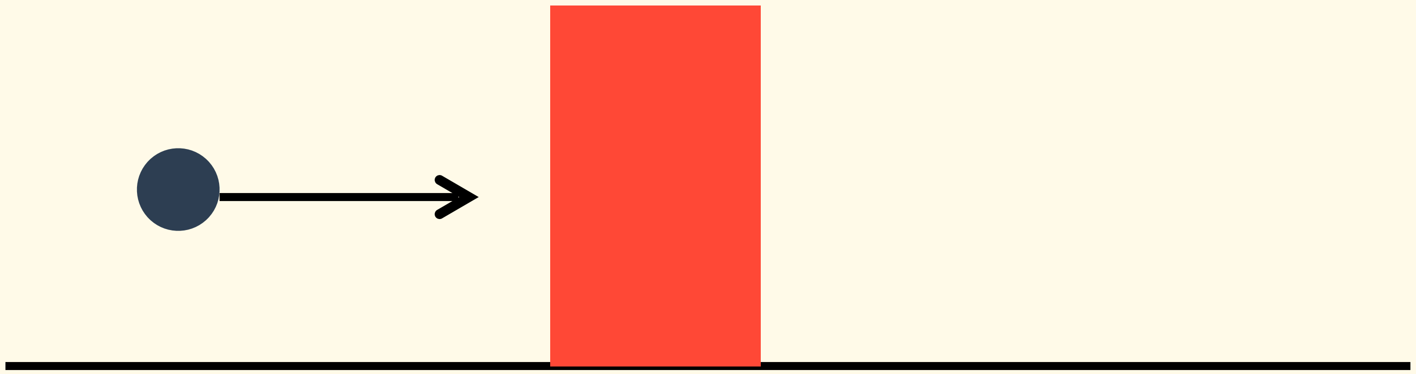
量子力学の世界では、飛び越えられない高さ壁の上に登っている可能性がある。



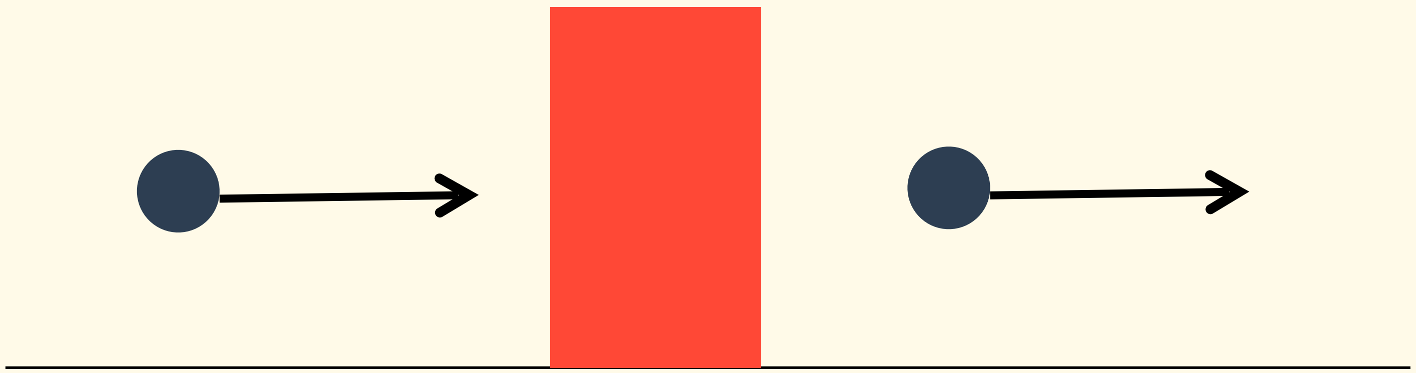
何もしていない
のになぜか壁の
上に登っている
かもしれない。

トンネル効果

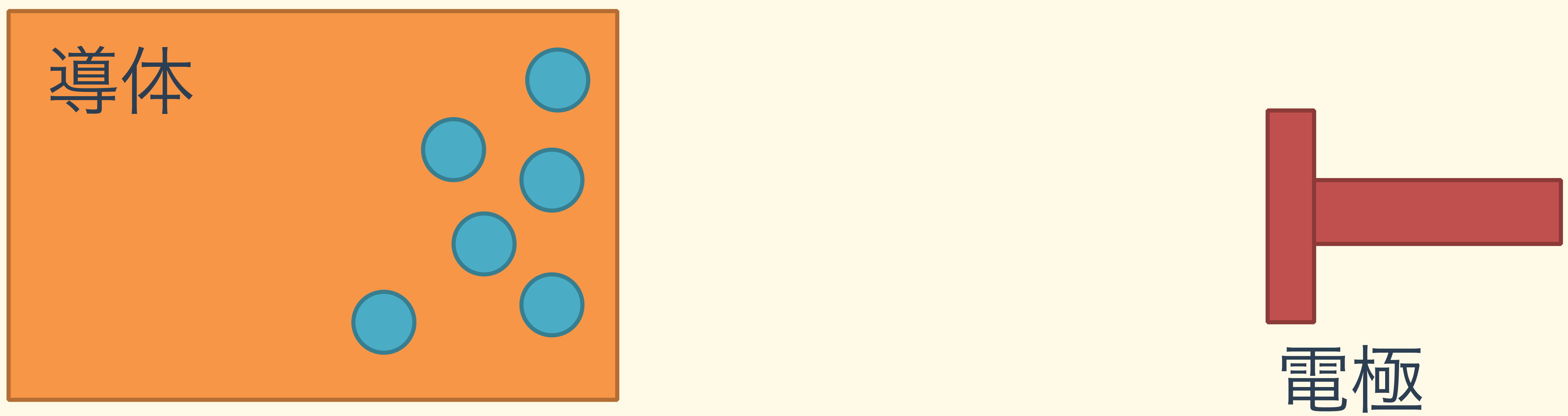
古典的な世界では、壁を粒子が突き抜けることはない

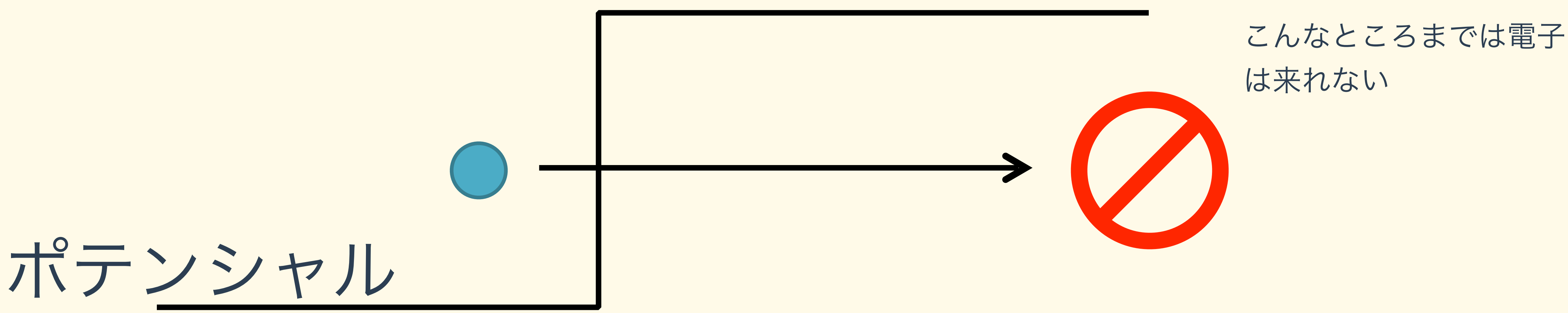


量子力学の世界では、壁を突き抜ける可能性がある。



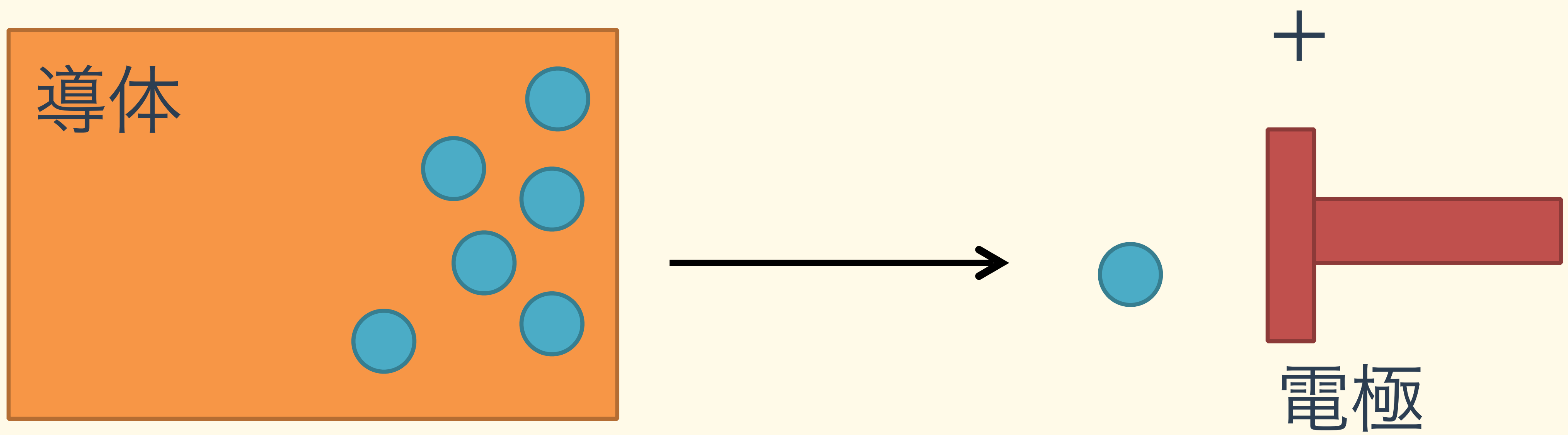
電界電子放出

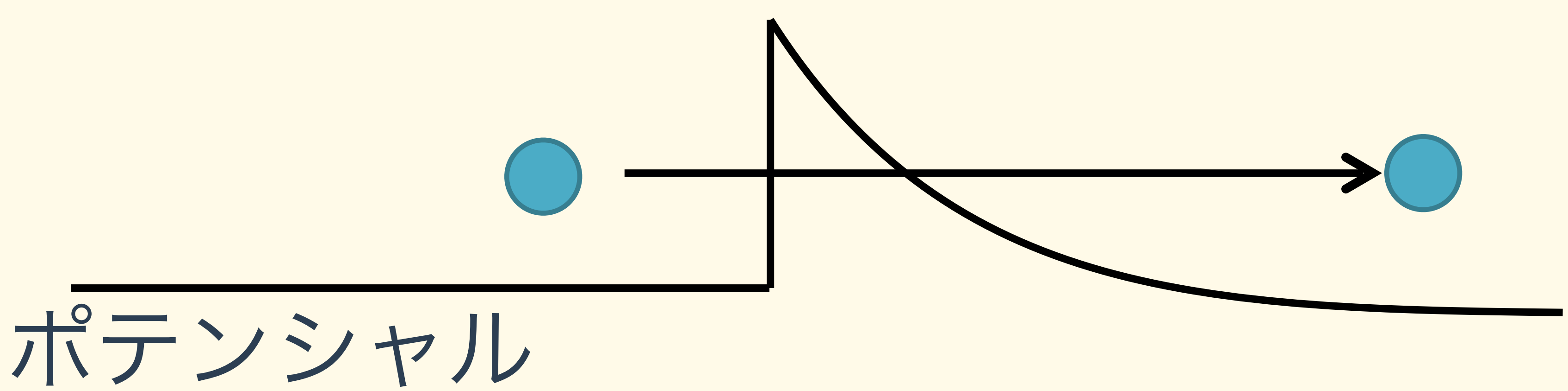




導体内の方がポテンシャルが低く居心地がいい

電界電子放出



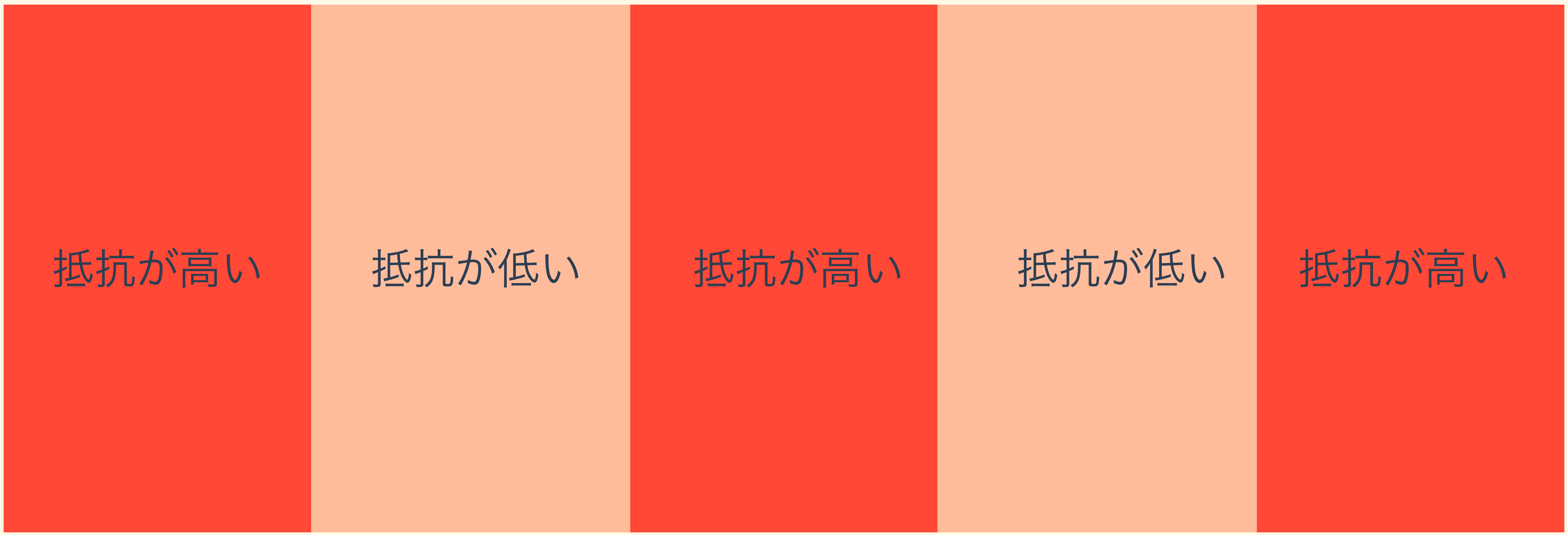


電極付近はポテンシャルが低いので、
障壁さえ突破すれば良い

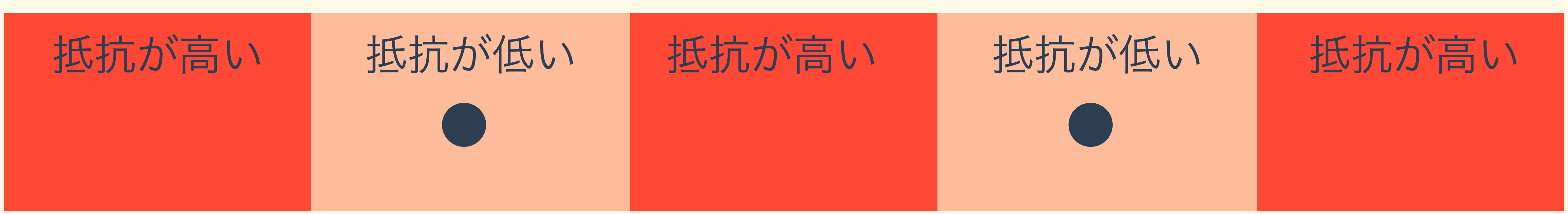
電場が生じると＋電極側もポテンシャルが低くなる。
障壁が薄くなりトンネル効果により電極側に電子が飛んでいく。

リーク電流

IC上の回路

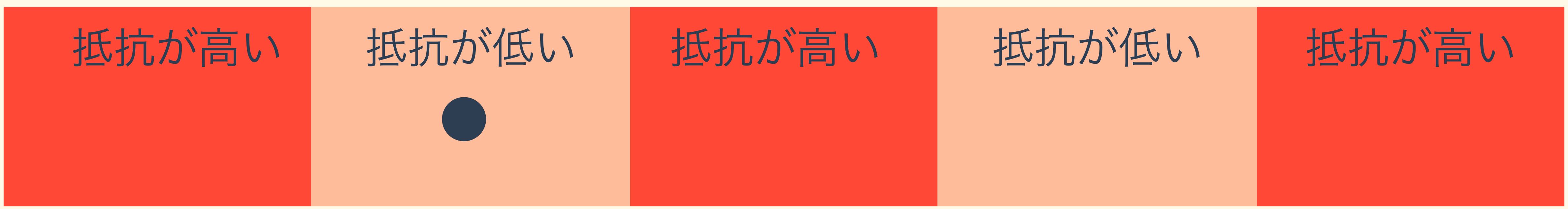


断面



リーク電流

ICの断面



電流が流れている　電流が流れていない

電流が流れている　電流が流れていない

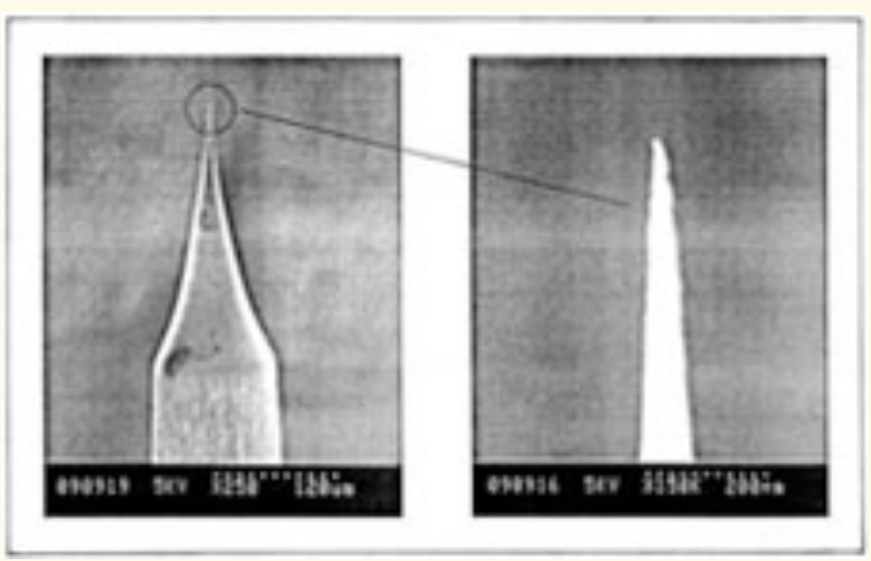
隣の回路にトンネル効果で電子が移動することがある。

電流が流れている　電流がちょっと流れる

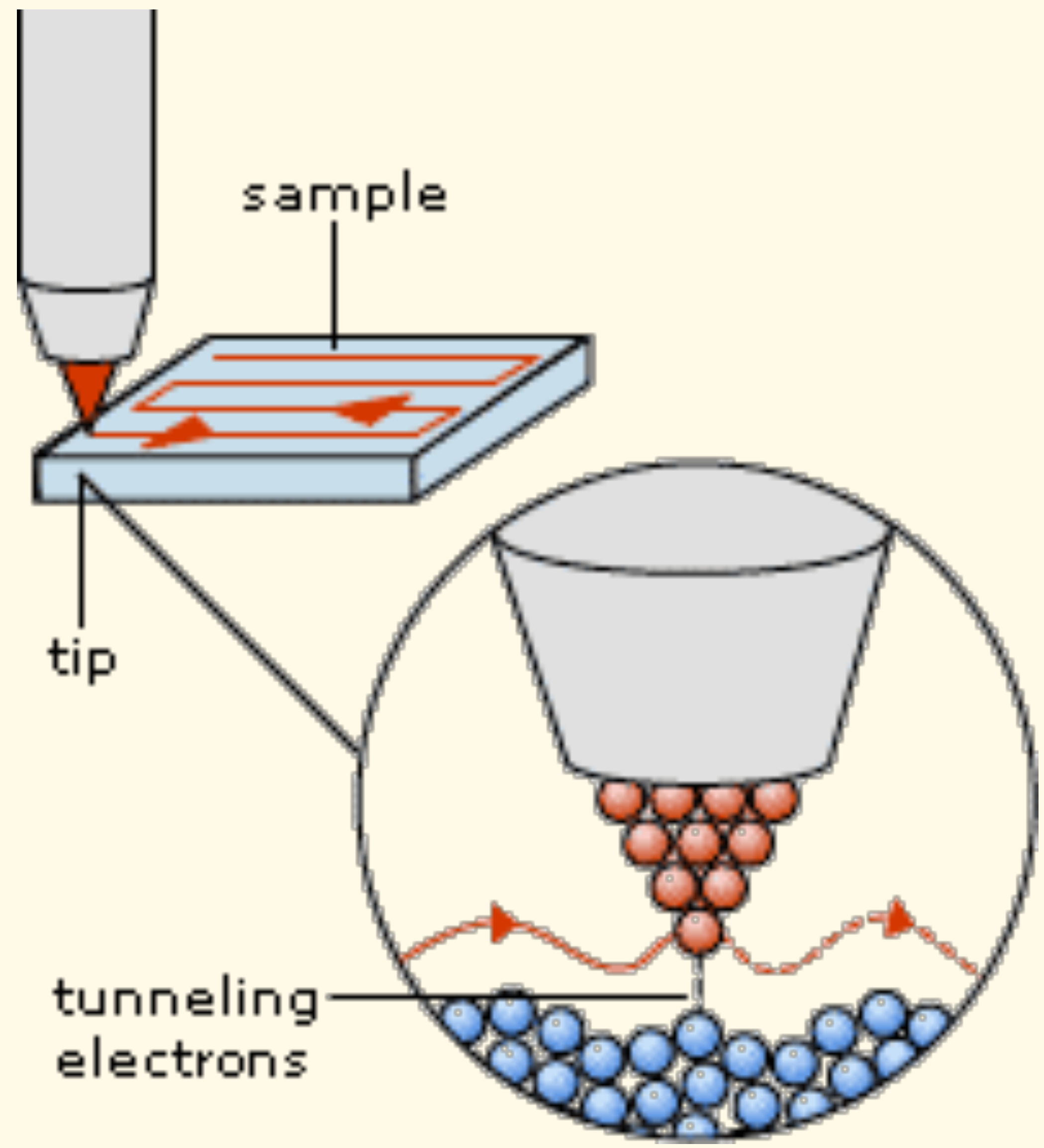
流れてはいけない場所に電流が漏れる(leak)

走査型トンネル顕微鏡

探針と試料との間に生じるトンネル電流により試料表面の凹凸を調べる顕微鏡

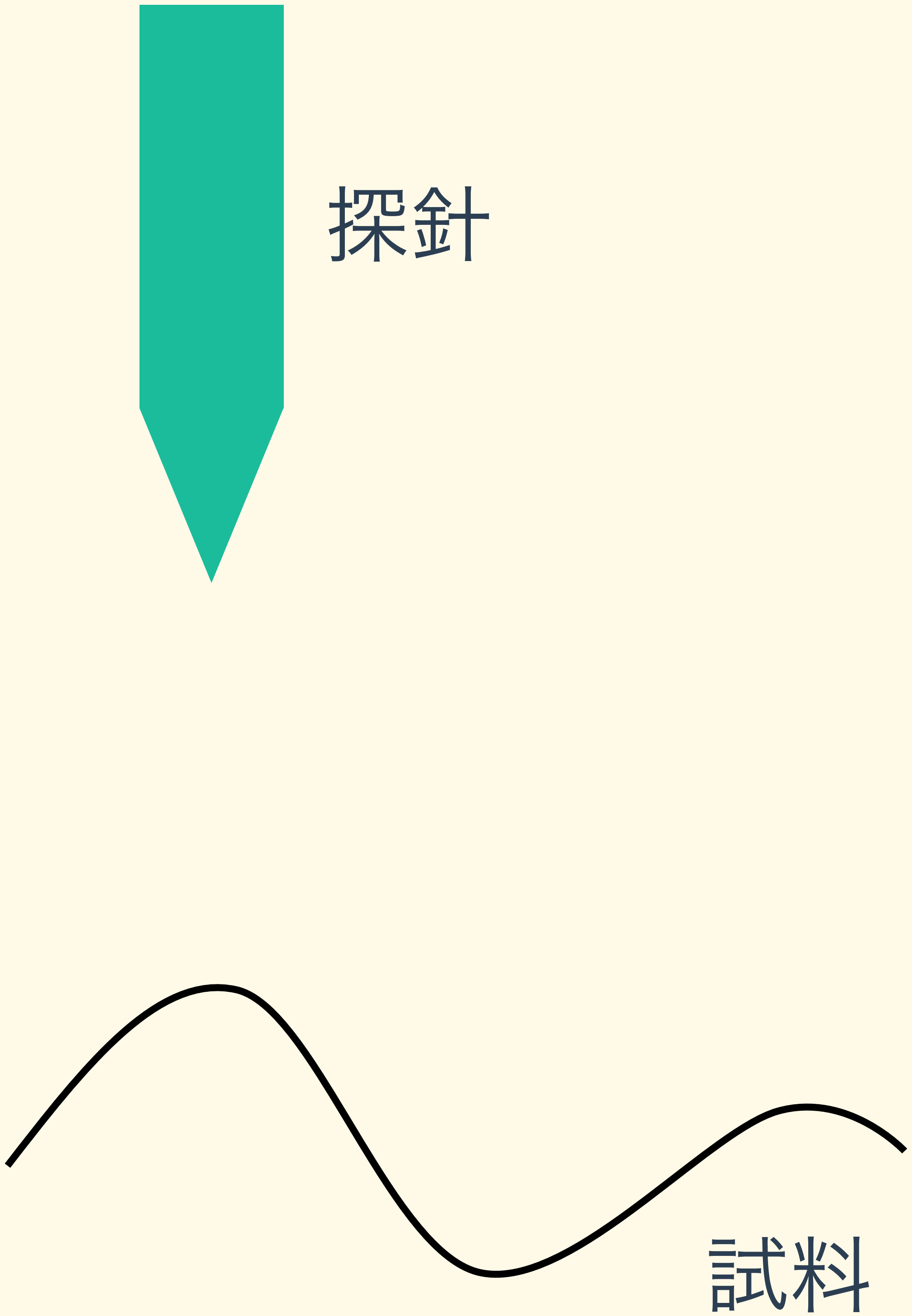


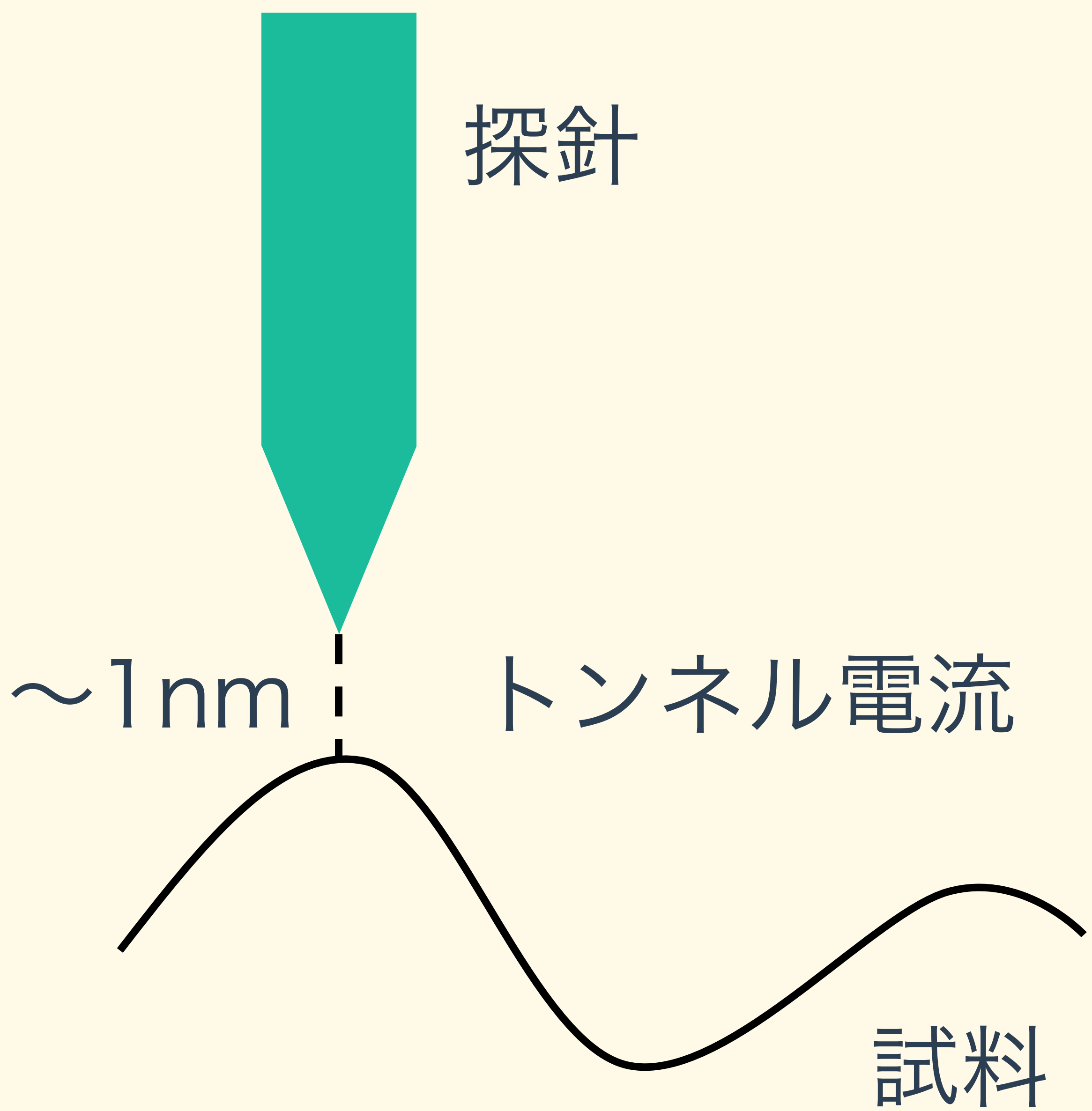
(SII)



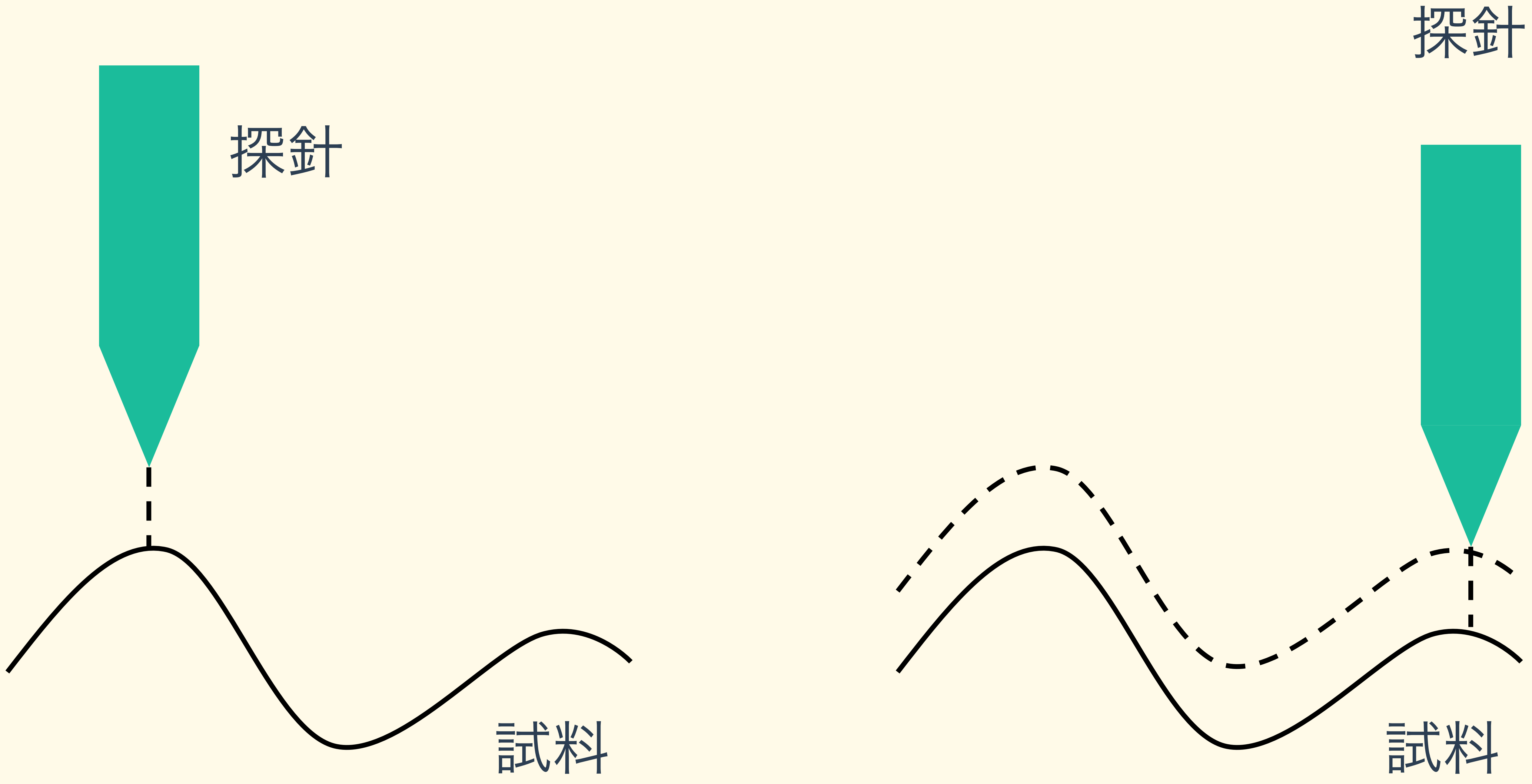
(norbelprize.org)

探針を近づけるとトンネル効果により、電子が試料と探針の間を移動する。





トンネル電流が流れる間隔を保ちながら探針を移動させてやれば、試料表面の凹凸がわかる。



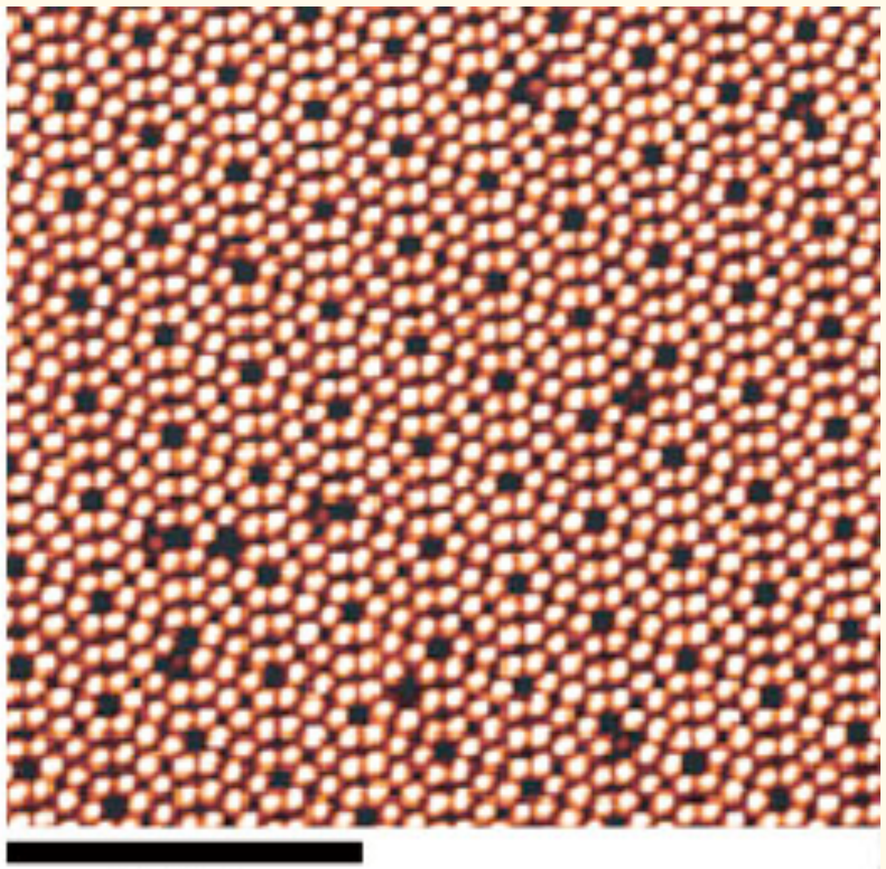
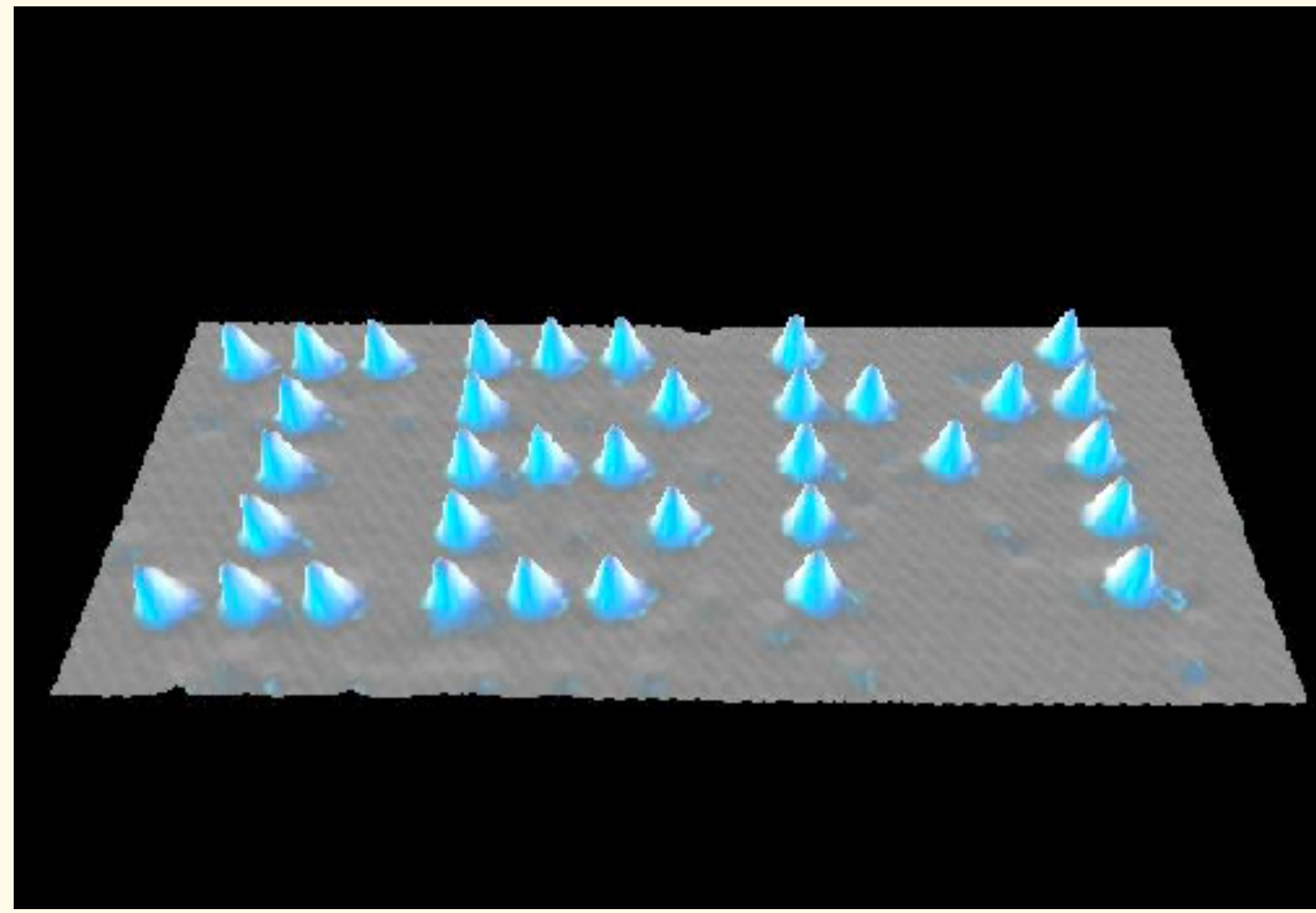


図3　STMによってとらえたシリコン表面
白い丸い粒1個がシリコン原子1個である。
(Riken News Feb 2004)



(IBM)

針で電子を操作すれば字も書ける。