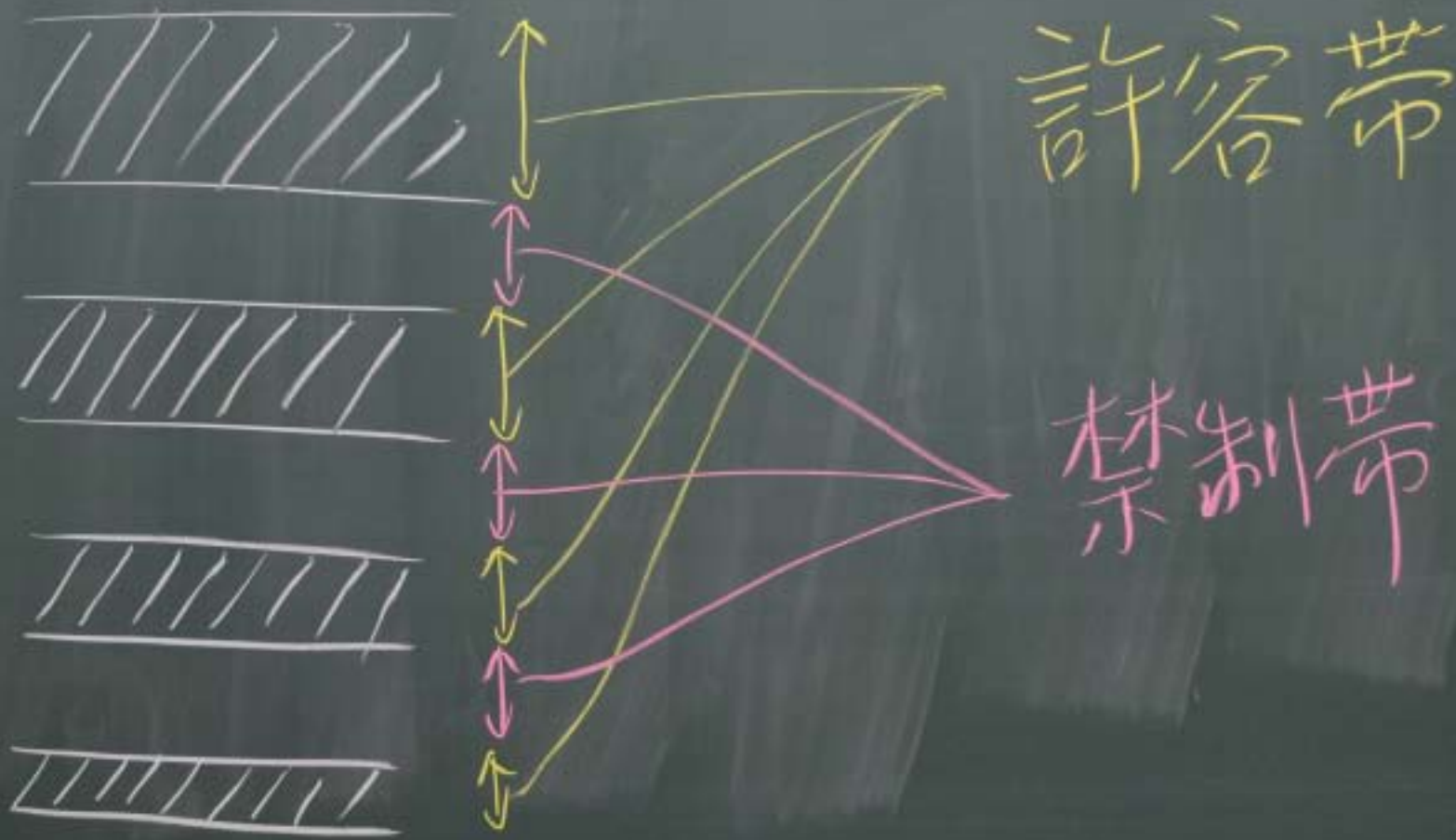
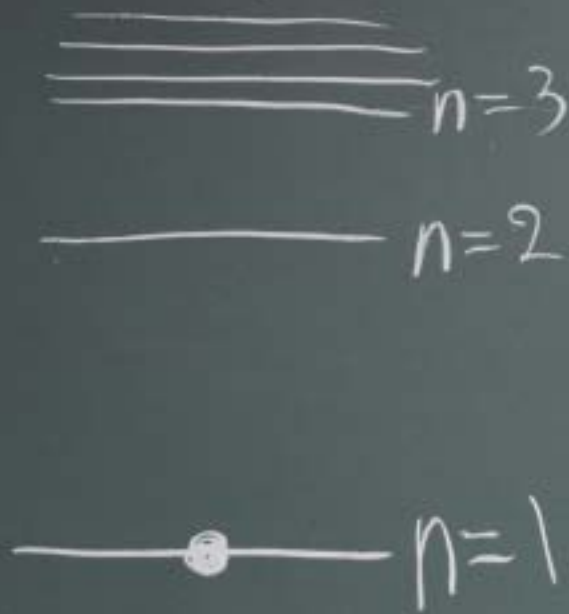


4.2 固体のバンド理論

↑
電子のエネルギー



H 原子

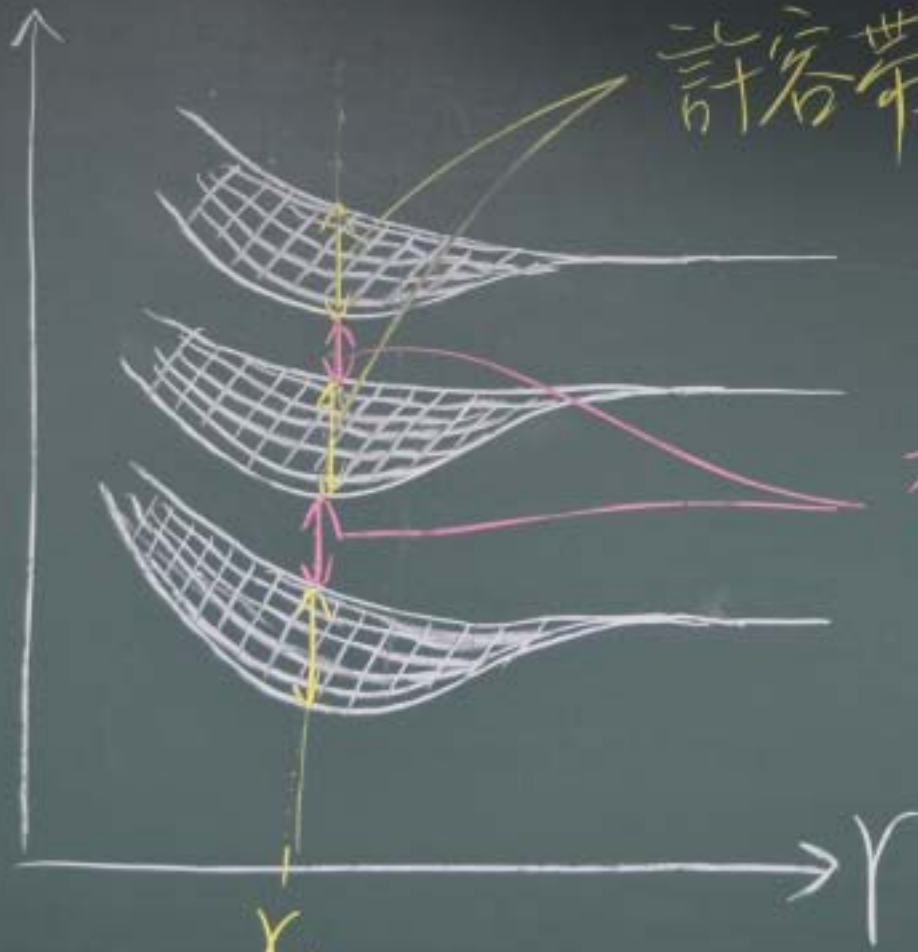


H₂ 分子



固体 (N 個の原子)

E



許容帯

禁制帯

周期的ポテンシヤル中の粒子

γ_0

γ

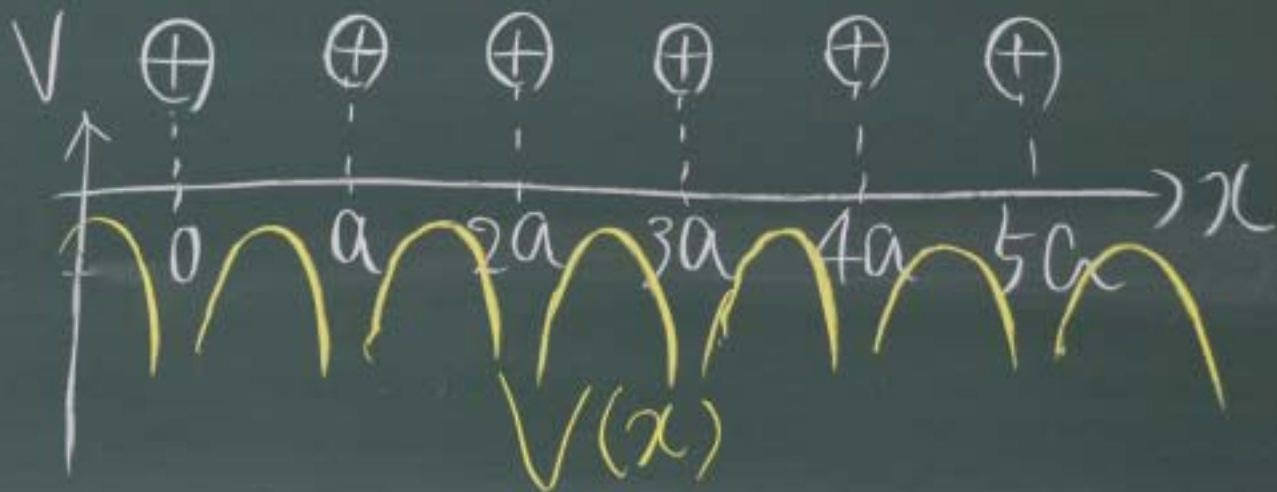
シュレディンガー方程式

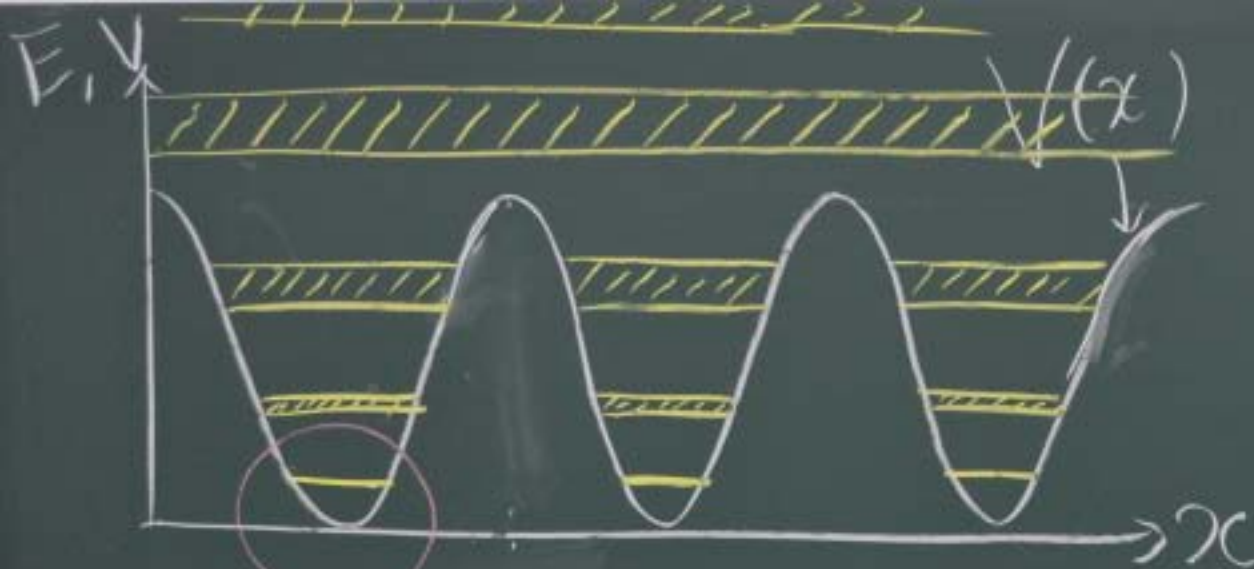
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi$$

ポテンシャル

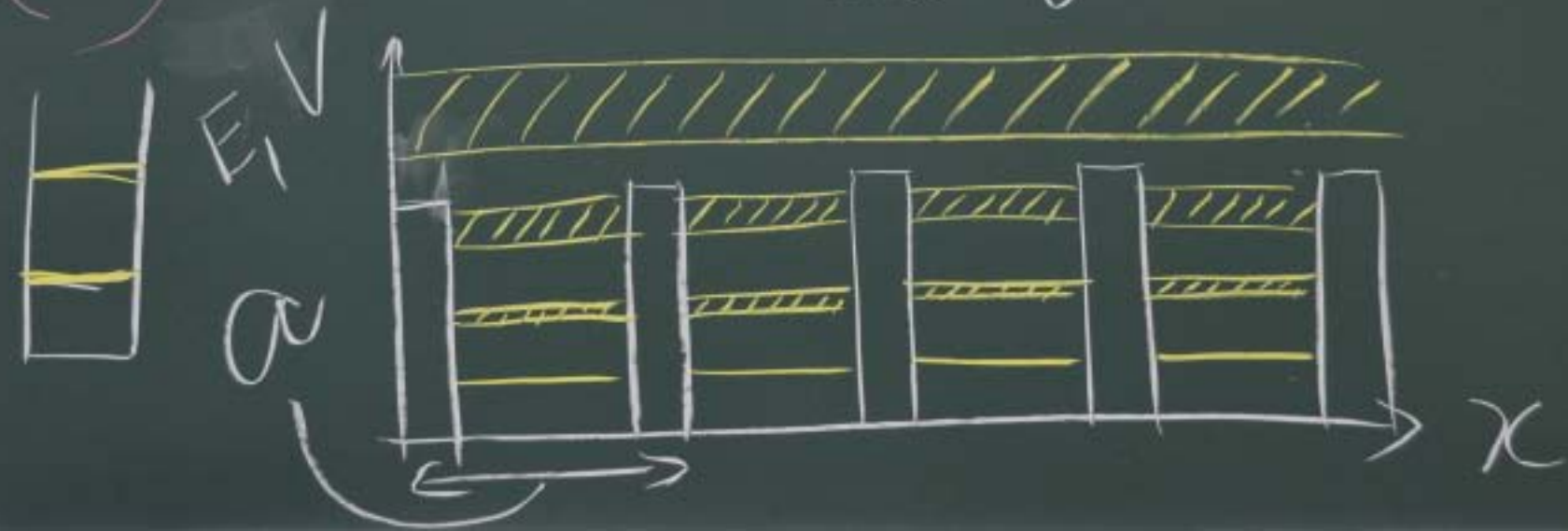
エネルギー固有値
を求める

$E-k$ 曲線





712-シムル.ノニ
 のモデル



周期的ポテンシャル中の粒子の波動関数

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \cdot U(\mathbf{r})$$

ここで

$$U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3)$$

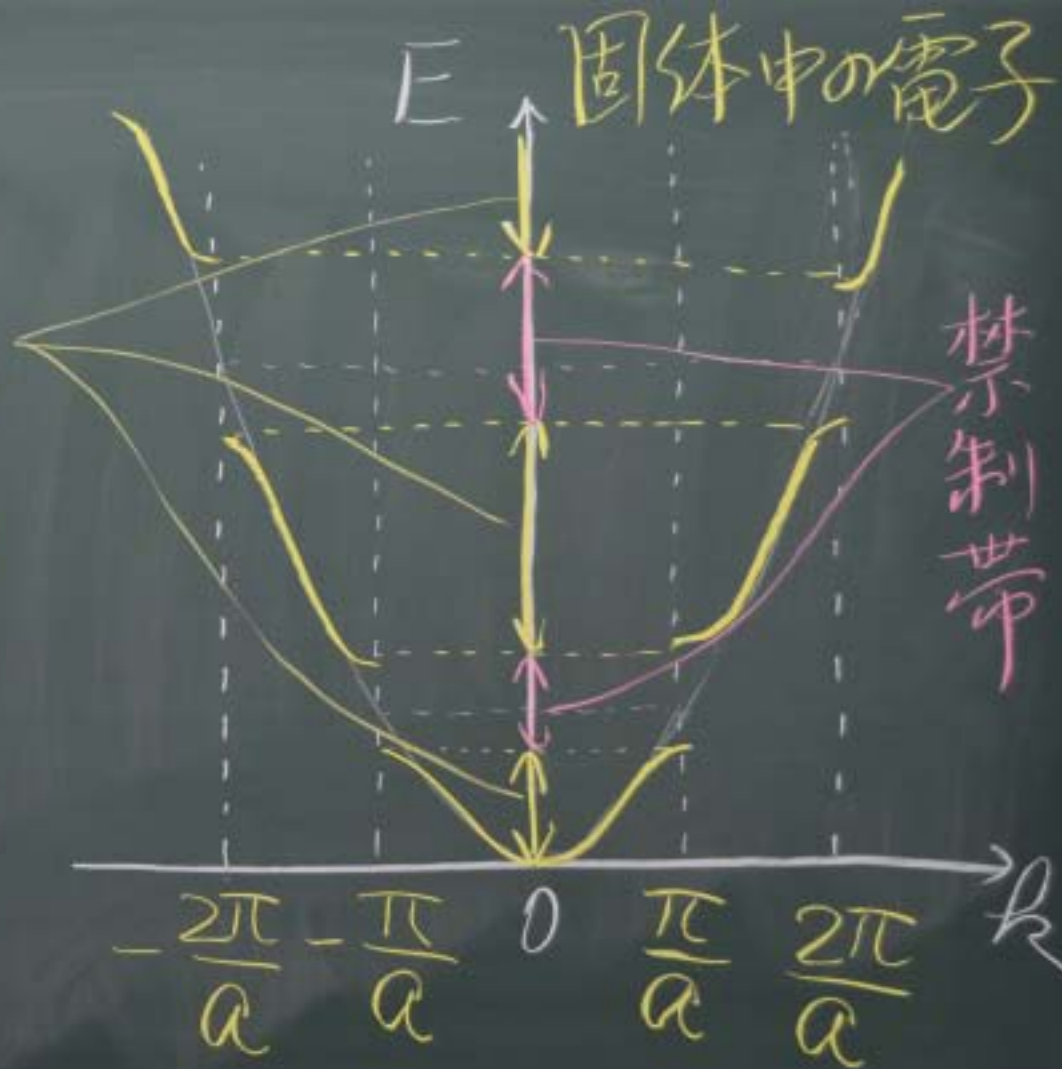
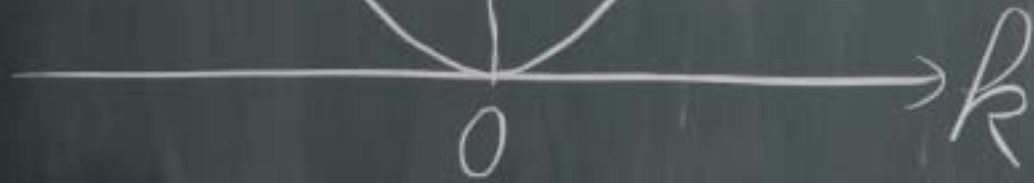
の周期関数 ~~グロツホの定理~~
基本並進ベクトル

(真空中)
自由電子

E

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

許容帯



$k = \frac{n\pi}{a}$ のとき、エネルギー不連続

$$\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{n\pi}{a} \rightarrow 2a = n\lambda \leftarrow \begin{array}{l} \text{ブラッグの回折} \\ \text{条件と等価} \end{array}$$

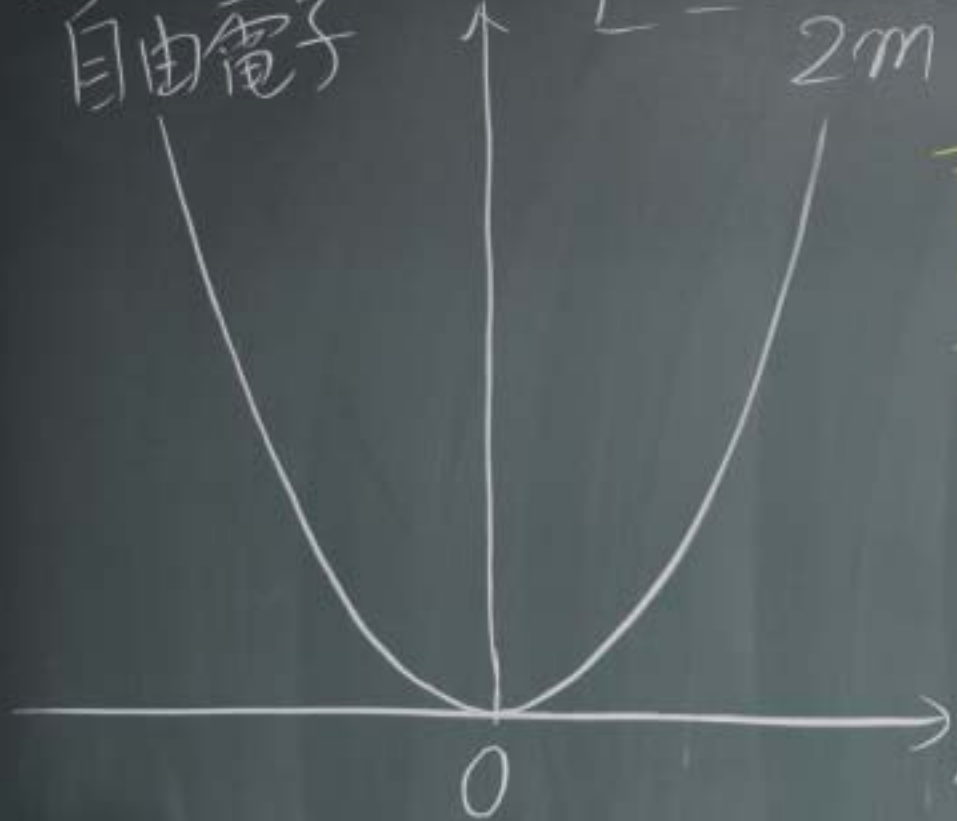
ブラッグの回折条件 $2d\sin\theta = n\lambda$

— 次元結晶のとき、 $\theta = 90^\circ \rightarrow \sin\theta = 1$

(真空中)
自由電子

E

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$



許容帯

$\sin \frac{\pi}{a} x$

E 固体中の電子





群速度ゼロ

同じk

$$k = \frac{\pi}{a}$$

↓ 0.5λ

定在波 (伝搬しない)

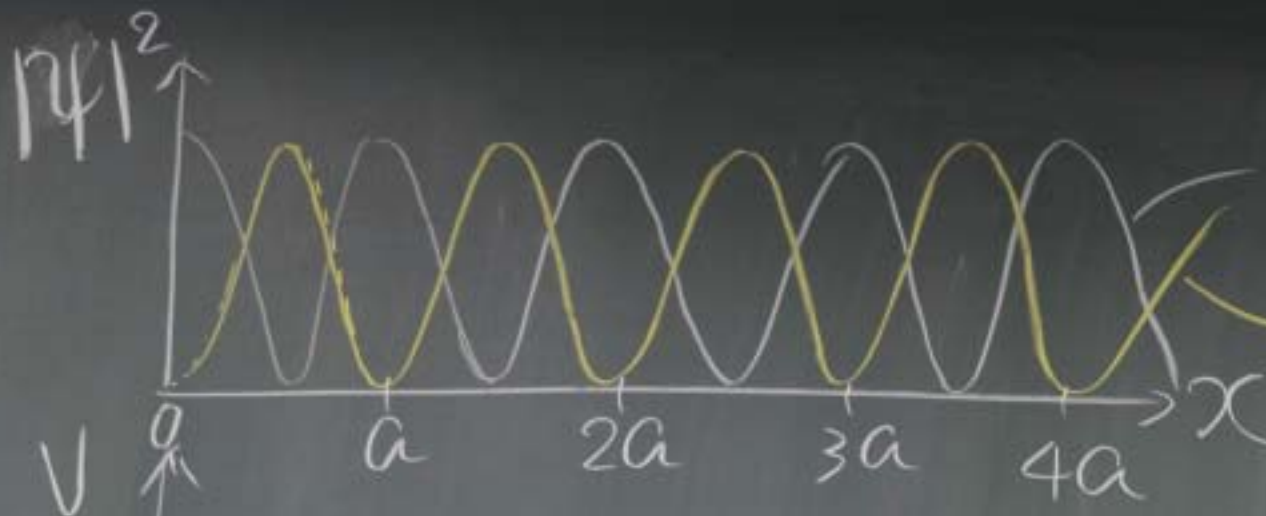
n=1

$$2a = \lambda$$

$$\psi_1 \sim e^{ikx} + e^{-ikx} = e^{i\frac{\pi}{a}x} + e^{-i\frac{\pi}{a}x}$$

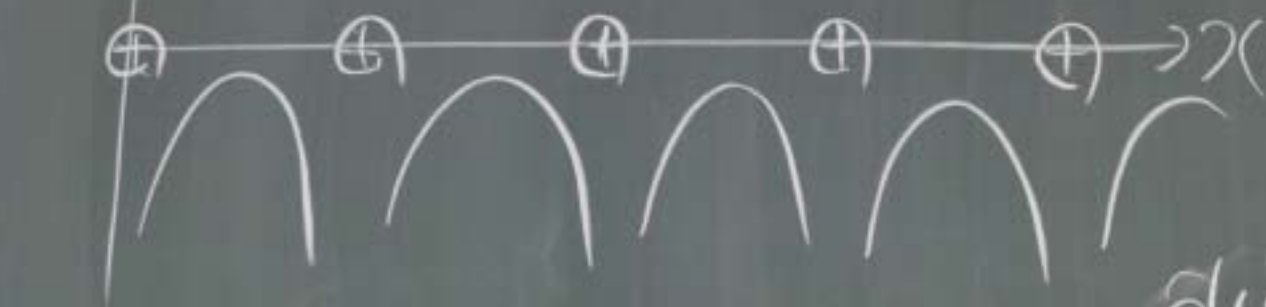
$$\sim \cos \frac{\pi}{a}x$$

$$\psi_2 \sim e^{ikx} - e^{-ikx} = \sin \frac{\pi}{a}x$$



$|\psi_1|^2 \rightarrow E_1$

$|\psi_2|^2 \rightarrow E_2$



$E_2 > E_1$

$E = \hbar\omega$

$V_g = \frac{d\omega}{dk} = 0 \iff \frac{dE}{dk} = 0$

(真空中) 自由電子 $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

長空間 \leftrightarrow 逆格子

空間

$\frac{2\pi}{a}$ 周期

第1次ブリルアン領域

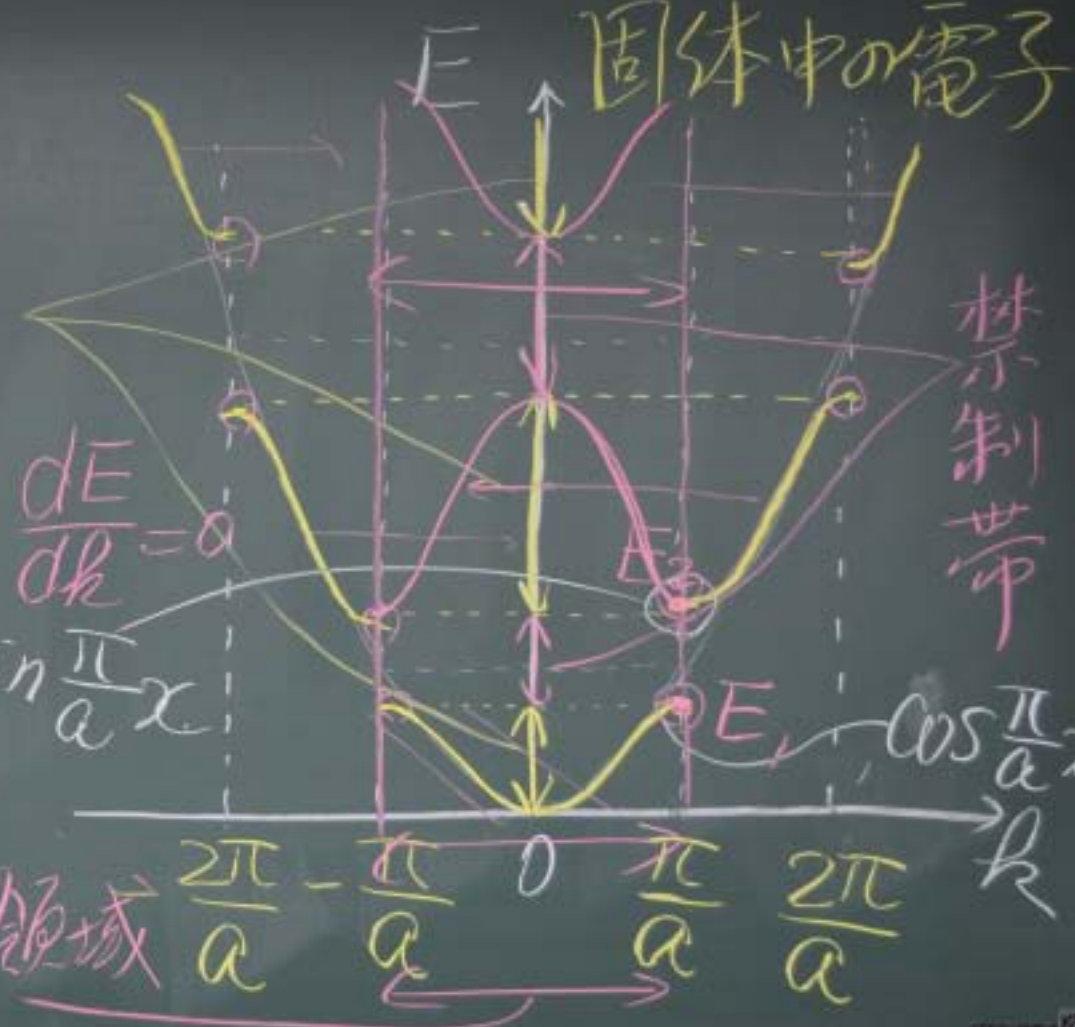
許容帯

$$\frac{dE}{dk} = 0$$

$$\sin \frac{\pi}{a} x$$

$$\frac{2\pi}{a} \quad -\frac{\pi}{a} \quad 0 \quad \frac{\pi}{a} \quad \frac{2\pi}{a}$$

固体中の電子



$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$$

第1 Brillouin zone

4.5 固体中の電子の速度と質量

$ma = F$ 電子: 物質波

波の群速度 $v = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$

波の「加速度」 $a = \frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2E}{dk^2} \left(\frac{dk}{dt} \right)$

外力 F . 距離 $dx \rightarrow dE$.

$$dE = F \cdot dx = F \cdot \underline{v \cdot dt} = \frac{F}{\hbar} \cdot \frac{dE}{dk} \cdot dt.$$

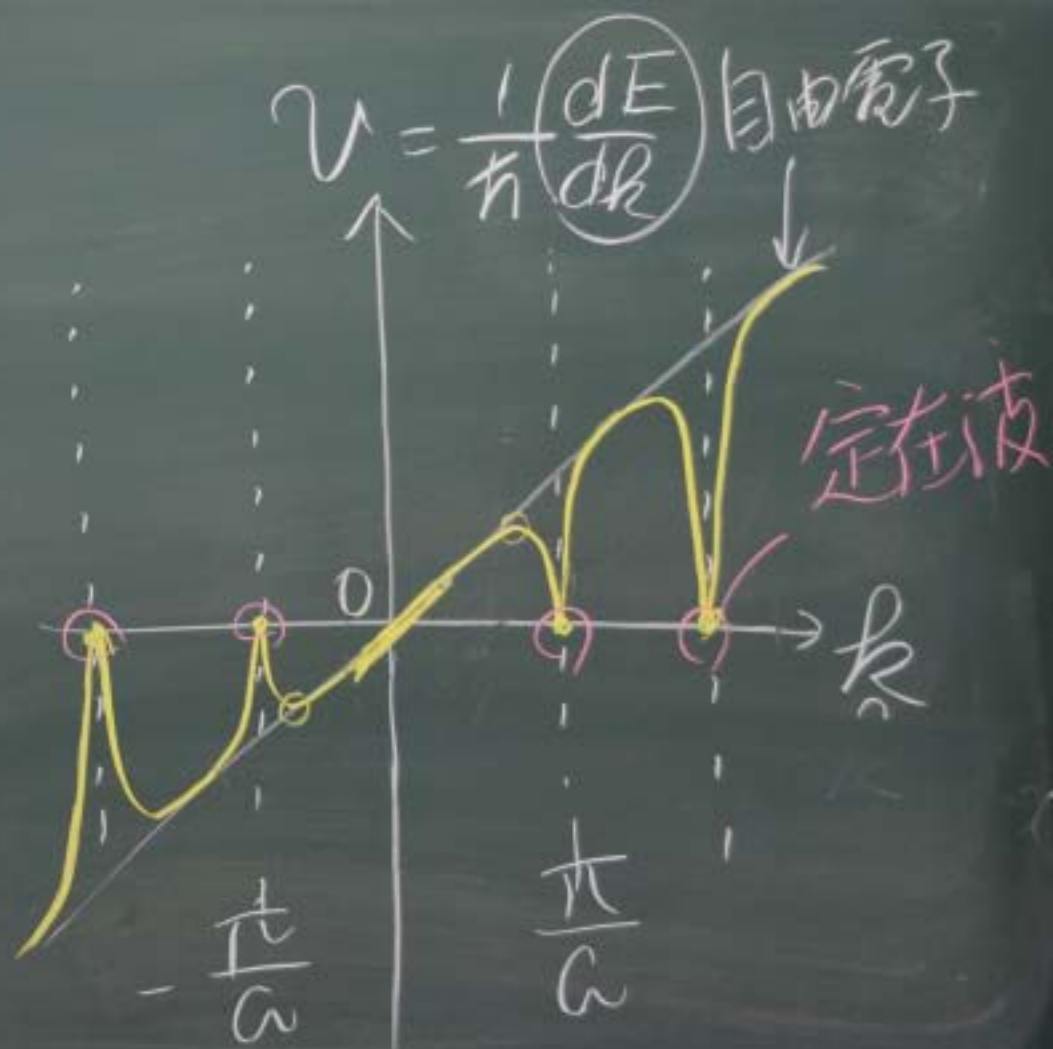
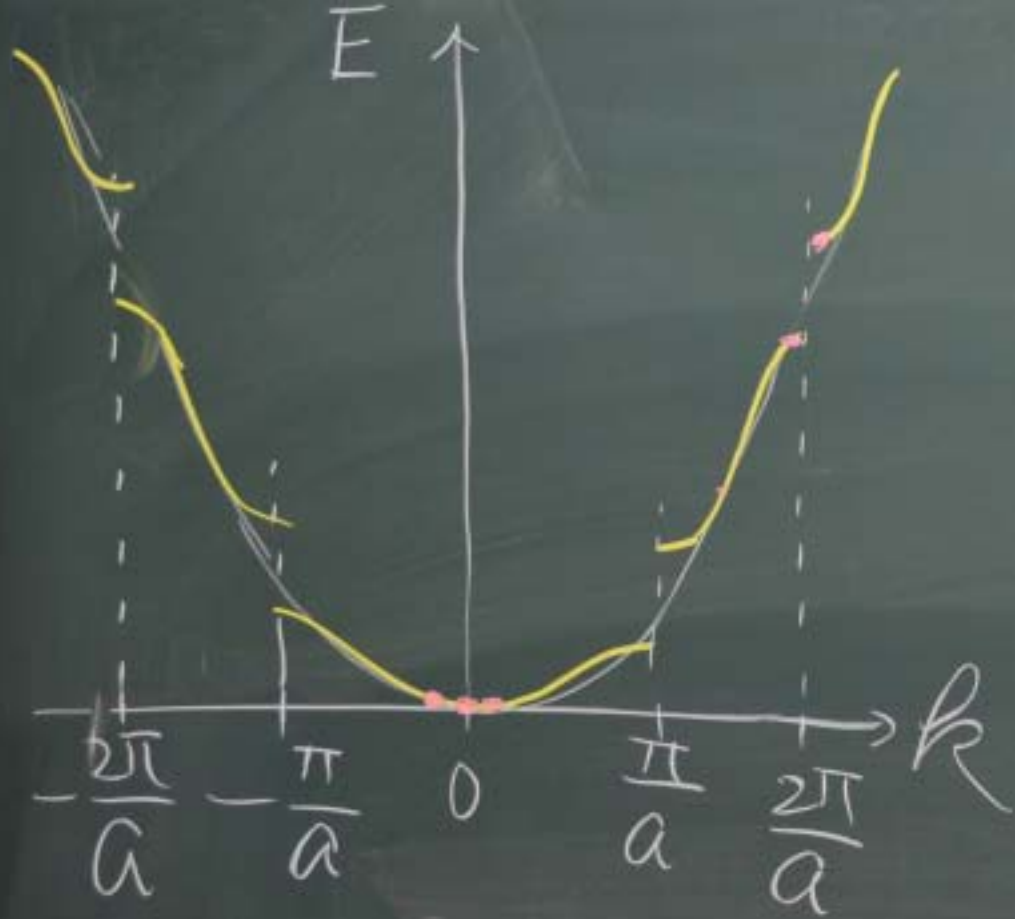
$$\frac{dk}{dt} = \frac{F}{\hbar}.$$

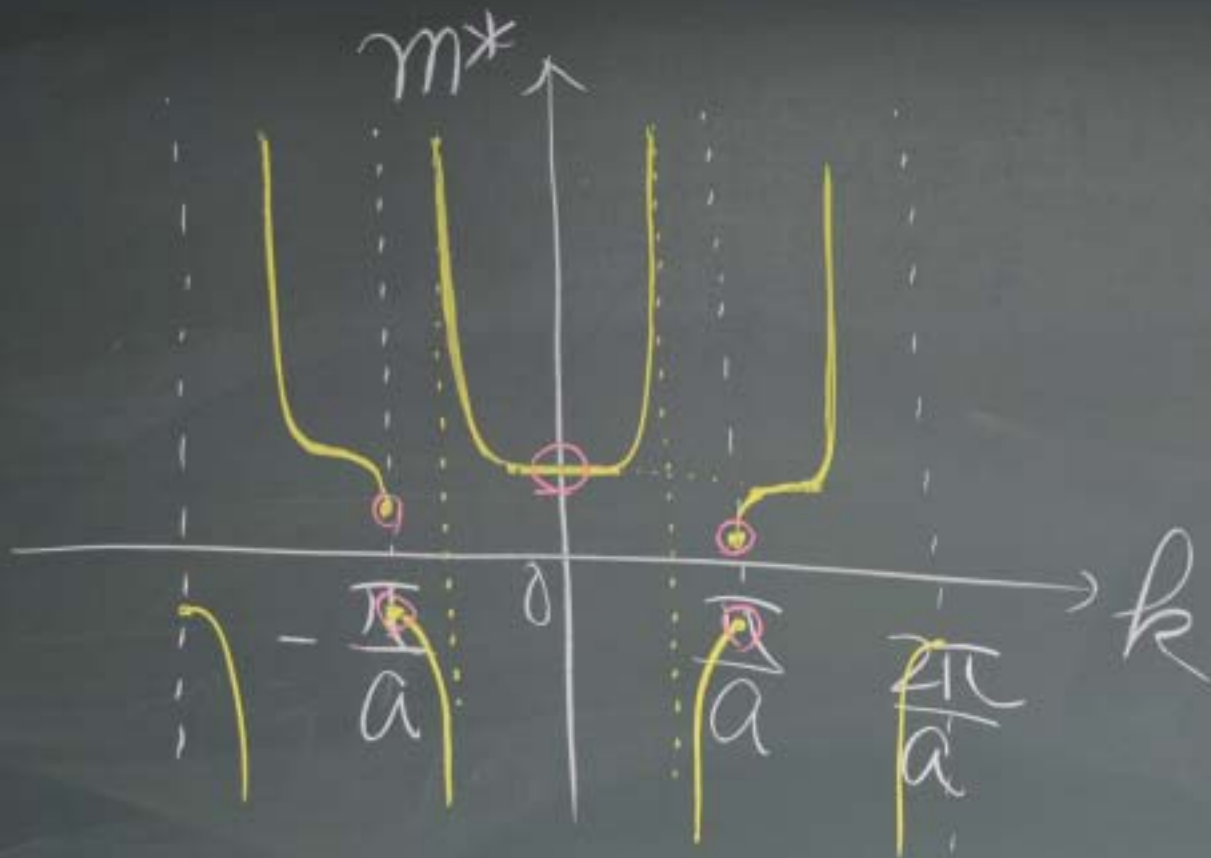
$$a = \frac{F}{\hbar^2} \cdot \frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{F}{m^*}.$$

有效質量 $m^* = \frac{\hbar^2}{d^2E/dk^2}$

$$\frac{d^2E}{dk^2} = \frac{\hbar^2}{m^*} \rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

$$m^* = 0.1 \sim 0.3 m_0$$





$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E}{dk^2}}$$