

9 章 バンド理論

(執筆者: 清水清孝)[年 月 受領]

概要

【本章の構成】

12 群 - 5 編 - 9 章

9-1 周期ポテンシャル

(執筆者: 清水清孝) [2009 年 1 月 受領]

ここでは結晶中を運動する電子について考えよう。結晶中では、原子または原子団が各格子点に規則的に配列している。したがって電子に働く力は周期的なポテンシャルである。格子間の x 方向の距離を l とすると、ポテンシャル $U(x)$ は周期性をもち $U(x+l) = U(x)$ である。このような周期性をもつポテンシャル中での、シュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (9\cdot1)$$

の解は以下のかたちをもつことが F. Bloch によって証明された。

$$\Psi(x) = u(x) \exp(ikx), \quad u(x+l) = u(x) \quad (9\cdot2)$$

ポテンシャル $U(x)$ がないときは方程式の解は以下ようになる。

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad \Psi = \exp(ikx) \quad (9\cdot3)$$

12 群 - 5 編 - 9 章

9-2 クローニツヒ・ペニーモデル

(執筆者：清水清孝)[2009年1月受領]

それでは、周期的なポテンシャル $U(x)$ が存在する場合はどうなるのだろうか。簡単に解けるポテンシャルとして、図 9-1 のような井戸型の障壁をもつポテンシャルについて考えてみよう。これはクローニツヒとペニーによって導入されたモデルである。これは高さが V_0 で幅が b 、そして周期が $l = a + b$ の井戸型ポテンシャルである。

$$U(x) = 0 \quad (0 \leq x < a), \quad U(x) = V_0 \quad (a \leq x < a + b), \quad U(x + l) = U(x) \quad (9.4)$$

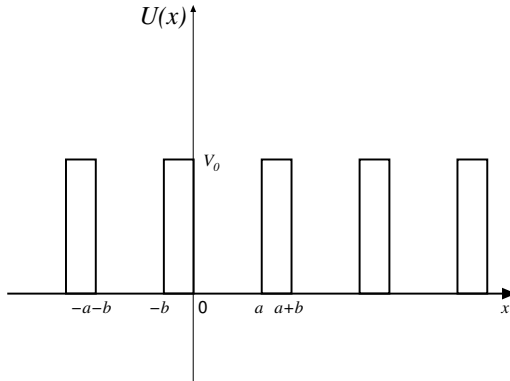


図 9-1 周期ポテンシャル

ポテンシャルとしては、幅 b に関しては $b \ll a$ とし、ポテンシャルの高さと幅の積 $V_0 b$ 、つまり障壁の面積は有限とする。積 $V_0 b$ はポテンシャル障壁の強さと呼ばれる。

上記のポテンシャルに対するシュレーディンガー方程式は以下ようになる。

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} E \Psi = 0 \quad (0 \leq x < a) \quad (9.5)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \Psi = 0 \quad (a \leq x < a + b) \quad (9.6)$$

ここでは、 $V_0 > E \geq 0$ とすると、波動関数は指数関数で表され以下ようになる。

$$u(x) = u_I(x) = e^{-ikx} (Ae^{iax} + Be^{-iax}) \quad (0 \leq x < a) \quad (9.7)$$

$$u(x) = u_{II}(x) = e^{-ikx} (Ce^{-\beta x} + De^{\beta x}) \quad (a \leq x < a + b) \quad (9.8)$$

ここで式を見やすくするために以下のように実数 α と β を定義した。

$$\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad \beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \quad (9.9)$$

波動関数に現れる A, B, C, D は定数であり、波動関数 $u(x)$ が連続でかつ周期性をもつ条件から

決定される．つまり $u_I(x)$ 及びその微分と $u_{II}(x)$ 及びその微分が $x=0$ で等しく，また $x=0$ と $x=a+b$ で等しくなければならない． $x=0$ で等しくなる条件より以下の 2 式を得る．

$$A + B = C + D \quad (9 \cdot 10)$$

$$-Ai(k - \alpha) - Bi(k + \alpha) = -C(ik + \beta) + D(-ik + \beta) \quad (9 \cdot 11)$$

また $x=0$ と $x=a+b$ で等しい条件は， $x=0$ で $u_I(x)$ と $x=-b$ で $u_{II}(x)$ が等しいことと同じなので，以下の関係式を得る．

$$Ae^{(-ik+i\alpha)a} + Be^{(-ik-i\alpha)a} = Ce^{(ik+\beta)b} + De^{(ik-\beta)b} \quad (9 \cdot 12)$$

$$\begin{aligned} & -Ai(k - \alpha)e^{(-ik+i\alpha)a} - Bi(k + \alpha)e^{(-ik-i\alpha)a} \\ & = -C(ik + \beta)e^{(ik+\beta)b} + D(-ik + \beta)e^{(ik-\beta)b} \end{aligned} \quad (9 \cdot 13)$$

A, B, C, D がすべてゼロである以外の解をもつためには上記の連立方程式の係数である行列の，行列式がゼロでなければならない．したがって以下の式を得る．

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ -i(k - \alpha) & -i(k + \alpha) & ik + \beta & ik - \beta \\ e^{(-ik+i\alpha)a} & e^{(-ik-i\alpha)a} & -e^{(ik+\beta)b} & -e^{(ik-\beta)b} \\ -i(k - \alpha)e^{(-ik+i\alpha)a} & -i(k + \alpha)e^{(-ik-i\alpha)a} & (ik + \beta)e^{(ik+\beta)b} & (ik - \beta)e^{(ik-\beta)b} \end{vmatrix} \quad (9 \cdot 14)$$

$$= 4i(\beta^2 - \alpha^2) \sinh(\beta b) \sin(\alpha a) + 8i\alpha\beta \{ \cosh(\beta b) \cos(\alpha a) - \cos k(a+b) \} = 0 \quad (9 \cdot 15)$$

以上より以下の式を得る．

$$\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \sinh(\beta b) \sin(\alpha a) + \cosh(\beta b) \cos(\alpha a) = \cos k(a+b) \quad (9 \cdot 16)$$

ここで左辺はエネルギー E ，つまり $\alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$ の関数である．これを無次元の量 αa を使って $X(\alpha a)$ とする．

$$X(\alpha a) \equiv \frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \sinh(\beta b) \sin(\alpha a) + \cosh(\beta b) \cos(\alpha a) \quad (9 \cdot 17)$$

等式の右辺は $\cos k(a+b)$ なので，絶対値は 1 より小さい．したがって左辺の $X(\alpha a)$ の絶対値が 1 より小さいエネルギー E に対して解が存在する．実は図 2.2 に示すようにこの条件は常に満たされるわけではなくて， E の値によって解がある場合とない場合がある．解が存在する領域を許されるエネルギーバンドと呼び，禁止されるエネルギー領域を禁止されるバンドと呼ぶ．

これからの議論を簡単化するために，ポテンシャルの強さ $V_0 b$ を無次元の量 P を使って書く．

$$P = \frac{mabV_0}{\hbar^2} \rightarrow V_0 b = \frac{\hbar^2}{ma} P \quad (9 \cdot 18)$$

すると

$$\beta^2 = \frac{2}{ab}P - \alpha^2 \quad (9 \cdot 19)$$

となる．図 9・2 の破線は $b/a = 0.02$ で $P = 3\pi/2$ の場合の $X(\alpha a)$ を αa の関数で書いたグラフである．

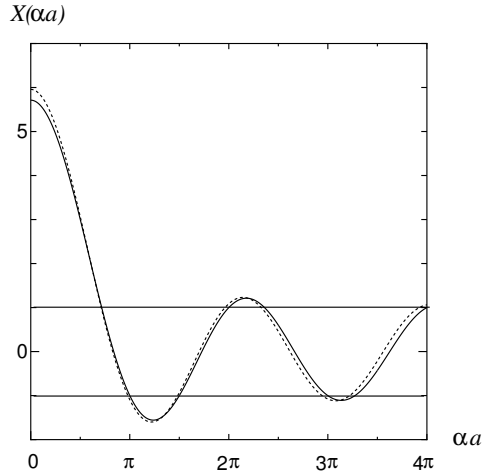


図 9・2 関数 $X(\alpha a)$ とその近似式 (9・21)

議論を簡単化するために，ここでは $V_0 \gg E$ で $a \gg b$ の場合について考えてみよう． $\alpha^2 \ll \beta^2$ であり， $V_0 b$ が有限の値とすると， $\beta b \ll 1$ となり，以下の近似を使うことができる．

$$\sinh(\beta b) \sim \beta b \rightarrow \frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \sinh(\beta b) \sim \frac{\beta^2 b}{2\alpha} \sim \frac{P}{\alpha a} \quad (9 \cdot 20)$$

さらに $\cosh(\beta b) \sim 1$ を使うと，関係式 $X(\alpha a) = \cos k(a+b)$ を以下のかたちで近似できる．

$$P \frac{\sin \alpha a}{\alpha a} + \cos \alpha a = \cos k a \quad (9 \cdot 21)$$

この式の左辺を図 9・2 の実線で示す．図から分かるように，かなり良い近似である．

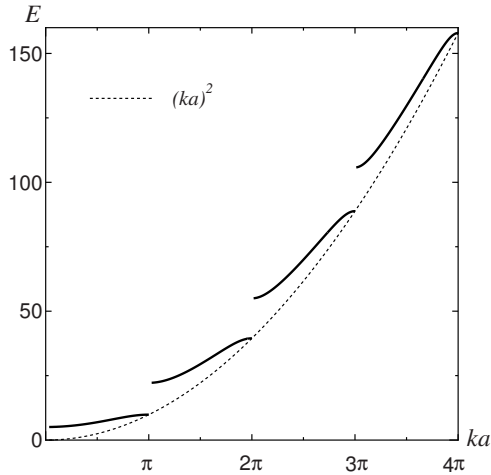


図 9.3 バンドギャップ

最後に、 ka とエネルギー関係について考察しよう．エネルギー E は $(\alpha\hbar)^2/2m$ で与えられるので、上の式より k の関数として表すことができる．右辺が ka の周期関数であることから、 ka に関しては 2π の不定性があるが、ポテンシャル $U(x)$ がゼロのとき、エネルギーが $E = (\hbar k)^2/2m$ であることに対応させるようにして、 E を ka の関数として書いたものが図 9.3 である．ただしエネルギーは単位 $\hbar^2/2ma^2$ で表し、参考のために $(ka)^2$ も書いておく．この図から分かるように、 $ka = \pi, 2\pi, \dots$ において、エネルギーにギャップが生じる．