

■本資料のご利用にあたって(詳細は「利用条件」をご覧ください)

本資料には、著作権の制限に応じて次のようなマークを付しています。
本資料をご利用する際には、その定めるところに従ってください。

* : 著作権が第三者に帰属する著作物であり、利用にあたっては、この第三者より直接承諾を得る必要があります。

CC : 著作権が第三者に帰属する第三者の著作物であるが、クリエイティブ・コモンズのライセンスのもとで利用できます。

© : パブリックドメインであり、著作権の制限なく利用できます。

なし : 上記のマークが付されていない場合は、著作権が東京大学及び東京大学の教員等に帰属します。無償で、非営利かつ教育的な目的に限って、次の形で利用することを許諾します。

- I 複製及び複製物の頒布、譲渡、貸与
- II 上映
- III インターネット配信等の公衆送信
- IV 翻訳、編集、その他の変更
- V 本資料をもとに作成された二次的著作物についての I からIV

ご利用にあたっては、次のどちらかのクレジットを明記してください。

東京大学 Today OCW 学術俯瞰講義
Copyright 2013, 家 泰弘

The University of Tokyo / Today OCW The Global Focus on Knowledge Lecture Series
Copyright 2013, Yasuhiro Iye

学術俯瞰講義
2013.05.13
@駒場KOMCEE

物質科学ことはじめ(その2)

物質の個性(物性)は どこから生まれるか

物性研究所
家 泰弘

物質科学ことはじめ

第4回(5月7日)

現代社会と物質科学,
原子・分子・物質の構造

第5回(5月13日)

物質の個性(物性)はどこから生まれるか

第6回(5月20日)

奇妙な量子の世界

今日のおはなし

- 温度について(前回の補足)
- 物質の構造
 - 原子の並び方
- 物性科学 はじめの三歩
 - 第一歩: 原子の構造と周期律
 - 第二歩: 原子から固体へ
金属・絶縁体・半導体
 - 第三歩: 協力現象と相転移
磁性を例として

熱とは何か？ 温度とは何か？



ラヴォアジエ

燃焼が「酸素との結合」であることを示し、
当時主流であった「フロギストン説」を否定

「近代化学の父」と称せられる

熱は物質の一種であると考え、
「カロリック」という元素を想定

ダヴィッド画
ラヴォアジエと妻マ
リー＝アンヌ・ピエ
レット・ポールズ



ベンジャミン・トンプソン
(ランフォード伯)

砲身の切削工程で、いくらでも熱
が発生することから、カロリック説
を否定。

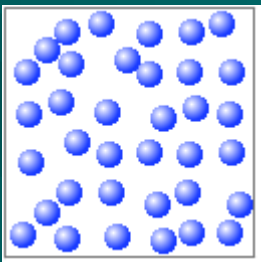
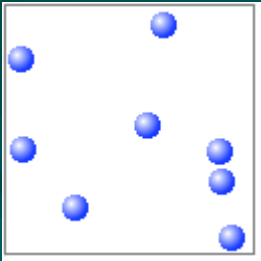
熱は運動の一形態であると結論



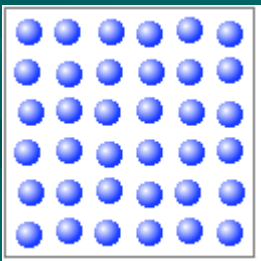
温度とは何か

* 出典: わかりやすい高校物理の部屋
<http://wakariyasui.sakura.ne.jp>

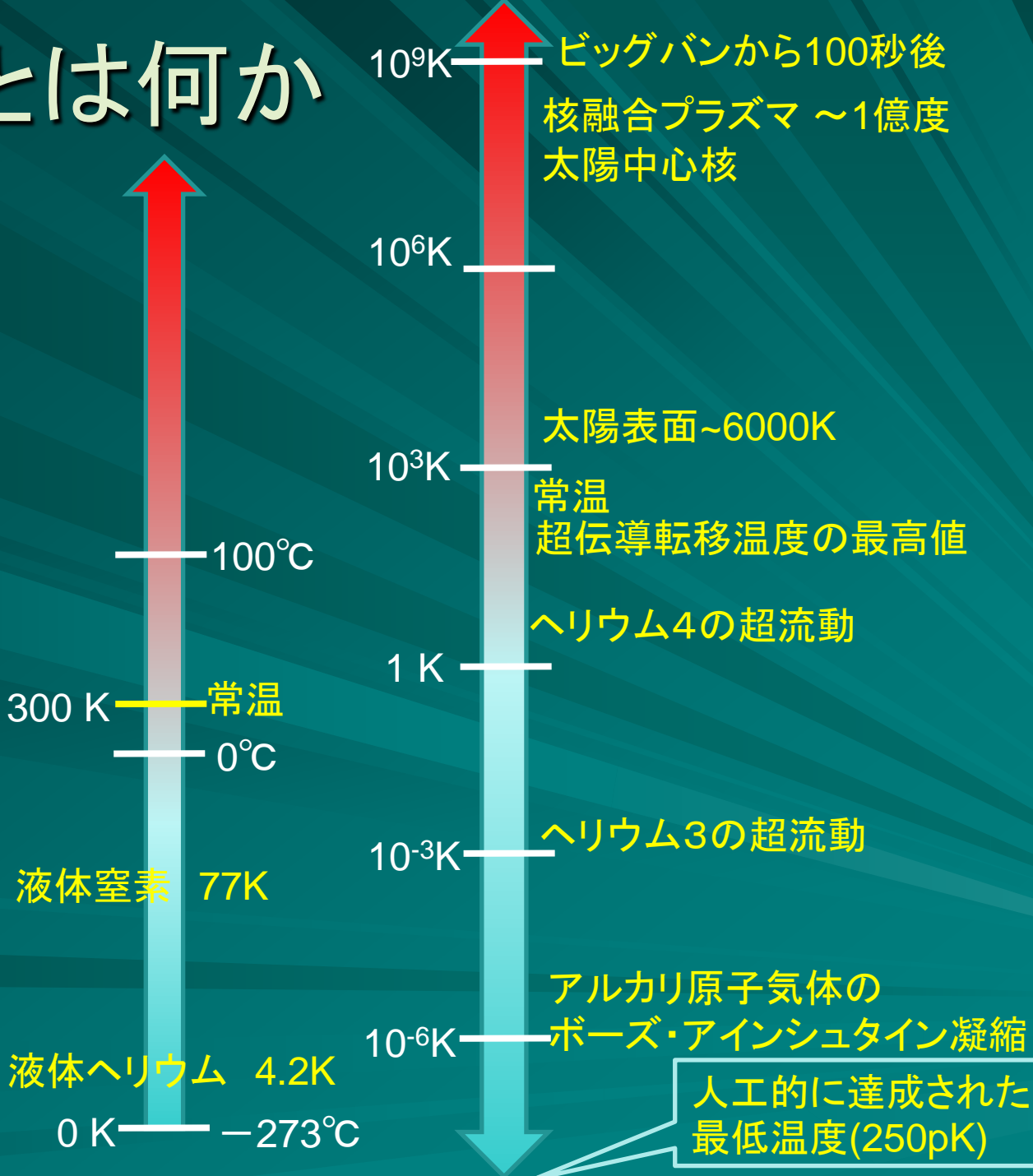
気体状態
(高温)



液体状態



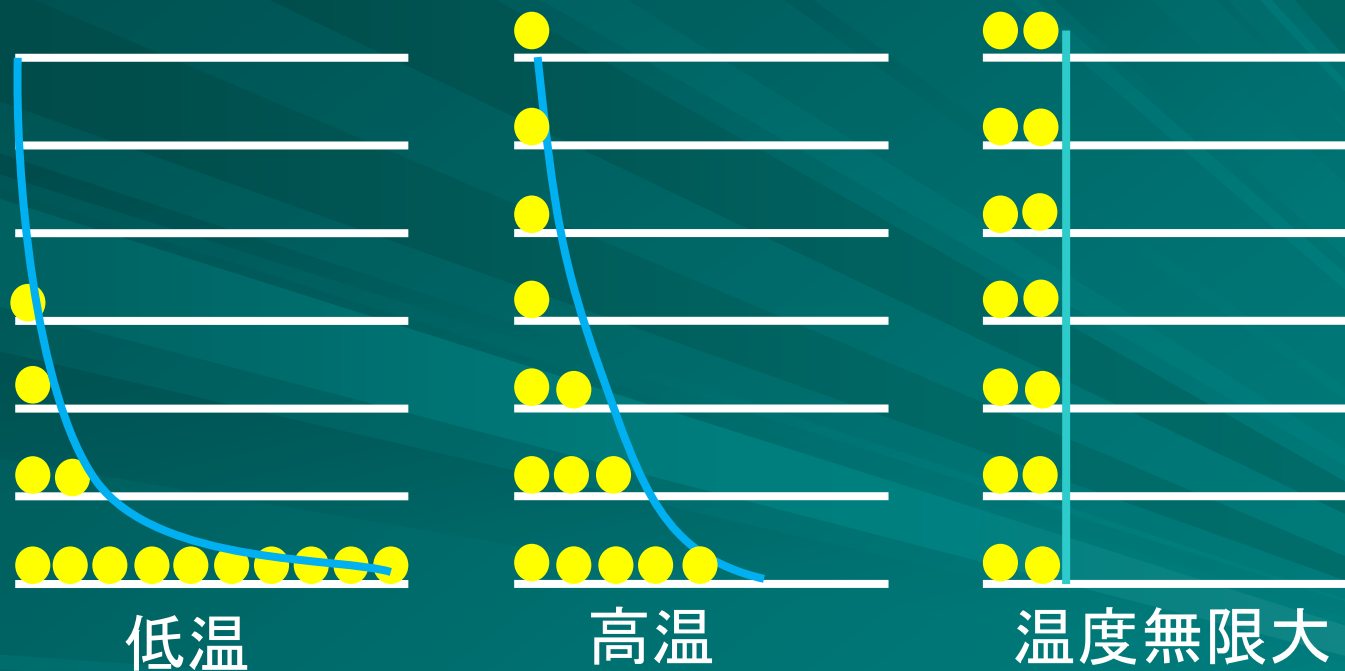
固体状態
(低温)



温度とは何か？

エネルギー分布

温度が高いということは、エネルギーの高い状態を占める粒子の割合が大きいということ



「負の温度」は「逆転分布」の状態。

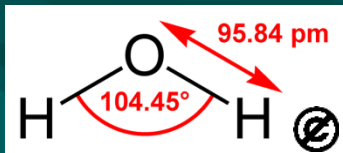
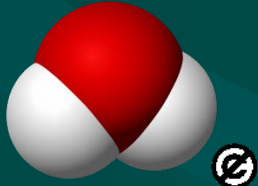
負の温度は温度無限大よりも「熱い」

物質の構造

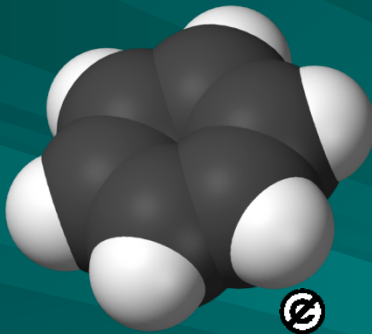
原子の並び方

分子のいろいろ

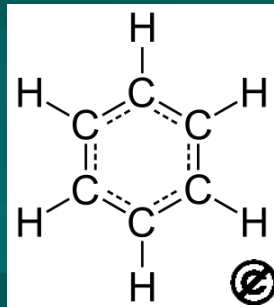
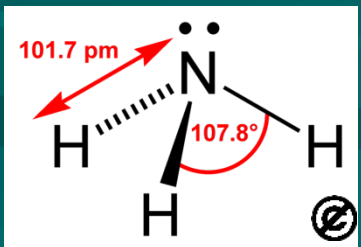
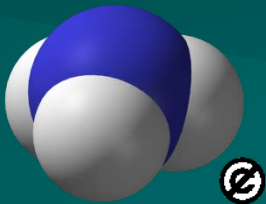
水



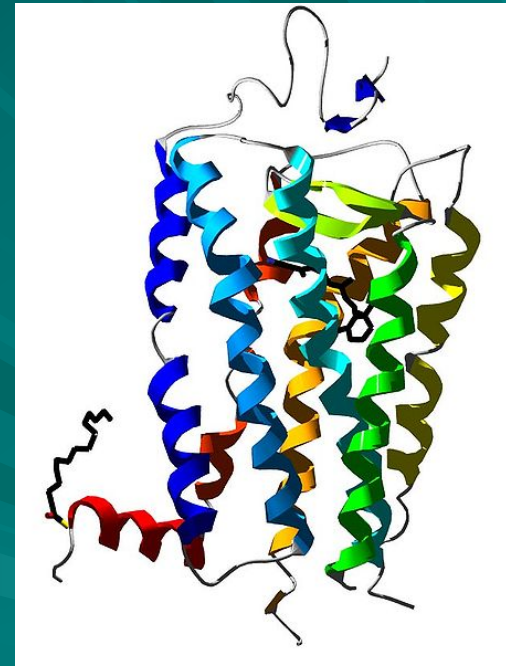
ベンゼン



アンモニア



DNA



ロドプシン

* Image of 1L9H (Okada et.al.(2002) Functional role of internal water molecules in rhodopsin revealed by X-ray crystallography, PNAS, vol.99:5982-5987) created by S. Jähnichen with spdbv/POV Ray.

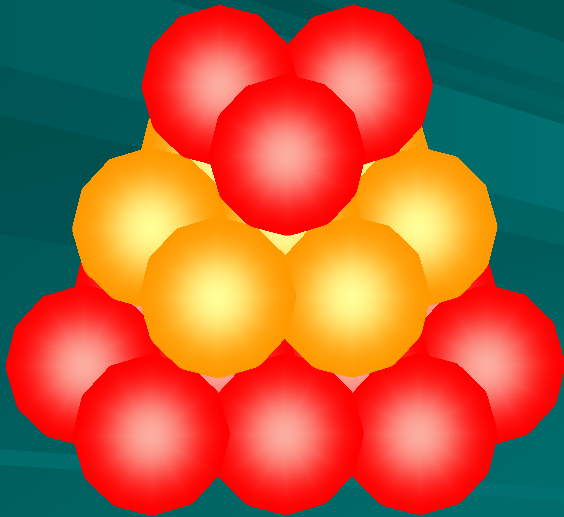
結晶構造

どういう原子配列が最も安定
(エネルギーが低い)か？

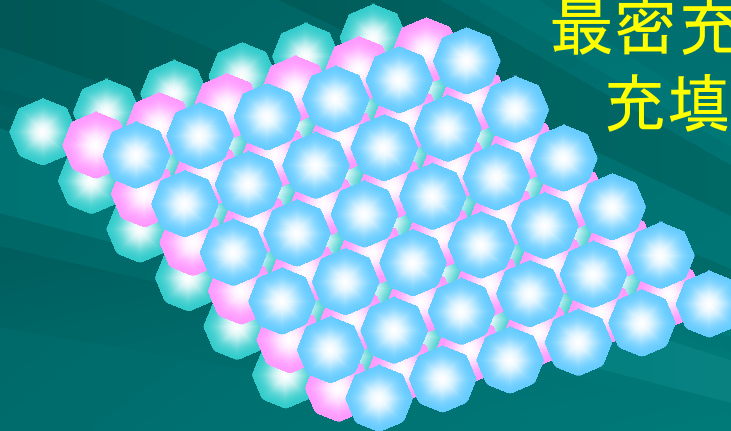
単純な例：果物屋の店先にオレンジを
積み上げる ⇒ 球のパッキング問題



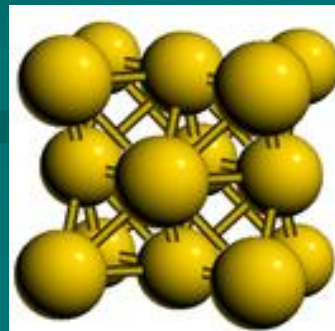
* Photo by Agricultural
Research Service, USDA



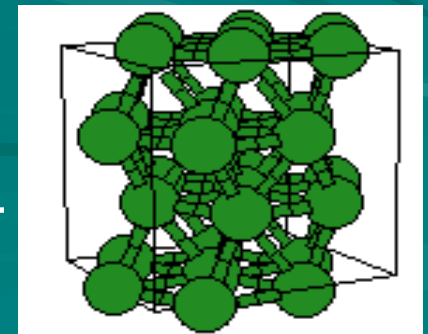
面心立方格子
fcc



最密充填構造
充填率74%

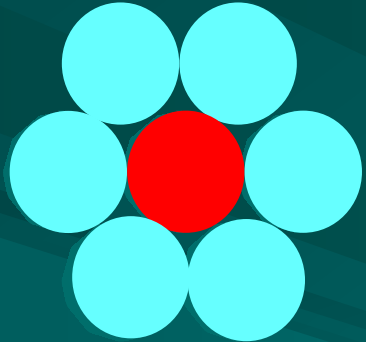


六方稠密格子
hcp



【余談】ケプラー予想

1つの球の周りに、同じ大きさの球を最大何個までくっつけられるか？ Kissing number problem



2次元なら簡単
6個

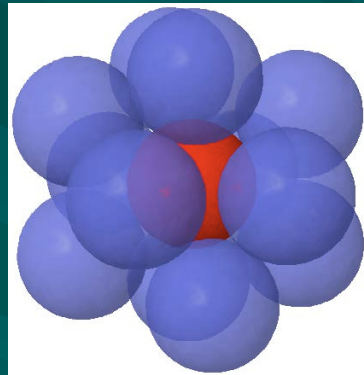


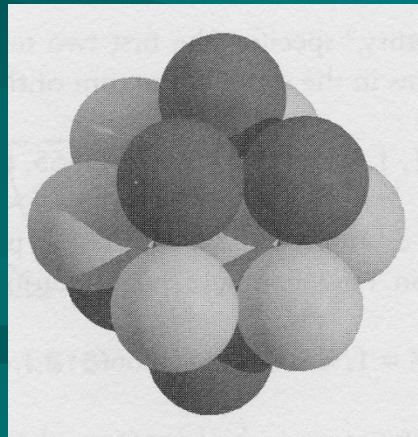
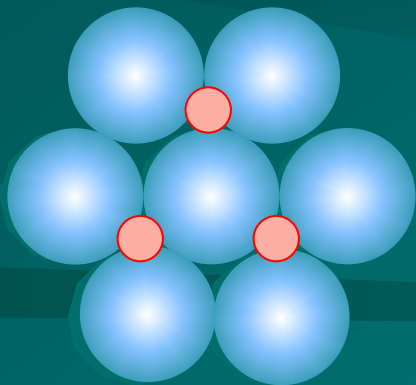
Image by Robert Bradshaw,
from Wikimedia Commons
CC BY-SA 3.0
<http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Kissing-3d.png>

3次元では？
12個 ← ケプラー予想

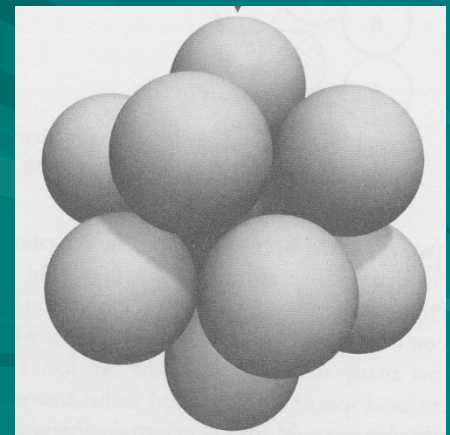
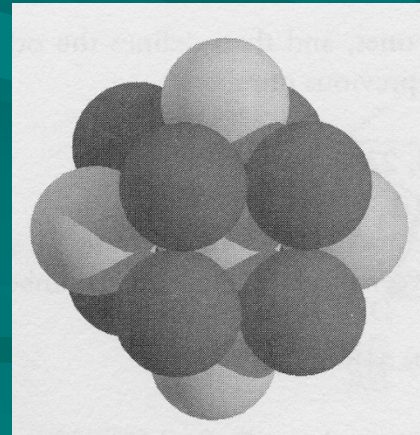


ヨハネス・ケプラー
(1571-1630)

12個をくっつけるやりかたはいろいろ



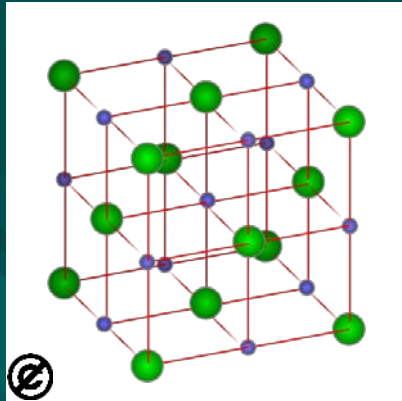
面心立方配置



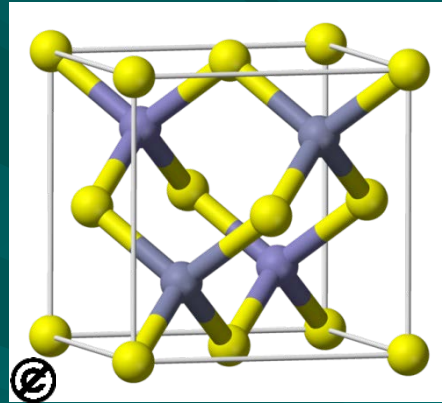
正二十面体配置

数学的に厳密な証明は1997年になってようやく。

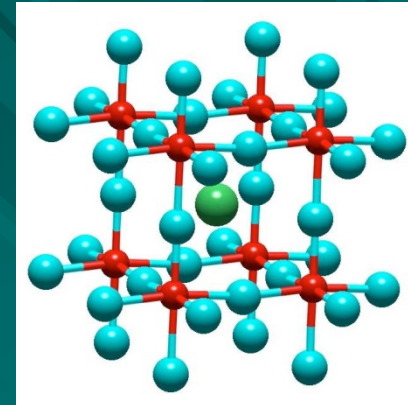
いろいろな結晶構造



NaCl

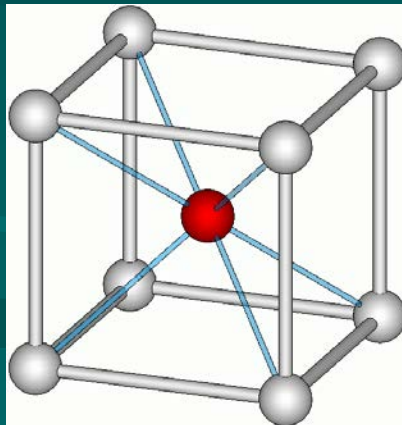


GaAs

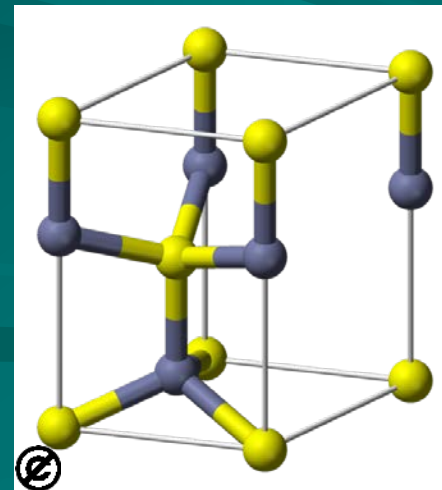


TiBaO₃

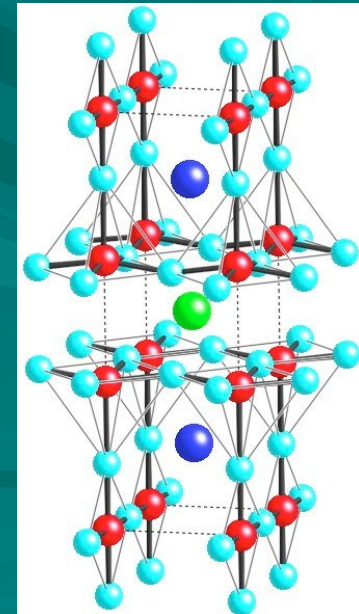
*
画像提供:
東京大学物性研究所
廣井研究室
Image generated
using CrystalMaker®



CsCl



GaN



YBa₂Cu₃O₇

*
画像提供:
東京大学物性研究所
廣井研究室
Image generated
using CrystalMaker®

Image by René Töpfer
CC BY-SA 3.0
http://commons.wikimedia.org/wiki/File:CsCl_crystal.png

炭素七変化

炭素原子だけからなる様々な物質

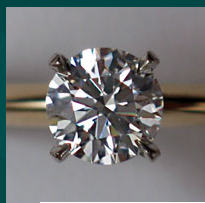
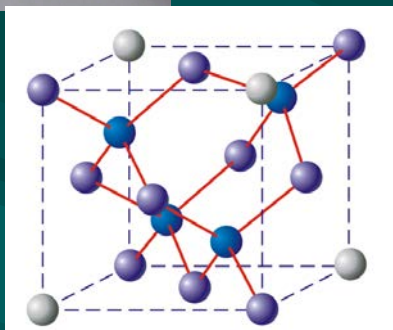


Photo by CrucifiedChrist,
from Wikimedia Commons
CC BY 1.0
<http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Diamond.jpg>

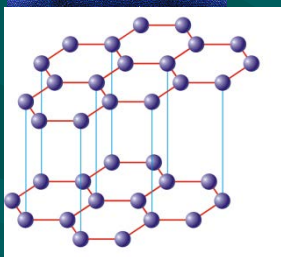


* Image by E. Generalic, <http://glossary.periodni.com/glossary.php?en=allotrope>

ダイヤモンド



*
Credit: Minerals
Education Coalition
www.MineralsEducationCoalition.org



*
Image by
E. Generalic,
<http://glossary.periodni.com/glossary.php?en=allotrope>

グラファイト(黒鉛)

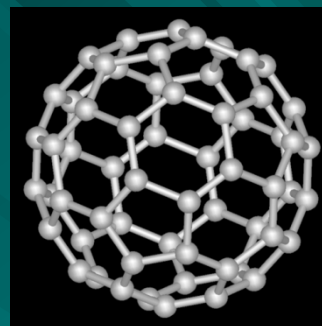
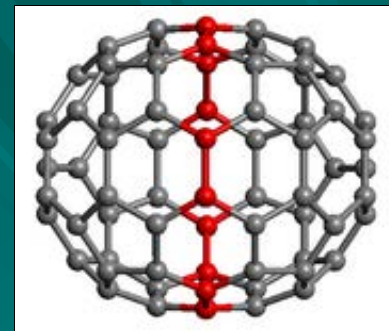


Image by IMeowbot, from Wikimedia Commons
CC BY-SA 3.0 <http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Fullerene-C60.png>

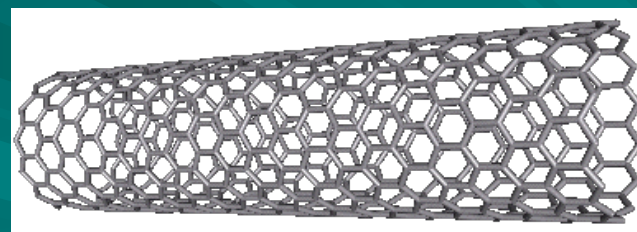
C₆₀

フラーレン



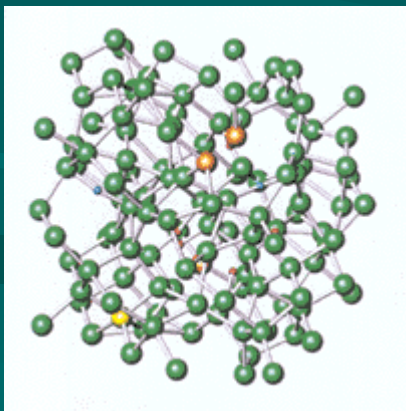
By Paweł Jochym CC BY-SA 3.0
http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Fullerene_C70.png

C₇₀



カーボン ナノチューブ

* 画像出典:有機化学美術館 <http://www.org-chem.org/youki/youki.html>



* 吉田博氏提供

アモルファス カーボン

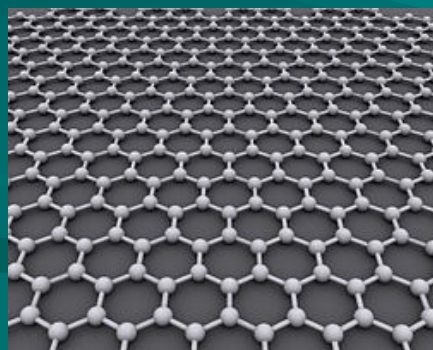
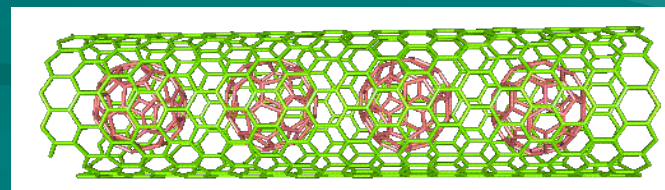


Image by AlexanderAIUS CC BY-SA 3.0
<http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Graphen.jpg>

グラフェン



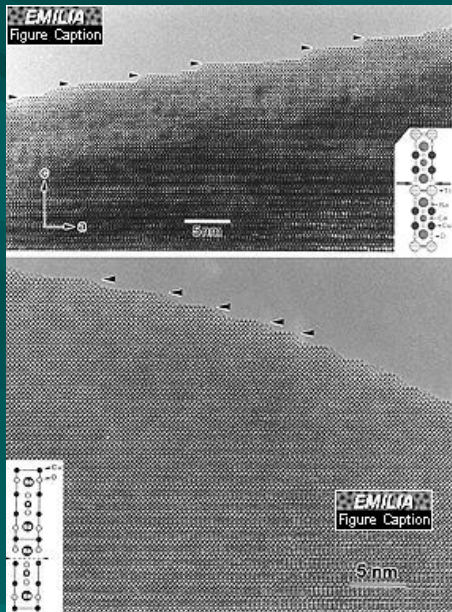
カーボン ピーポッド

* 画像出典:有機化学美術館 <http://www.org-chem.org/youki/youki.html>

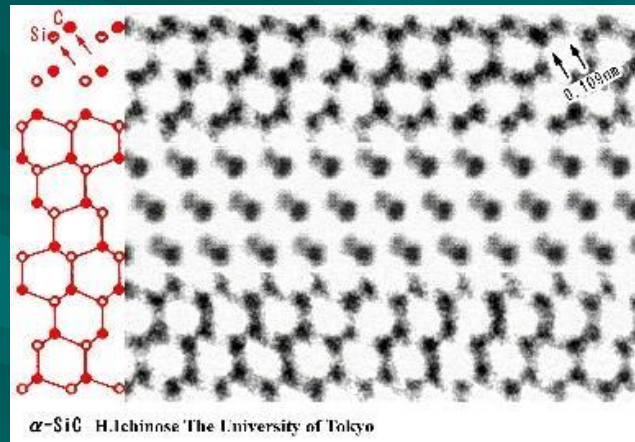
物質の構造をどうやって調べる

(1) 原子の配列を直接的に観察する

超高分解能電子顕微鏡

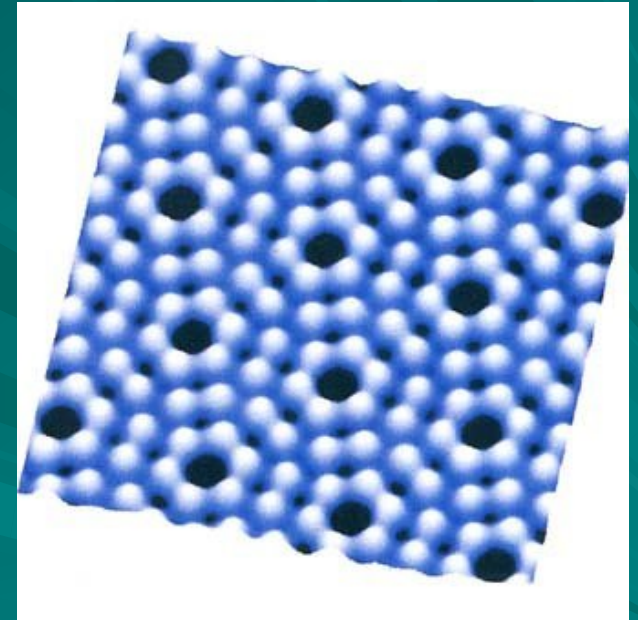


* 画像出典: 高分解能電子顕微鏡像データベース「えみりあ」
<http://asma7.tagen.tohoku.ac.jp/EMILIA/>



* 市野瀬英喜氏提供

走査プローブ顕微鏡

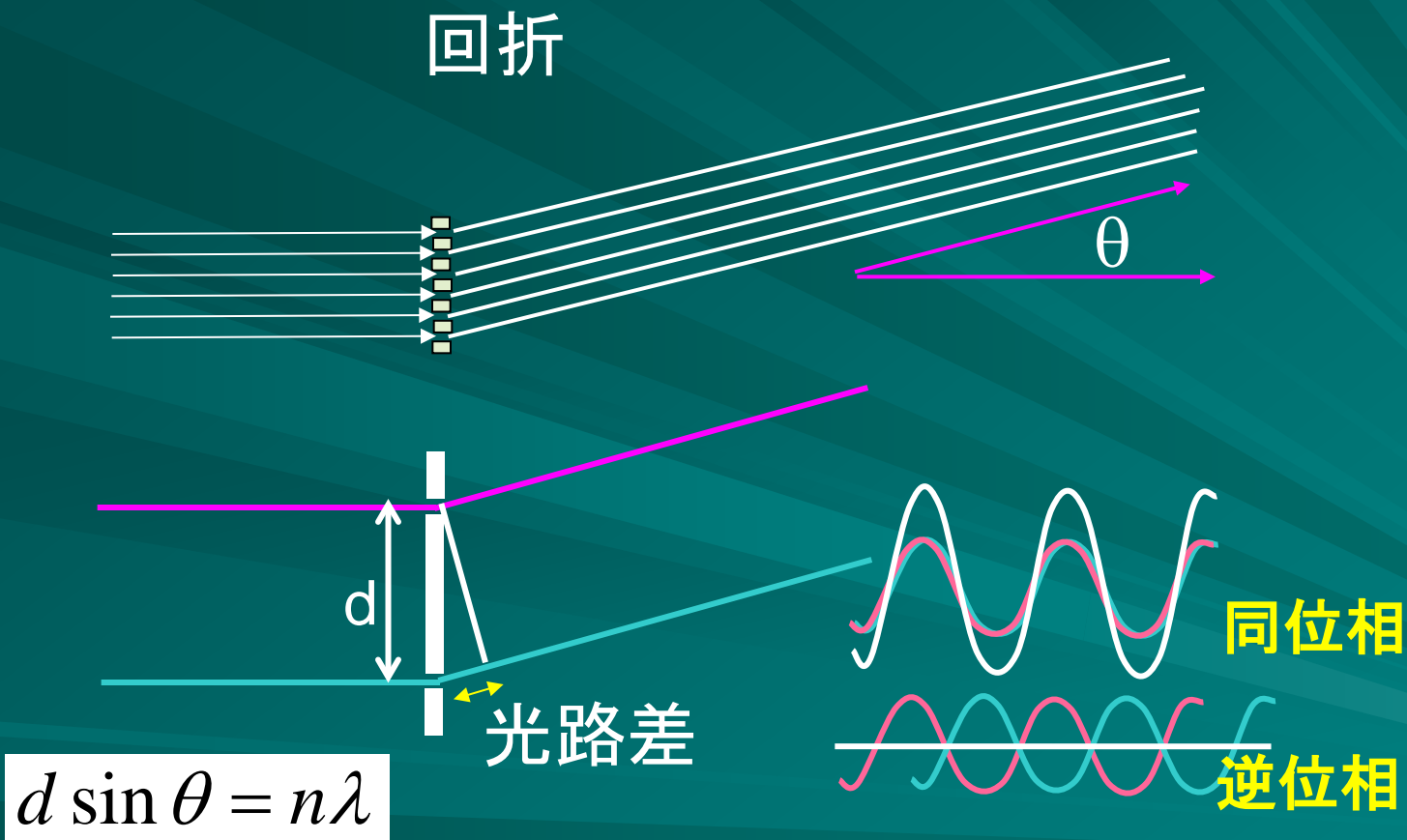


* 東北大学一杉太郎研究室、STMギャラリー
http://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/~t_hitosugi/stm_sts.html

(2) 回折現象を利用する

X線回折 (電子線や中性子線も使われる)

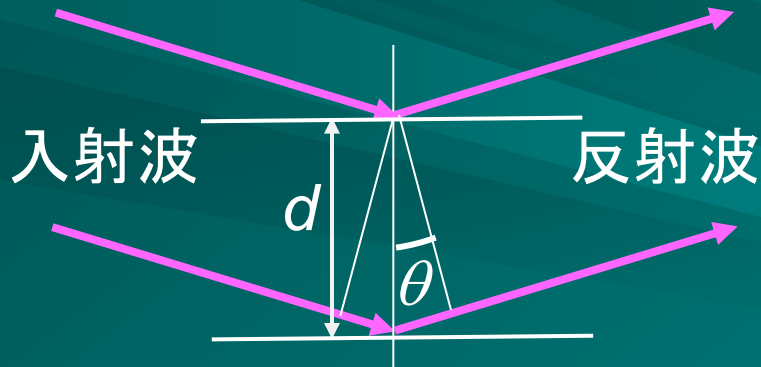
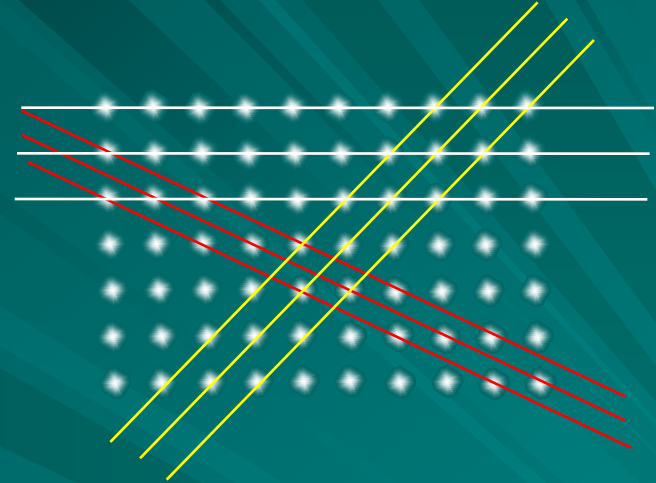
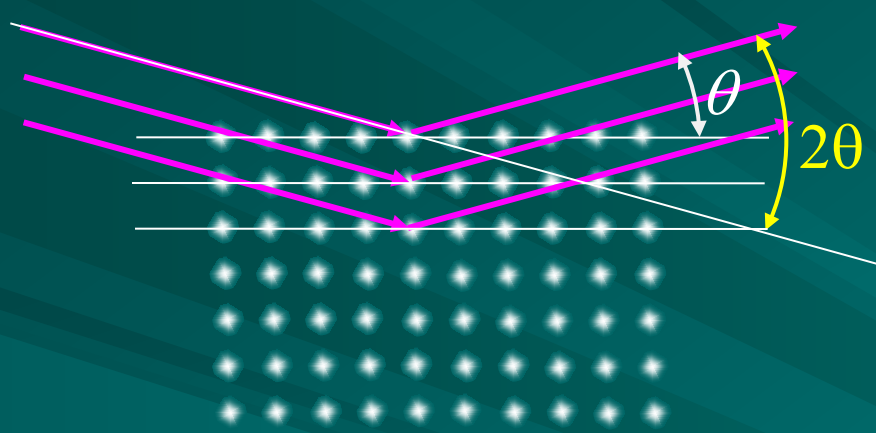
周期構造を回折で調べる



原子間隔 $\sim 0.3 \text{ nm} \Leftrightarrow \sim \text{X線の波長}$

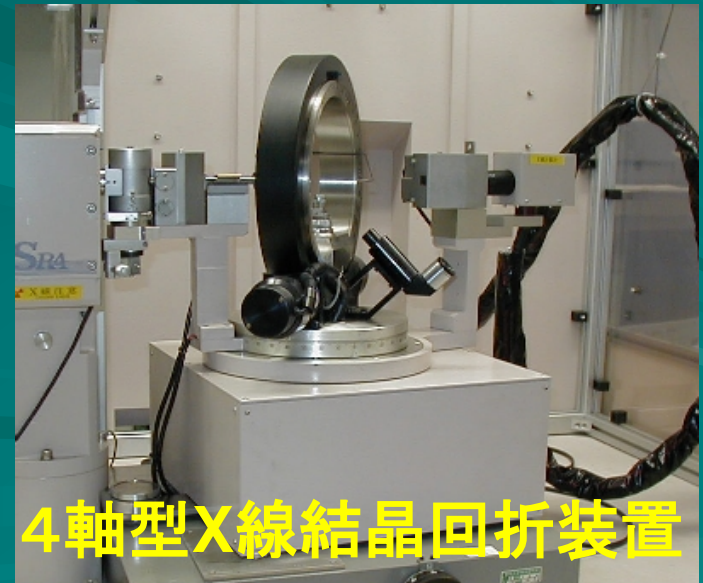
電子線, 中性子線の回折も利用される.

結晶構造解析



$2d \sin \theta = n\lambda$ ブラッグ条件

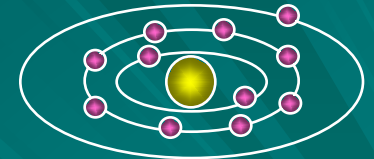
原子層の間隔がわかる



物性科学 はじめの三歩

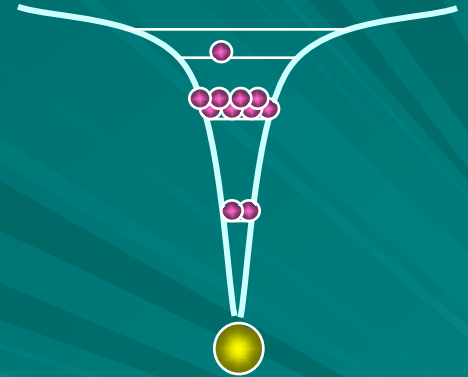
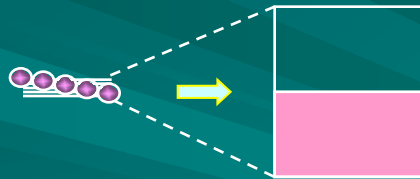
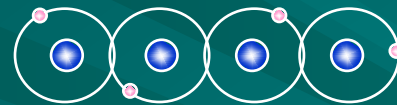
< 第一歩 >

原子の構造と周期律



< 第二歩 >

原子から固体へ

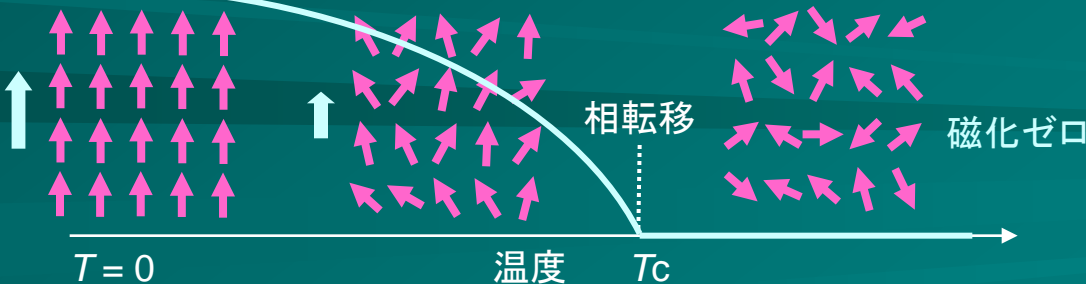


< 第三歩 >

協力現象と相転移

秩序状態 (強磁性)

無秩序状態 (常磁性)



	I		II		III										IV	V	VI	VII	VIII
1	1	2											3	4	5	6	7	8	
2	3	4											5	6	7	8	9	10	
3	11	12											13	14	15	16	17	18	
4	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	
5	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	
6	55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72	
7	87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104	
8	119	120	121	122	123	124	125	126	127	128	129	130	131	132	133	134	135	136	

* Lanthanides
** Actinides

物性物理の登場人物たち

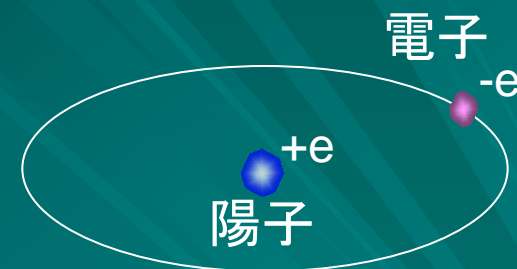
登場人物（「素」粒子）

電子

原子核（陽子と中性子からなる）

光子（電磁波）

水素原子

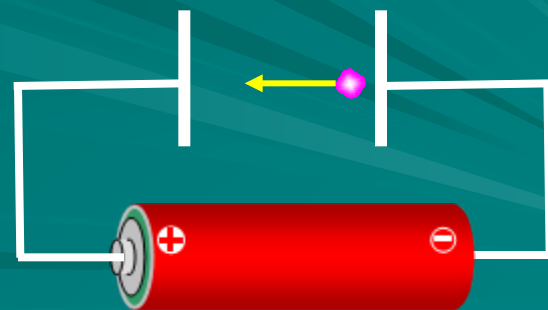


「素」粒子の間に働く力： 電磁相互作用

典型的なエネルギースケール

“電子ボルト (eV)”

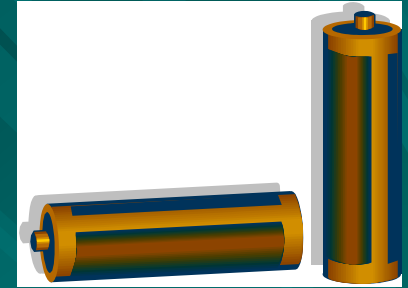
電子を1ボルトの電位差で加速した時の
運動エネルギー



可視光のエネルギーはだいたい 1eV

身近な例

乾電池は1.5V
電子のやりとりによる起電力



レーザーポインター

赤色光 $\sim 1.5\text{eV}$, 緑色光 $\sim 2.5\text{eV}$



Photo by PiccoloNamek, from
Wikimedia Commons [CC BY-SA 3.0](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:RBG-LED.jpg)
[http://commons.wikimedia.org/wiki/File:
RBG-LED.jpg](http://commons.wikimedia.org/wiki/File:RBG-LED.jpg)

そもそも可視光はなぜ1~3eV程度か
ロドプシン: 網膜の受光タンパク質
光のエネルギーを吸収して変化



Image of 1L9H (Okada et.al.(2002) Functional role of
internal water molecules in rhodopsin revealed by X-
ray crystallography, PNAS, vol.99:5982-5987)
created by S. Jähnichen with spdbv/POV Ray.

量子力学

ミクロの世界のふるまいを記述する理論体系

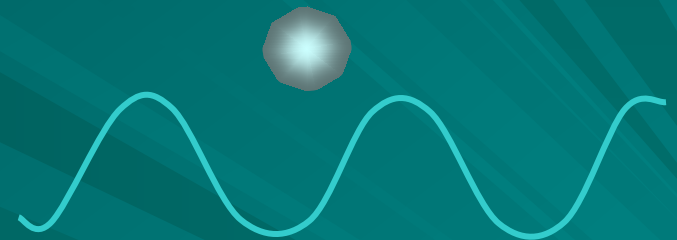
原子・分子の構造

固体の中の電子のふるまい

光と物質の相互作用

光 波であり粒子である

電子 粒子であり波である



粒子だとか波だとかというのは、われわれが日常的(古典力学的)現象の類推で、量子力学的現象をイメージしようとするときにそういう言葉しか持ち合わせないことの反映

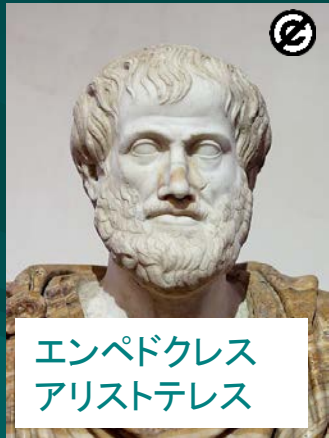
粒子性: 離散的, 1個1個

波動性: 重ね合わせ, 干渉

< 第一歩 >

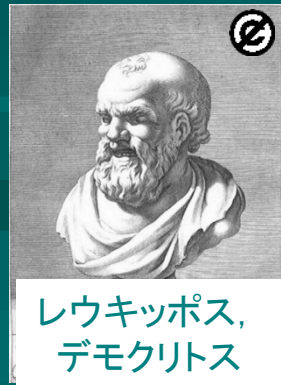
原子の構造と周期律

錬金術から近代化学へ 元素と原子の概念形成

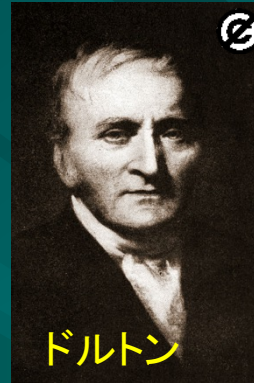


四元素説

原子説



元素の概念
単体と化合物



化学的原子論



元素周期律

Period	Group																	
	I	II											III	IV	V	VI	VII	VIII
1	1 H															2 He		
2	3 Li	4 Be										5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne	
3	11 Na	12 Mg										13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar	
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	*	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	**	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Nh	114 Fl	115 Uup	116 Lv	117 Uuq	118 Uuo
8	119 Uue																	

* Lanthanides: 57 La, 58 Ce, 59 Pr, 60 Nd, 61 Pm, 62 Sm, 63 Eu, 64 Gd, 65 Tb, 66 Dy, 67 Ho, 68 Er, 69 Tm, 70 Yb, 71 Lu
 ** Actinides: 89 Ac, 90 Th, 91 Pa, 92 U, 93 Np, 94 Pu, 95 Am, 96 Cm, 97 Bk, 98 Cf, 99 Es, 100 Fm, 101 Md, 102 No, 103 Lr

By Armtuk, from Wikimedia Commons
 CC BY-SA 3.0
http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Periodic_Table_Armtuk3.svg

元素周期表

		Group																	
		I	II											III	IV	V	VI	VII	VIII
1	1 H																	2 He	
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne	
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar	
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr	
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe	
6	55 Cs	56 Ba	*	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn	
7	87 Fr	88 Ra	**	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Fl	115 Uup	116 Lv	117 Uus	118 Uuo	
8	119 Uun																		
* Lanthanides			57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu		
** Actinides			89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr		

中国語版周期表

氫 H																	氦 He
鋰 Li	鈹 Be											硼 B	碳 C	氮 N	氧 O	氟 F	氖 Ne
鈉 Na	鎂 Mg											鋁 Al	矽 Si	磷 P	硫 S	氯 Cl	氬 Ar
鉀 K	鈣 Ca	釷 Sc	鈦 Ti	釩 V	鉻 Cr	錳 Mn	鐵 Fe	鈷 Co	鎳 Ni	銅 Cu	鋅 Zn	鎵 Ga	鍅 Ge	砷 As	硒 Se	溴 Br	氪 Kr
銣 Rb	銣 Sr	釷 Y	銩 Zr	鈮 Nb	鉬 Mo	鎝 Tc	鈦 Ru	銩 Rh	鈀 Pd	銀 Ag	鎘 Cd	銦 In	錫 Sn	銻 Sb	碲 Te	碘 I	氙 Xe
銯 Cs	鋇 Ba	錒系元素	釷 Hf	鉭 Ta	鎢 W	錒 Re	銱 Os	銥 Ir	鉑 Pt	金 Au	汞 Hg	銻 Tl	鉛 Pb	鉍 Bi	釷 Po	砒 At	氡 Rn
銣 Fr	鐳 Ra	錒系元素	鑪 Rf	鈷 Db	鎳 Sg	鈹 Bh	鐳 Hs	鐳 Mt	鐳 Ds	鐳 Rg	鐳 Cn						

鐳 La	鈰 Ce	鐳 Pr	釷 Nd	鉕 Pm	釷 Sm	鈰 Eu	釷 Gd	鐳 Tb	鐳 Dy	釷 Ho	鈰 Er	鐳 Tm	釷 Yb	鐳 Lu
錒 Ac	釷 Th	鐳 Pa	鈷 U	鐳 Np	釷 Pu	鈰 Am	鈰 Cm	鐳 Bk	鐳 Cf	釷 Es	鈰 Fm	鐳 Md	釷 No	鐳 Lr

元素周期表

Group

Period	I	II											III	IV	V	VI	VII	VIII														
1	1 H																		2 He													
2	3 Li	4 Be												6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne														
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar														
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr														
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe														
6	55 Cs	56 Ba	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Fl	115 Uup	116 Lv	117 Uus	118 Uuo
8	119 Uun																															

周期律が成り立つのはなぜか？

* Lanthanides

57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------

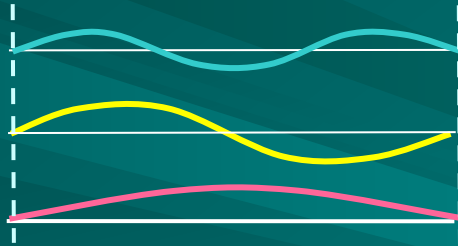
** Actinides

89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr
----------	----------	----------	---------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	-----------	-----------	-----------	-----------

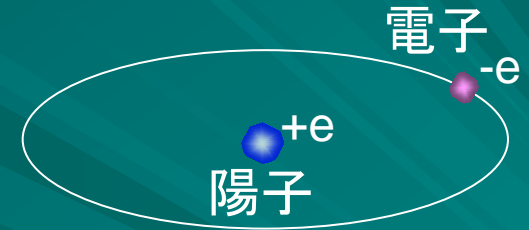
エネルギーの量子化

量子力学によれば電子は**粒子**であると同時に**波**の性質も示す

Photo by PJ, from Wikimedia Commons [CC BY-SA 3.0](http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Guitar_1.jpg)
http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Guitar_1.jpg



水素原子：
原子核（陽子）の周りを電子が回る



箱の中の電子 定在波 \Rightarrow 離散的エネルギー準位
(電子が収まる部屋)

エネルギーの量子化

量子力学によれば電子は**粒子**であると同時に**波**の性質も示す

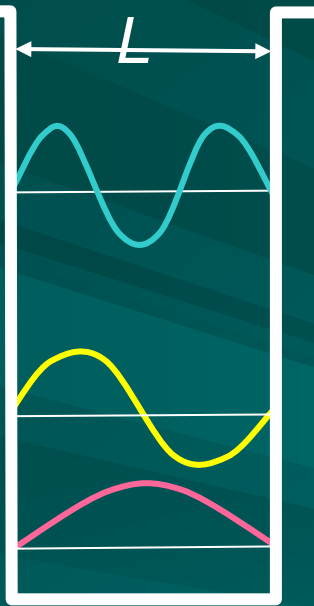
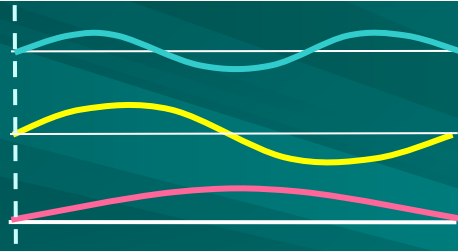
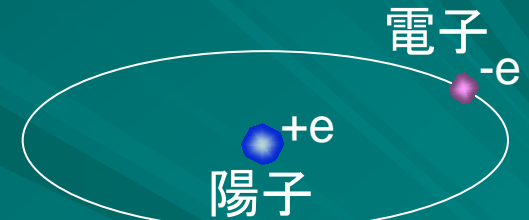


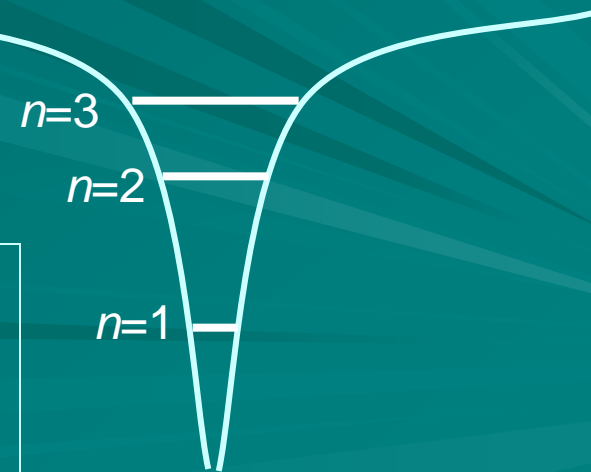
Photo by PJ, from Wikimedia Commons [CC BY-SA 3.0](http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Guitar_1.jpg)
http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Guitar_1.jpg



水素原子：
原子核（陽子）の周りを電子が回る



箱の中の電子 定在波 \Rightarrow 離散的エネルギー準位
(電子が収まる部屋)

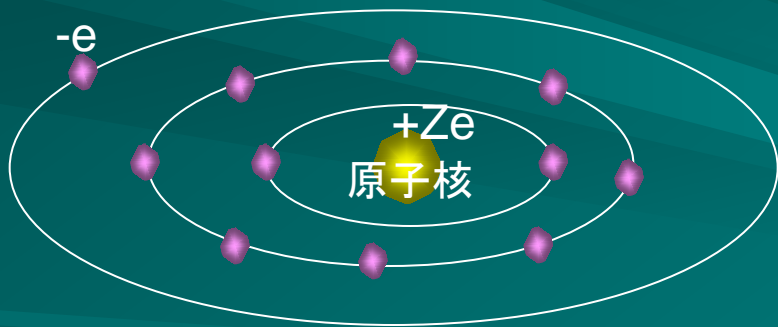


エネルギー準位を指定する n を「量子数」と呼ぶ
さらに、回転運動に関係した量子数 l, m と、
スピン(自転)に関係した量子数 σ がある。
 \Rightarrow 電子のエネルギー準位は (n, l, m, σ) で指定される。

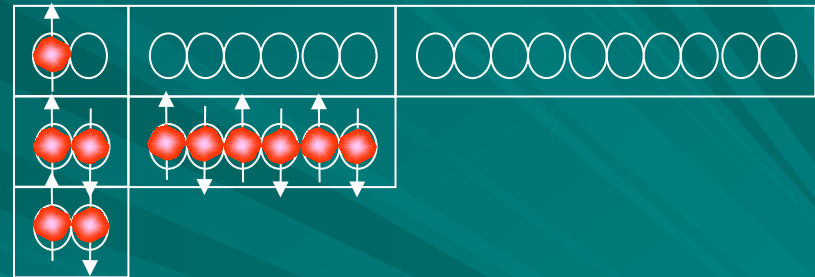
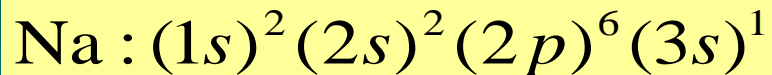
原子の電子配置

多電子原子: $+Ze$ の電荷をもつ原子核と Z 個の電子

電子は各エネルギー準位に1個ずつ收容される
(各状態には, 上向きスピンの電子と下向きスピンの電子の計2個が收容できる)



Na: $Z=11$



ホテル「アトム館」

1階の客室 1

2階の客室 1+3

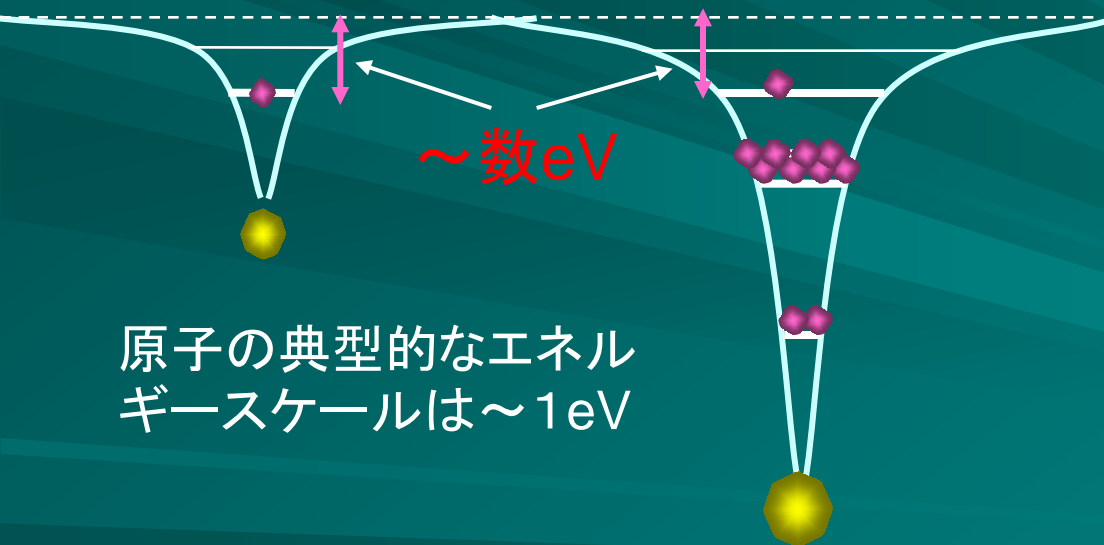
3階の客室 1+3+5

.....

(各客室はツイン)

価電子

原子の化学的性質を決めているのは最外殻の電子(価電子)



最外殻の電子配置が似た原子は互いに似た化学的性質を示す
⇒ **元素周期律**

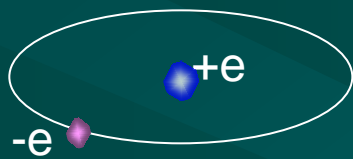
< 第二步 >

原子から固体へ

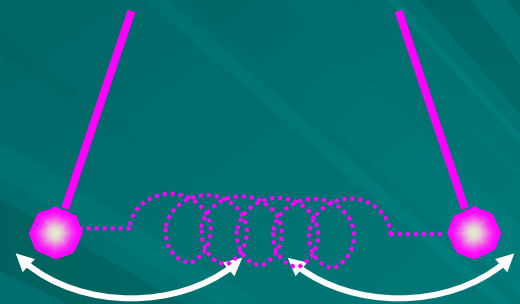
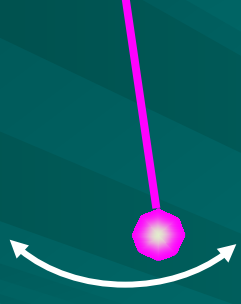
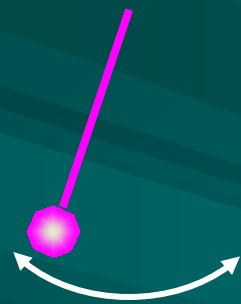
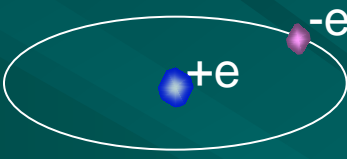
— 金属・絶縁体・半導体 —

2個の原子を近づける

水素原子

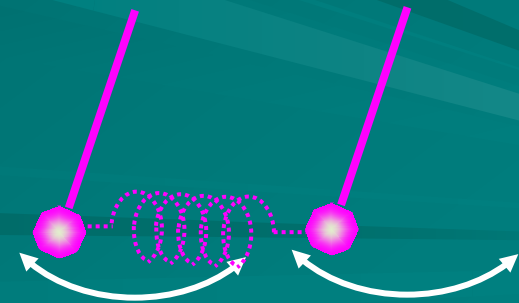
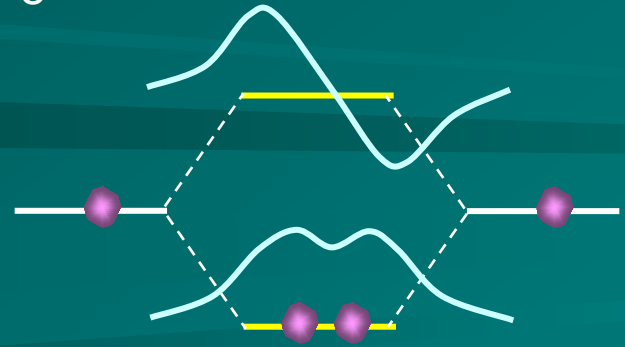


水素原子



逆位相の振動
高い振動数(エネルギー)

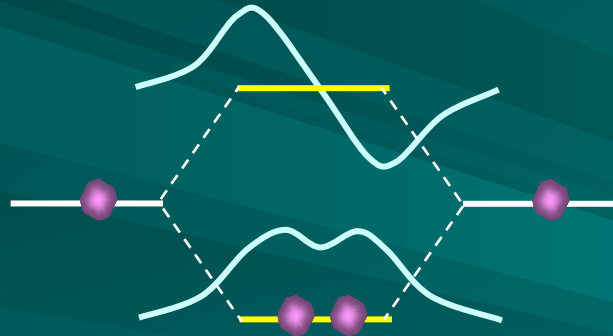
水素分子: H_2



同位相の振動
低い振動数(エネルギー)

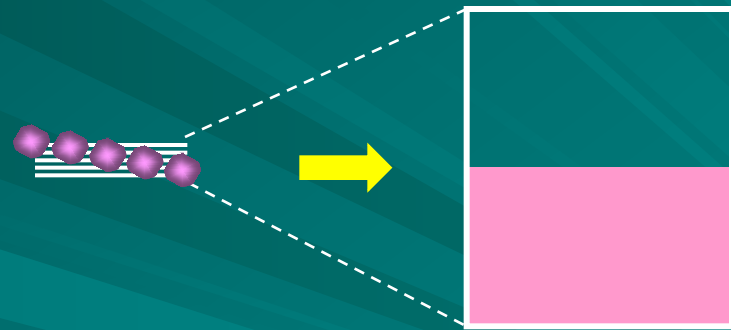
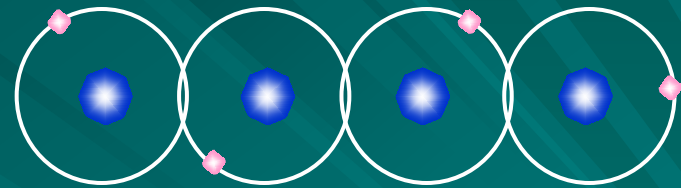
原子をたくさんならべる

水素分子: H_2



エネルギー準位が
2つに分裂する

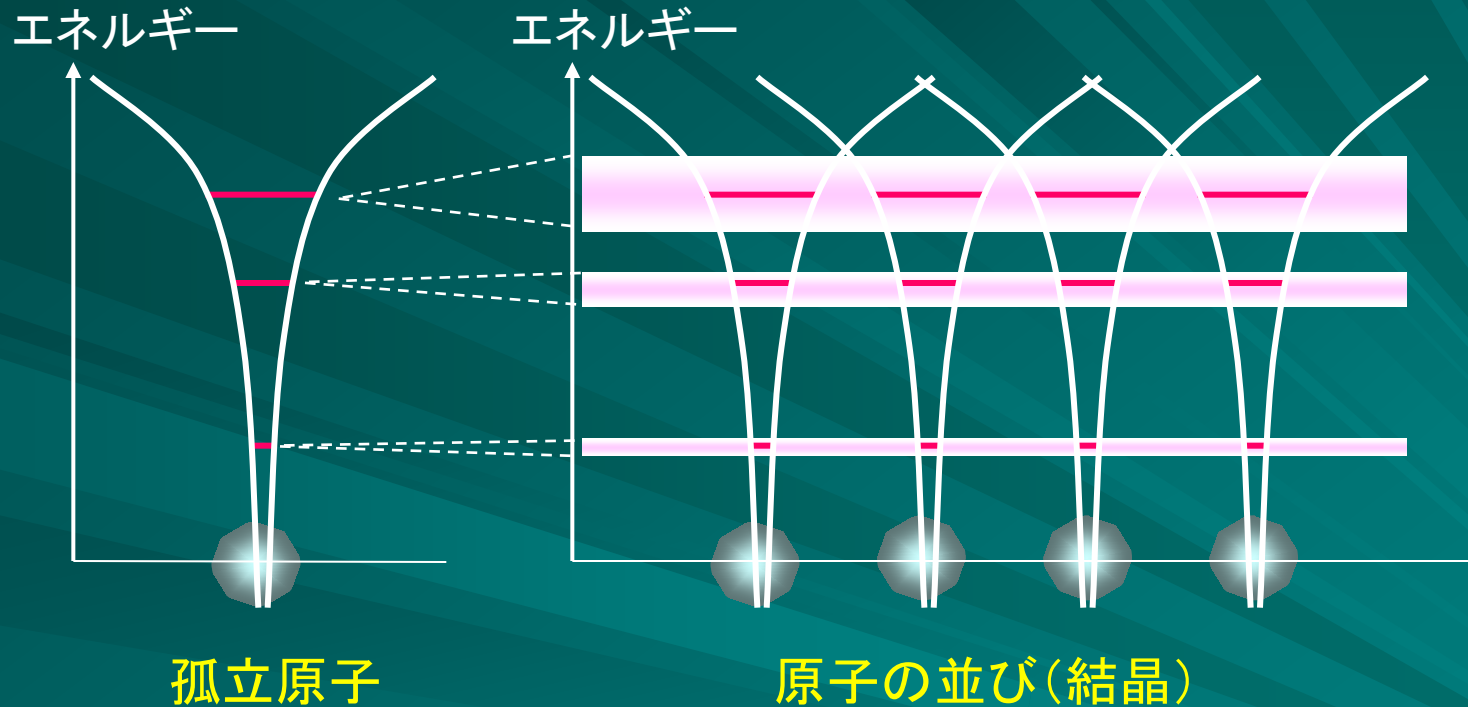
水素原子を周期的に並べる



エネルギー準位がある範囲に広がる
→ エネルギーバンド(帯)

隣接原子の電子雲の重なり合いによって電子の跳び移りが起こり、電子は結晶全体を動き回る

跳び移りによるエネルギー幅の広がり

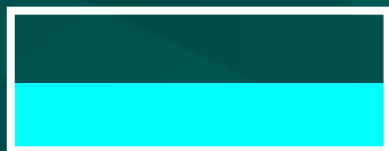


原子の電子エネルギー準位が、電子の跳び移りによって、それぞれ広がってエネルギーバンドを形成する

このエネルギーバンドのどこまで電子が詰まっているかによって、電子の動きやすさが大きく異なる

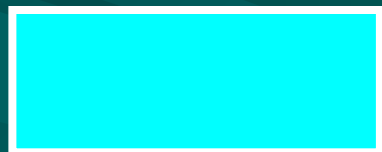
金属と絶縁体

途中まで詰まったバンド



電流が流れる

完全に詰まったバンド



電場をかける



電流は流れない

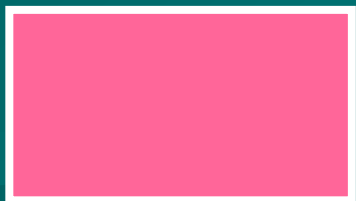
エネルギー ↑



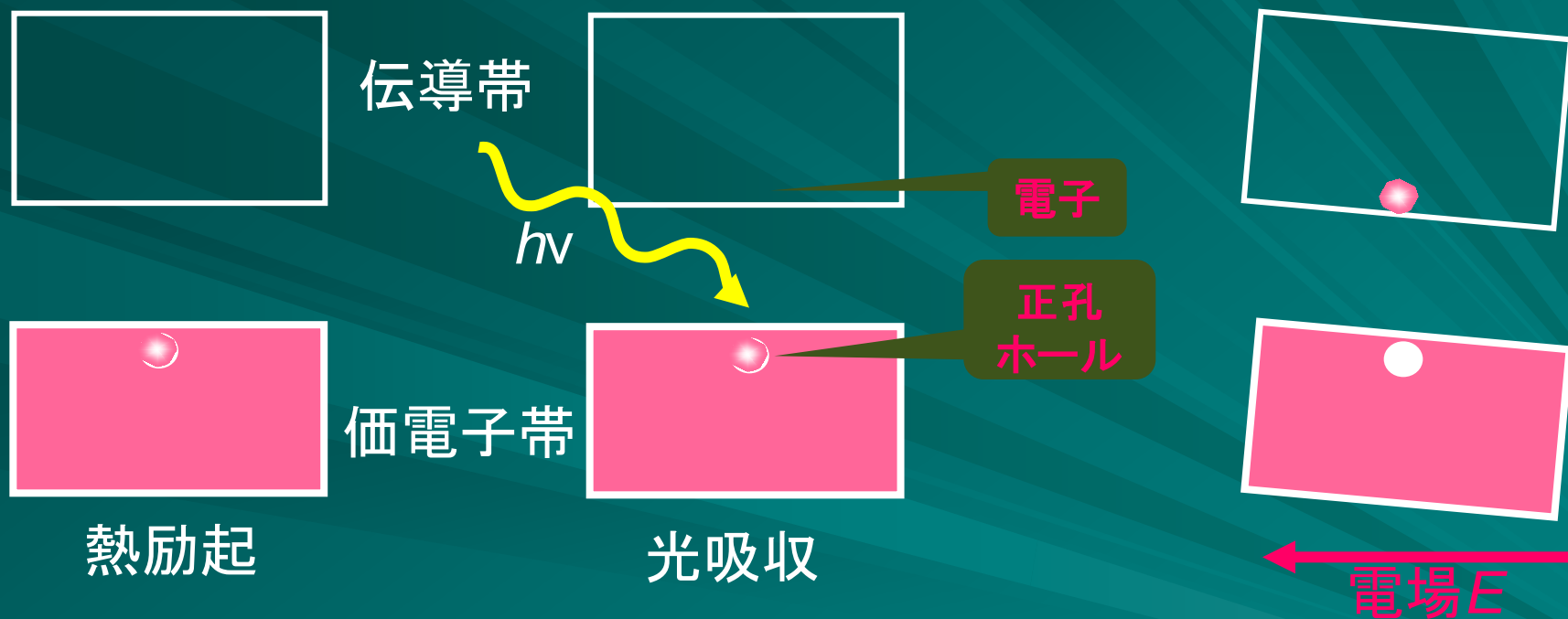
金属



絶縁体
(バンド絶縁体)

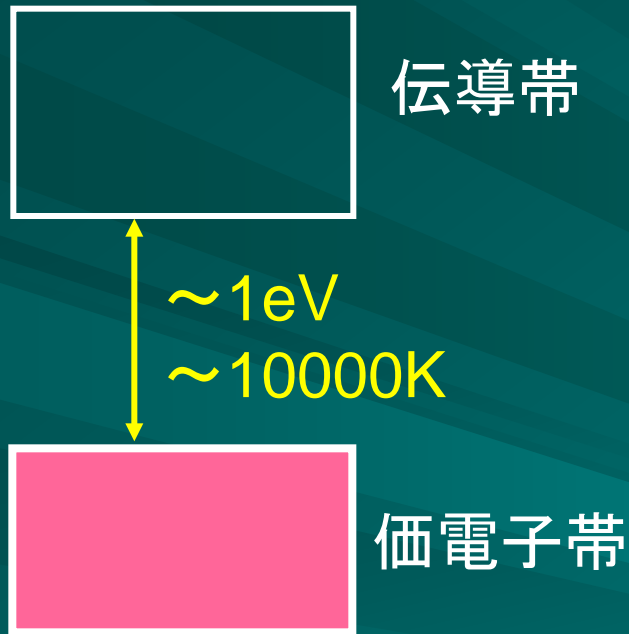


半導体の電子と正孔(ホール)

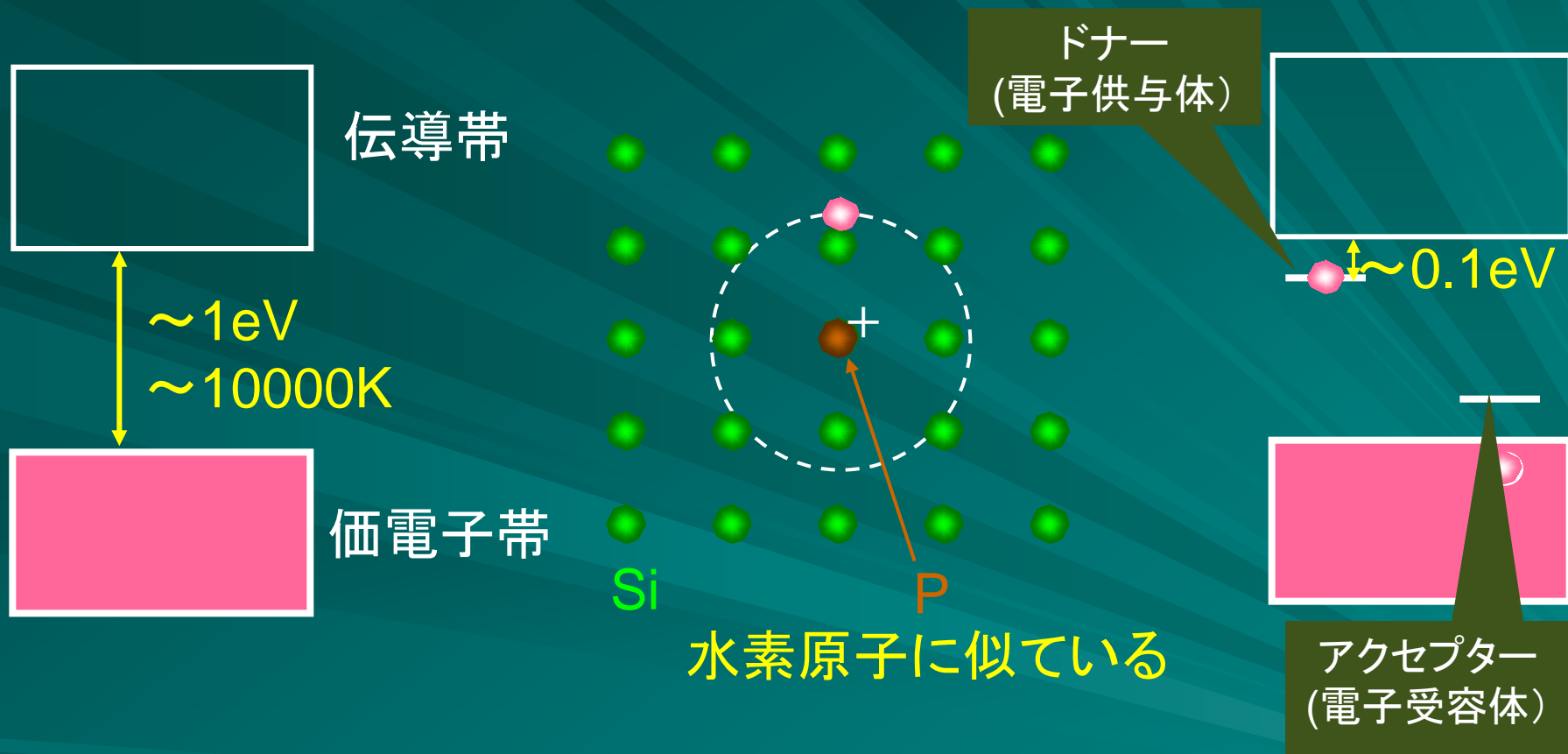


半導体では熱励起または光吸収によって生成される少数のキャリアー(伝導帯の電子, 価電子帯の正孔)が電気伝導を担う

ドーピング



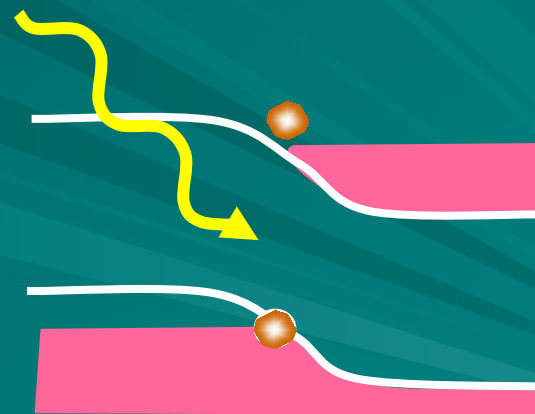
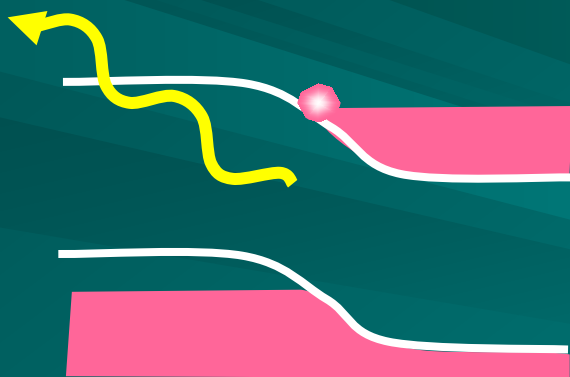
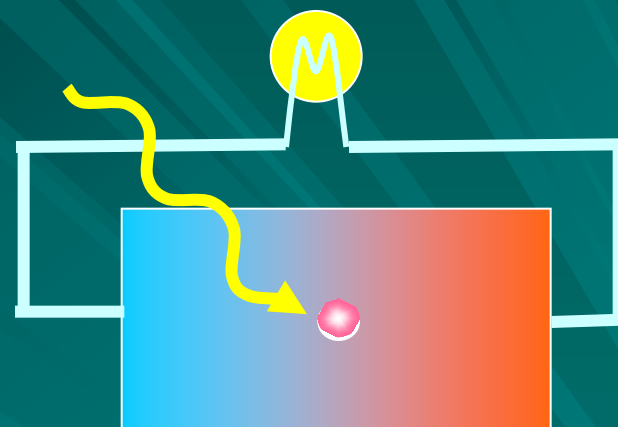
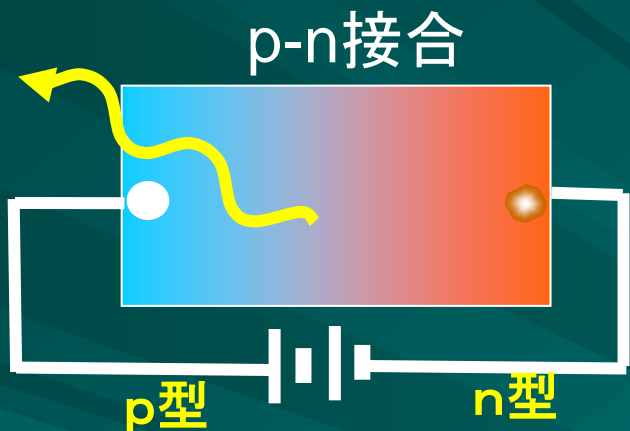
ドーピング



ドナー(電子供与体)不純物を添加して、伝導帯に電子が供給されるようにしたものをn-型半導体、アクセプター(電子受容体)不純物を添加して、価電子帯に正孔ができるようにしたものをp-型半導体という

発光ダイオード

太陽光発電



放出される光の色は
半導体のバンドギャップ
で決まる

1eV ~ 3eV

赤外 ~ 青色

Photo by PiccoloNamek, from Wikimedia Commons

CC BY-SA 3.0

<http://commons.wikimedia.org/wiki/File:RGB-LED.jpg>

発光ダイオード

<第三步>

協力現象と相転移

— 磁性を例として —

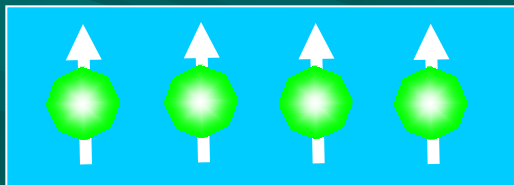
強磁性

ある物質が磁石（強磁性体）であるためには

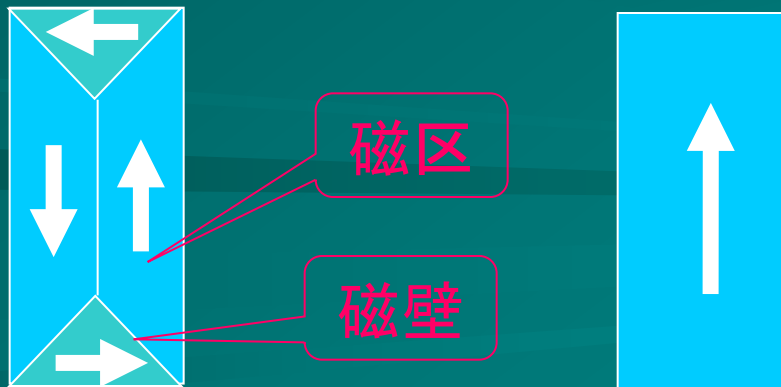
(1) 原子（あるいは分子）が磁気モーメント（ミクロの磁石）をもつ



(2) それらの磁気モーメントが同じ向きにそろおう



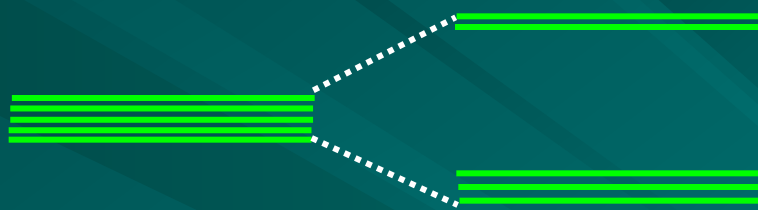
(3) マクロな試料が全体として磁化をもつ



原子の磁気モーメント

原子の d 軌道

↑スピン, ↓スピンに
対してそれぞれ5
つの席がある



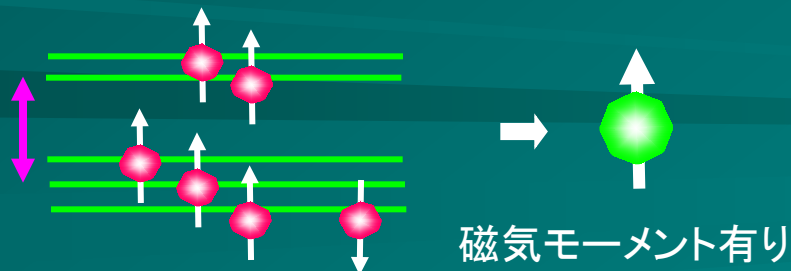
その原子が置かれた
環境(結晶場)によっ
て, 5つのエネルギー
準位が分裂する

ここに電子をどう詰めるか？

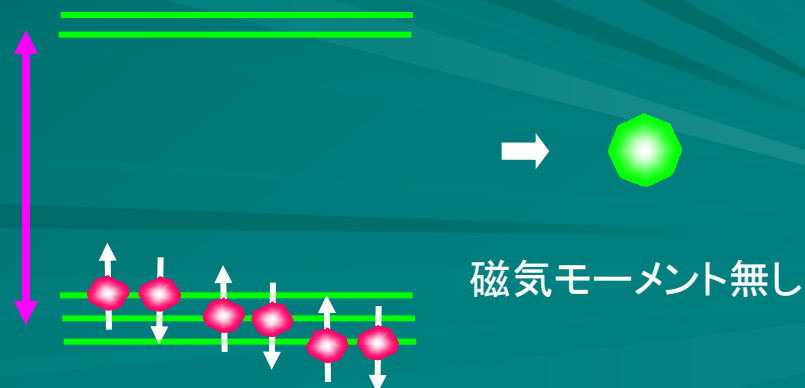
電子間のクーロン反発をできるだけ避けるには,
スピンの向きを同じにそろえるほうが得(フント則)

Fe^{2+} (d電子が6個) の例

分裂が小さい場合



分裂が大きい場合



原子の磁気モーメントをそろえる力

原子の磁気モーメントをそろえる力はなにか？



~~古典電磁気学の
磁気双極子相互作用？~~

相互作用として弱すぎる
(エネルギー < 1K)

原子の磁気モーメントをそろえる力

原子の磁気モーメントをそろえる力はなにか？



~~古典電磁気学の
磁気双極子相互作用？~~

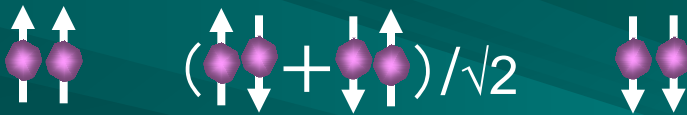
相互作用として弱すぎる
(エネルギー < 1K)



量子力学的な効果
交換相互作用

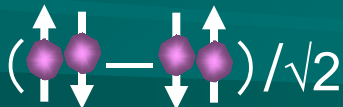
(スピンの向きによるクーロン相互作用の違い)

2つのスピンの平行 (スピン3重項)



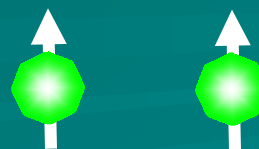
↑ ↓
クーロン相互作用エネルギーに差
(交換相互作用)

2つのスピンの反平行 (スピン1重項)



$$\text{エネルギー} = -J \mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2$$

強磁性的
 $J > 0$



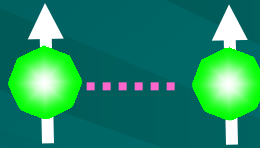
反強磁性的
 $J < 0$



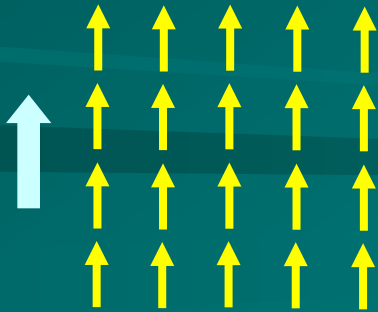
磁気秩序 (協力現象と相転移)

磁性体 = 原子の磁気モーメント (マイクロな磁石) の集合体

強磁性的相互作用 ($J > 0$)
⇒ 隣と平行になろうとする



秩序状態 (強磁性)




$T = 0$ 低温

高温

磁気秩序 (協力現象と相転移)

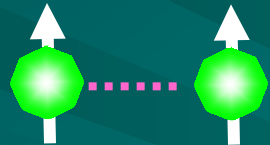
磁性体 = 原子の磁気モーメント (マイクロな磁石) の集合体

熱ゆらぎ
⇒ それぞれが勝手な方向を
向こうとする

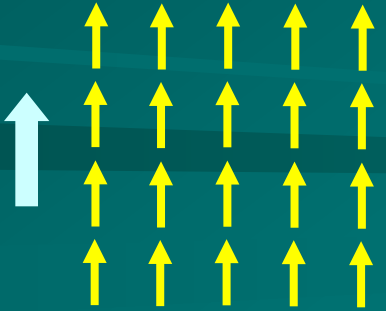


「好き勝手な方向を向きたい」

強磁性的相互作用 ($J > 0$)
⇒ 隣と平行になろうとする

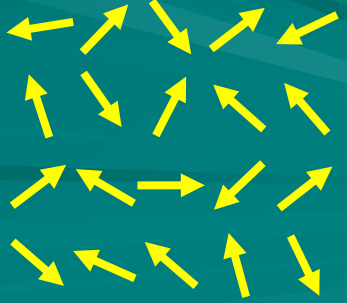


秩序状態 (強磁性)



$T = 0$ 低温

無秩序状態 (常磁性)




磁化ゼロ

高温

磁気秩序 (協力現象と相転移)

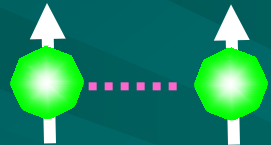
磁性体 = 原子の磁気モーメント (ミクロな磁石) の集合体

熱ゆらぎ
⇒ それぞれが勝手な方向を向こうとする



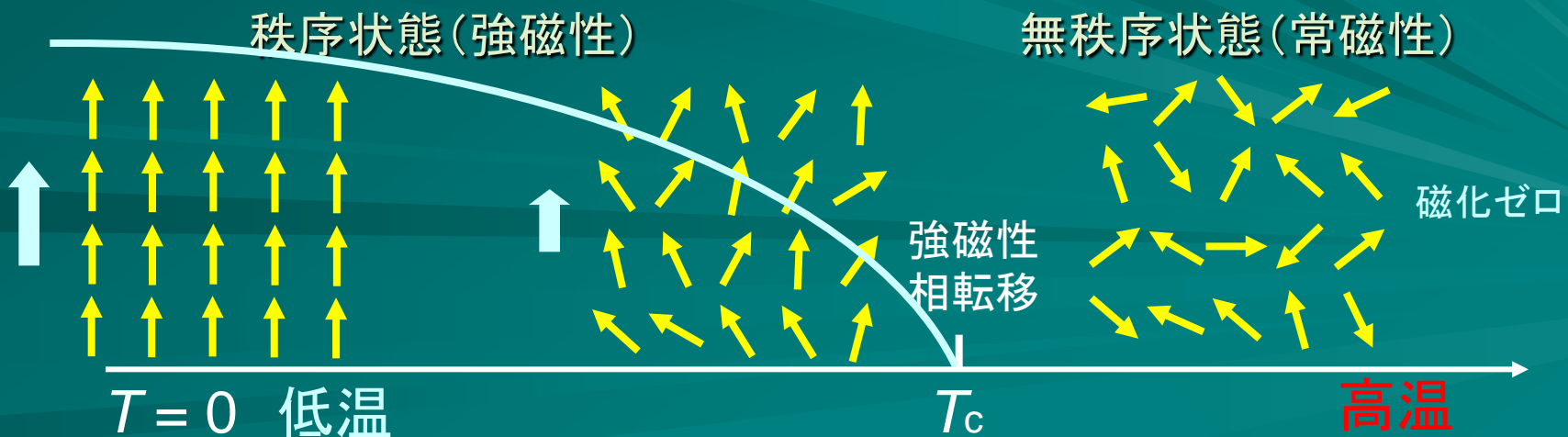
「好き勝手な方向を向きたい」

強磁性的相互作用 ($J > 0$)
⇒ 隣と平行になろうとする



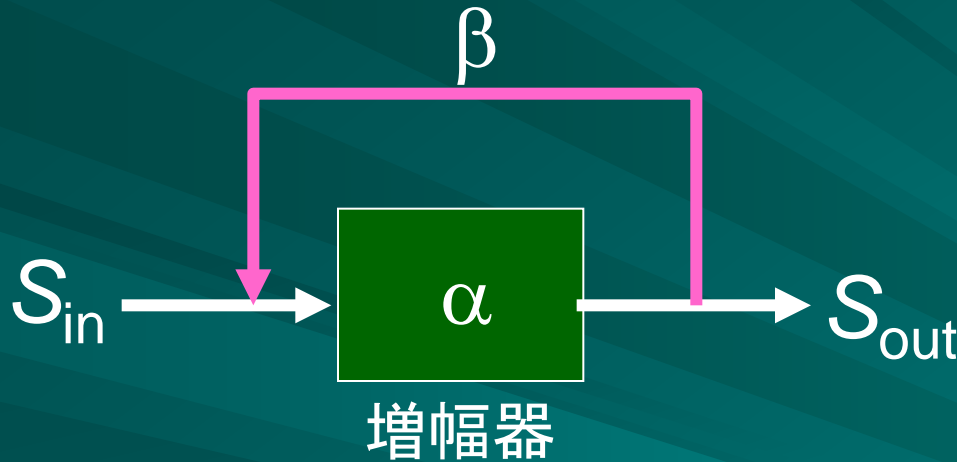
「でも隣近所とも折り合わない」と

「周りが皆、そっちを向くのなら自分も」



フィードバック

出力の一部を入力に加えること



$$S_{out} = \alpha S_{in}$$

$$S_{out} = \alpha (S_{in} + \beta S_{out})$$

$$S_{out} = \frac{\alpha}{(1 - \alpha\beta)} S_{in}$$

① β が負の場合
negative feedback

$$S_{out} = \frac{\alpha}{(1 + \alpha|\beta|)} S_{in} \sim \frac{1}{|\beta|} S_{in} \text{ 安定性}$$

② β が正の場合
positive feedback

$$S_{out} = \frac{\alpha}{(1 - \alpha\beta)} S_{in} \quad \alpha\beta = 1 \text{ で発振}$$

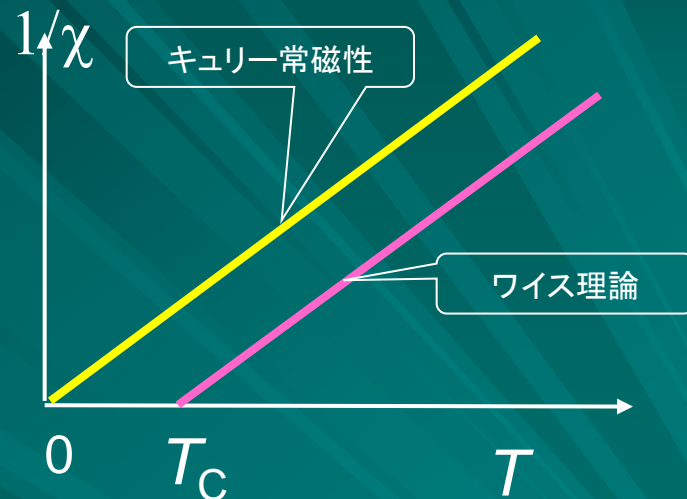
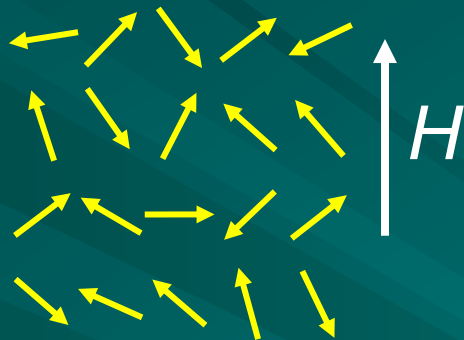
強磁性の平均場理論(ワイス理論)

キュリー常磁性(かけた磁場に比例した磁化)

$$M = \chi H$$

$$\chi = \frac{C}{T}$$

χ : 磁化率



磁気モーメント間の相互作用を平均場として採り入れる

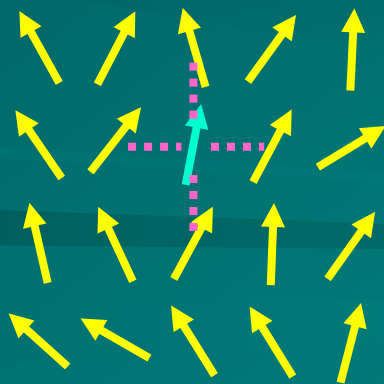
協力現象: 一種のフィードバック機構

外部磁場

周りの磁気モーメントによる有効磁場

$$M = \frac{C}{T} (H + \beta M)$$

$$M \left(1 - \beta \frac{C}{T} \right) = \frac{C}{T} H$$



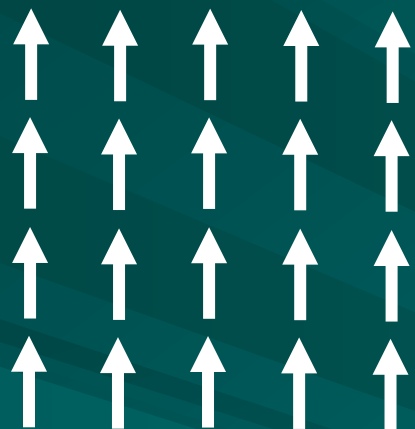
$$M = \frac{C/T}{(1 - \beta C/T)} H$$

$$= \frac{C}{(T - T_c)} H \quad (T_c \equiv \beta C)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\chi} = \frac{1}{C} (T - T_c)$$

T_c : 強磁性転移温度

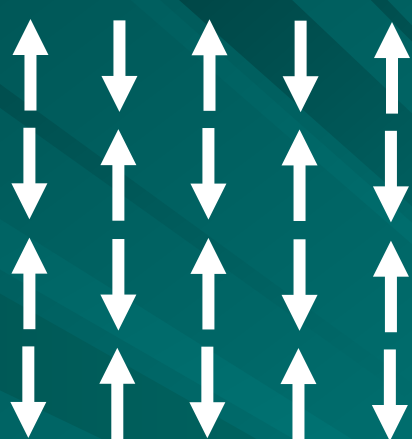
磁気秩序のいろいろ



秩序状態

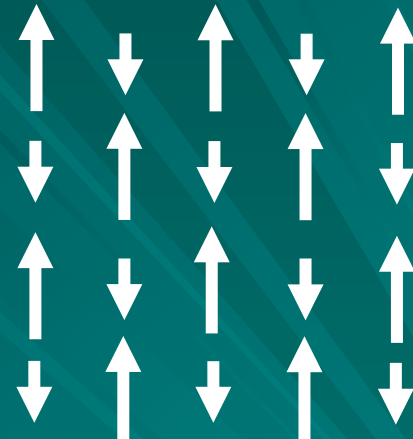
強磁性

(マクロな磁化あり)



反強磁性

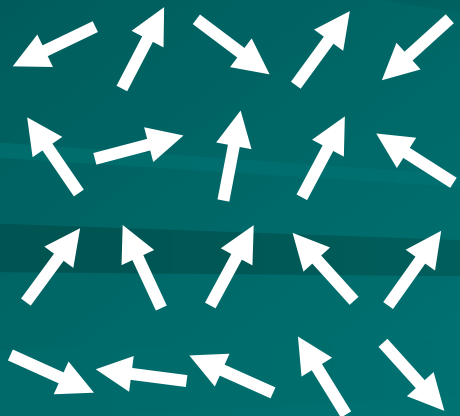
(マクロな磁化なし)



フェリ磁性

(マクロな磁化あり)

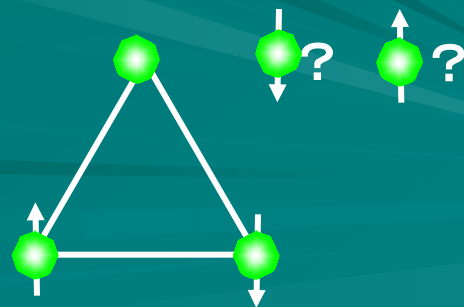
高温では



無秩序状態

常磁性 (マクロな磁化なし)

配置が三角形だったら？



フラストレーション

第5回： 物質の個性（物性）はどこから生まれるか

- 温度について（前回の補足）
- 物質の構造
 - 原子の並び方
- 物性科学 はじめの三歩
 - 第一歩： 原子の構造と周期律
 - 第二歩： 原子から固体へ
金属・絶縁体・半導体
 - 第三歩： 協力現象と相転移
磁性を例として