固体物理学1

第9講

波束としての電子

~~ あるときは波、またあるときは粒 ~~

広島大学　井野明洋

居室: 理D205、放射光セ408

運動量って、何だっけ？ ツボQ1

✕ (1) 質量 × **速度**

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v}$$

○ (2) 並進対称性が
あるときの **保存量**

$$\Delta\mathbf{p} = \int \mathbf{F}(t)\,dt$$

力積

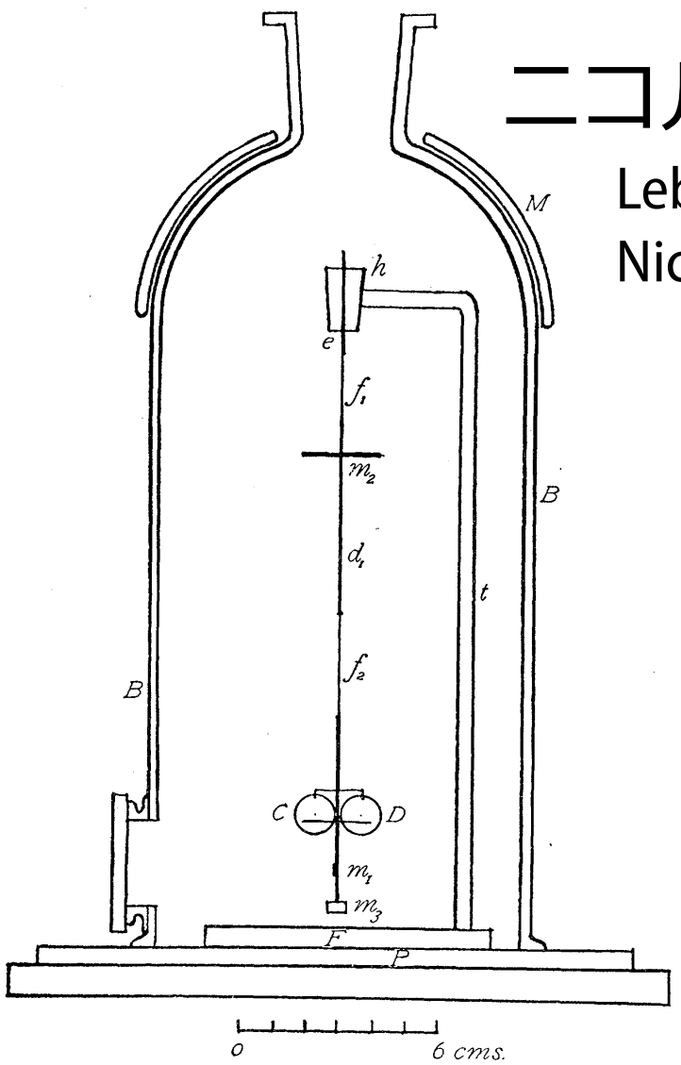
○ (3) プランク定数 × **波数**

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$$

必ずしも正しくないのは、どれ？

実験事実

$\mathbf{p} \neq m\mathbf{v}$ の例：光子の運動量



ニコルス放射計

Lebedew (1900).
Nicols and Hull (1901).

Phys. Rev. **20**, 292 (1905).

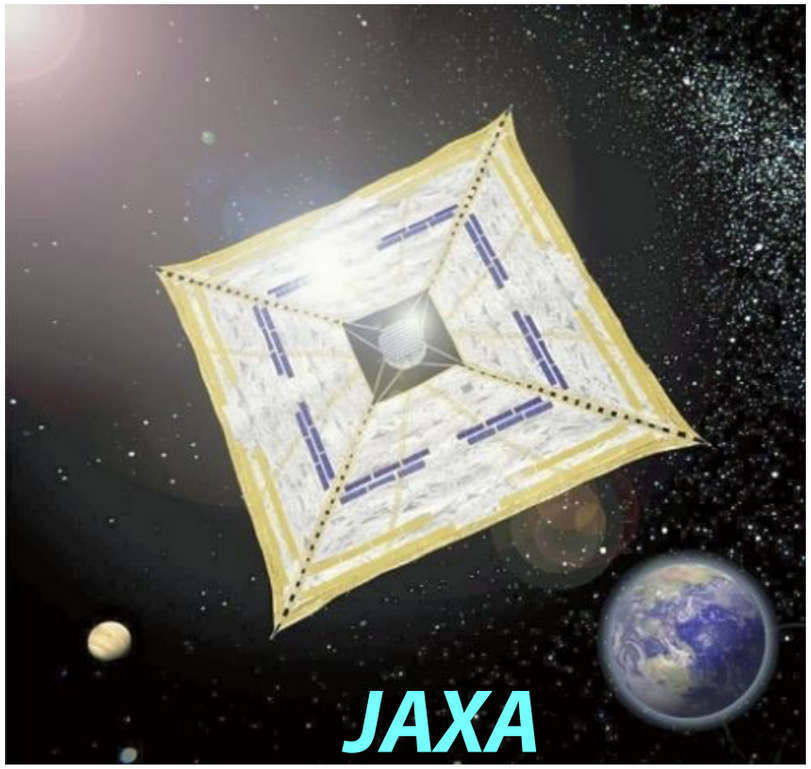
運動量密度

$$\mathbf{w} = \frac{1}{c^2}\,\mathbf{E} \times \mathbf{H}$$

ポインティング・ベクトル

太陽光の放射圧は 4.6 μPa

ソーラーセイル、IKAROS



http://www.isas.jaxa.jp/j/enterp/missions/ikaros/index.shtml

ツボ Q2

光子は、**質量ゼロ**でも、**運動量をもつ**

他にも、$\mathbf{p} \neq m\mathbf{v}$ の例

- **光子（電磁波）** の運動量 $p = \dfrac{h}{\lambda} = \hbar k$

- **相対論的粒子** の運動量 $p = \dfrac{mv}{\sqrt{1-(v/c)^2}}$

- **固体中の電子 の運動量** **???**
  量子力学における運動量 ???

運動量とは、決して、**速度の親戚 ではない!!!**

先入観を棄てて下さい。

じゃあ、運動量って、一体、何なのさ？
もっとわかりやすい絵は無いの？

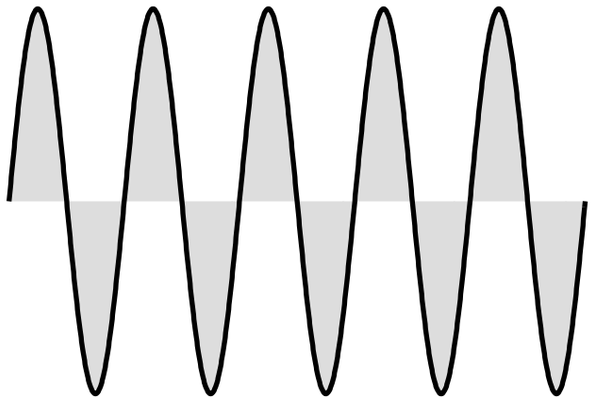
Louis Victor de Broglie

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$$

宇宙普遍の
絶対定数

空間、時間、
物体の種類･粒子数･性質
に依存せず

波動関数の **波数**



運動量 と **波数** は、**完全に同一の物理量!!!**

課題

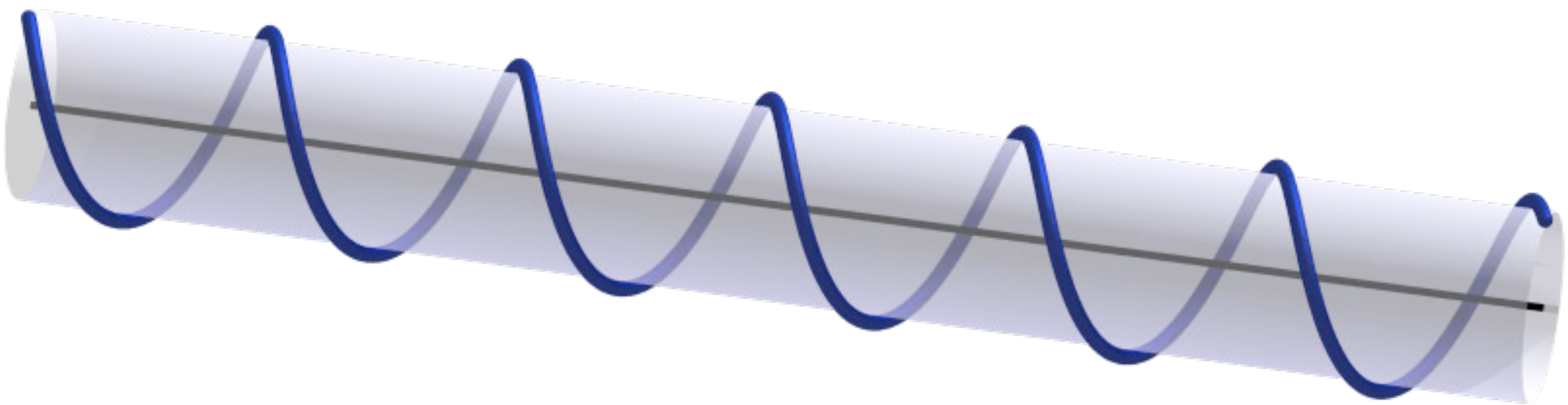
$\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ を使わずに

$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ から

電子の運動を求める

電子 の 速度?

そもそも、平面波 $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ は、位置 $\mathbf{r}$ を特定できない。

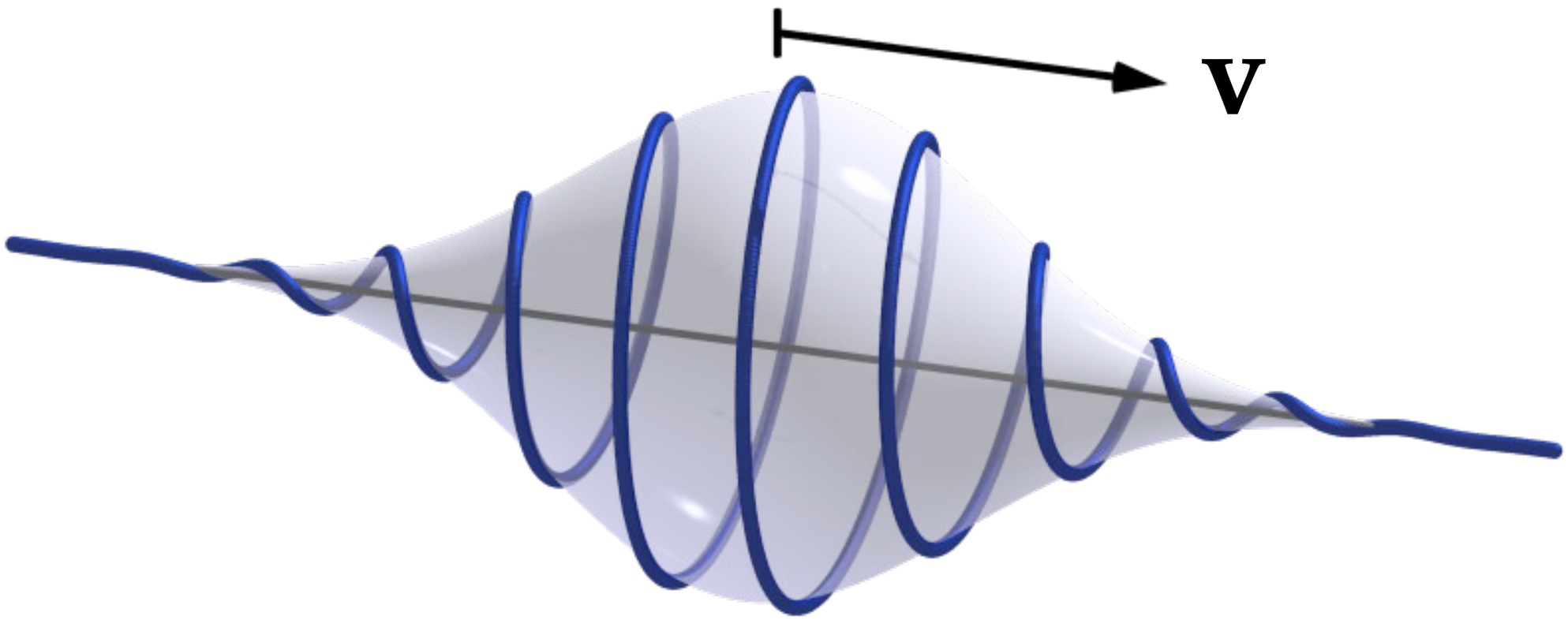


- 並進対称性に起因
- ブロッホ波も同様

$\mathbf{v} \overset{\text{def.}}{=} \dfrac{d\mathbf{r}}{dt}$ を使えない!!!

電子 の 群速度

速度を定義するため、あえて、並進対称性を崩す



波束

方針

波束で考える

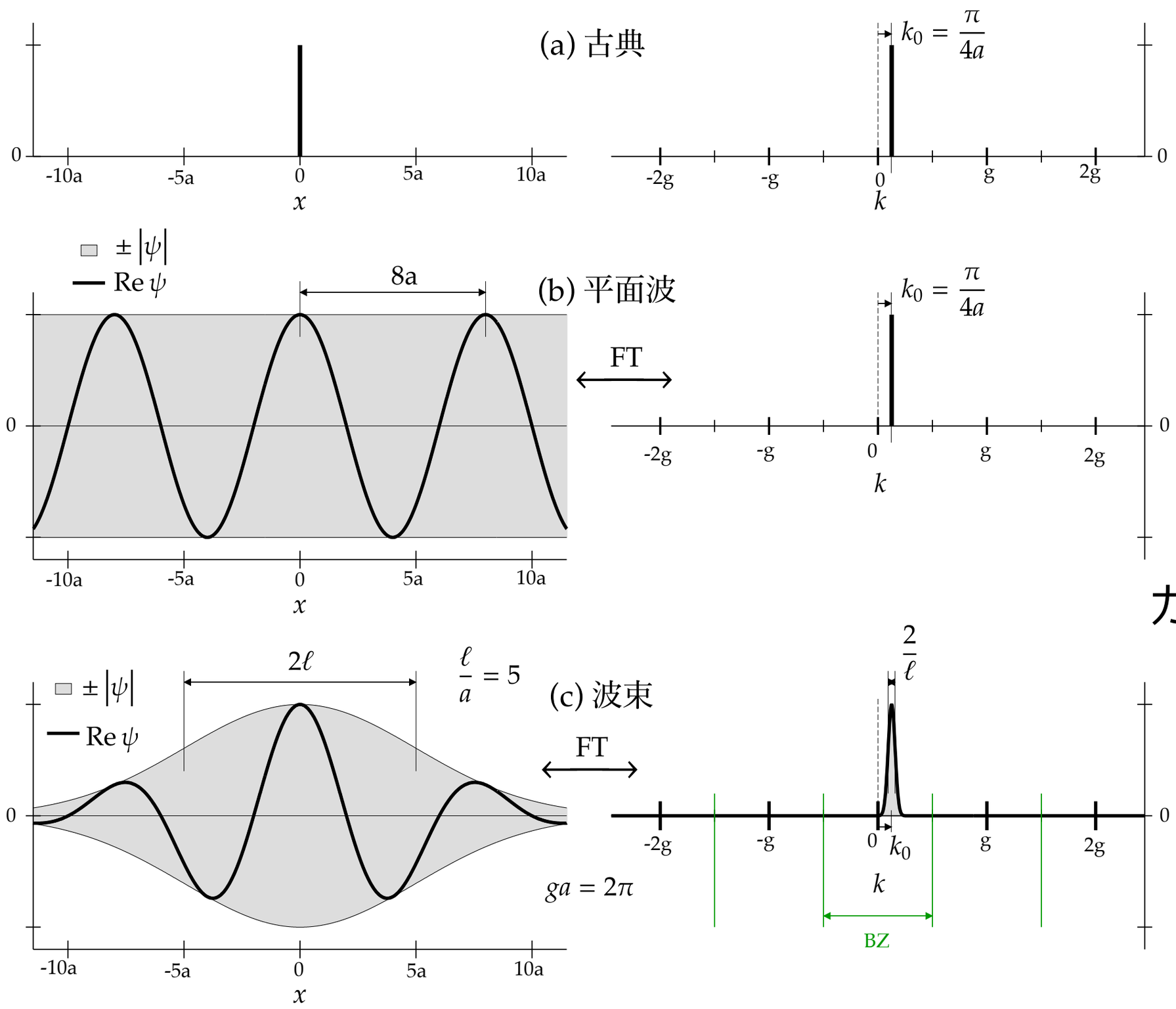
・群速度

・有効質量

波束 の 逆空間像

実空間

逆空間



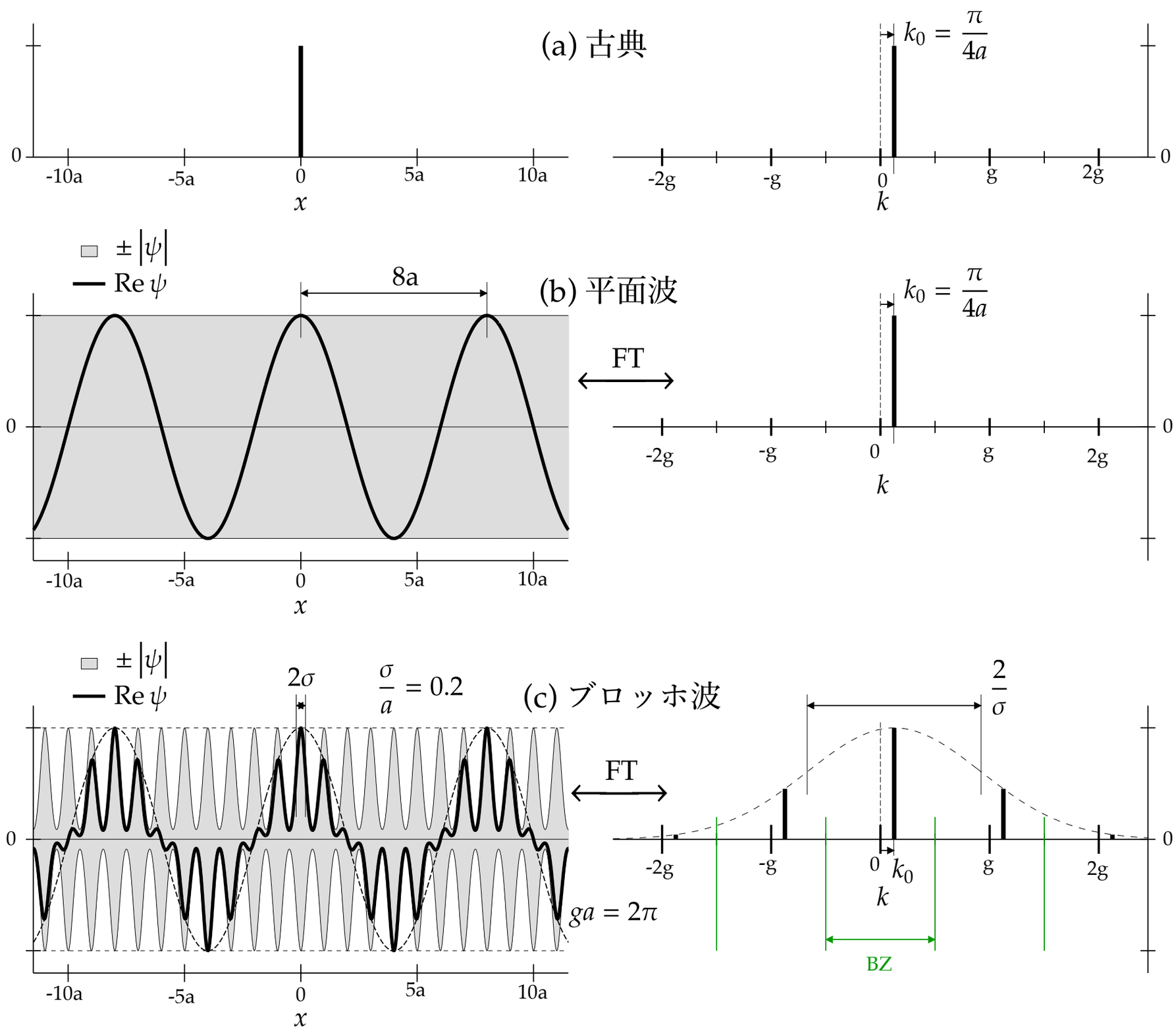
ガウシアン
と掛け算

ガウシアンを
畳み込み

ブロッホ波束 の 逆空間像

実空間

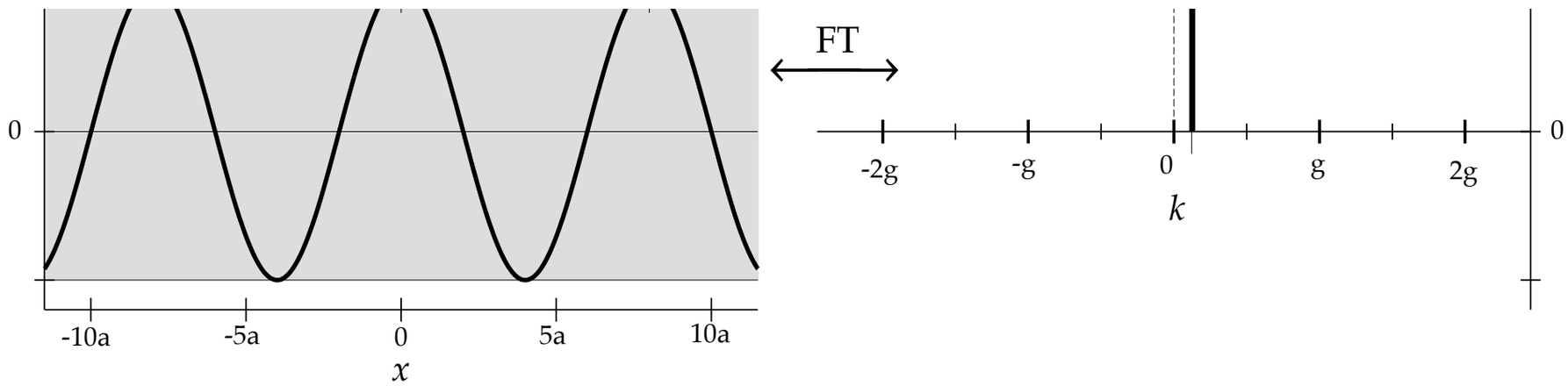
逆空間

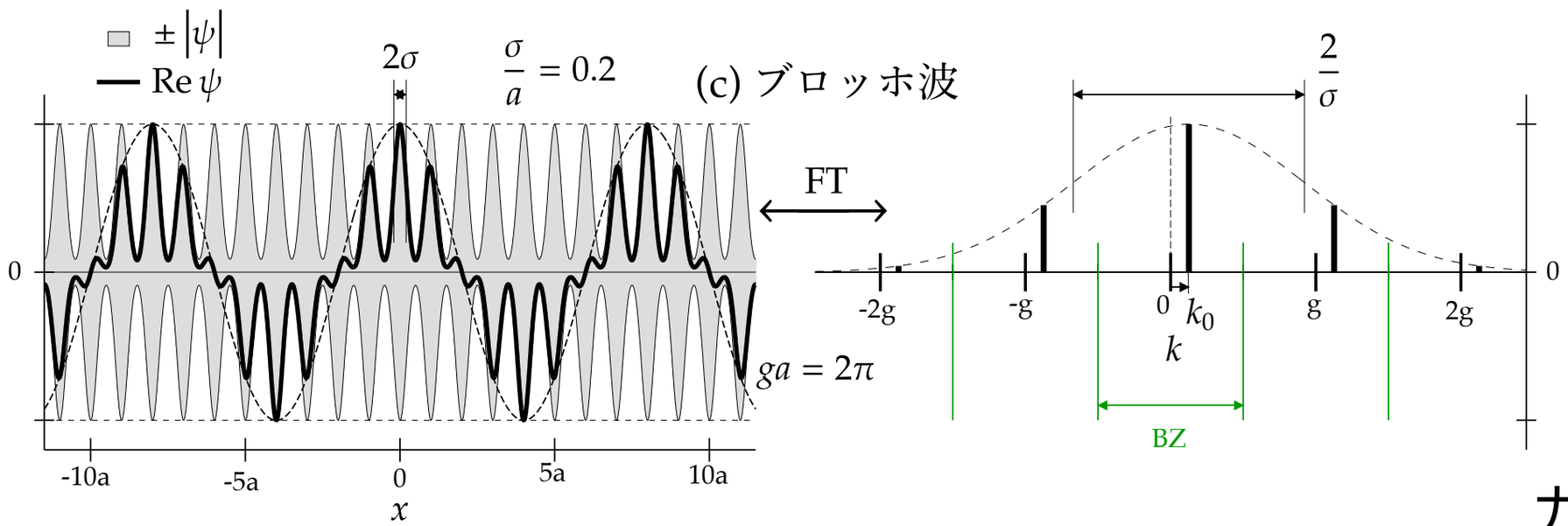


ブロッホ波束 の 逆空間像

実空間

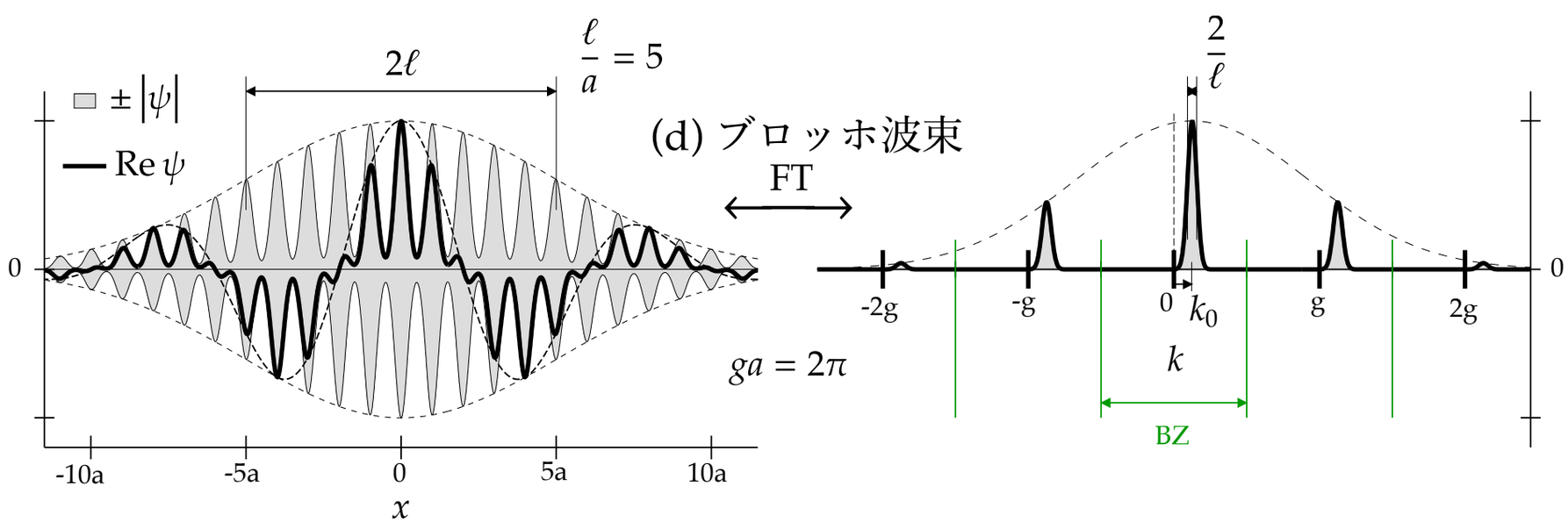
逆空間





ガウシアンと掛け算

ガウシアンを畳み込み



電子像 の 進化

$(\Delta x, \Delta p) = (0,0)$ 古典粒子

↓

$(\infty, 0)$ 平面波 → ブロッホ波

↓ ↓

$\left(\ell, \frac{\hbar}{2\ell}\right)$ 波束 → ブロッホ波束

真空中 結晶中

連続並進対称性 離散並進対称性

板書

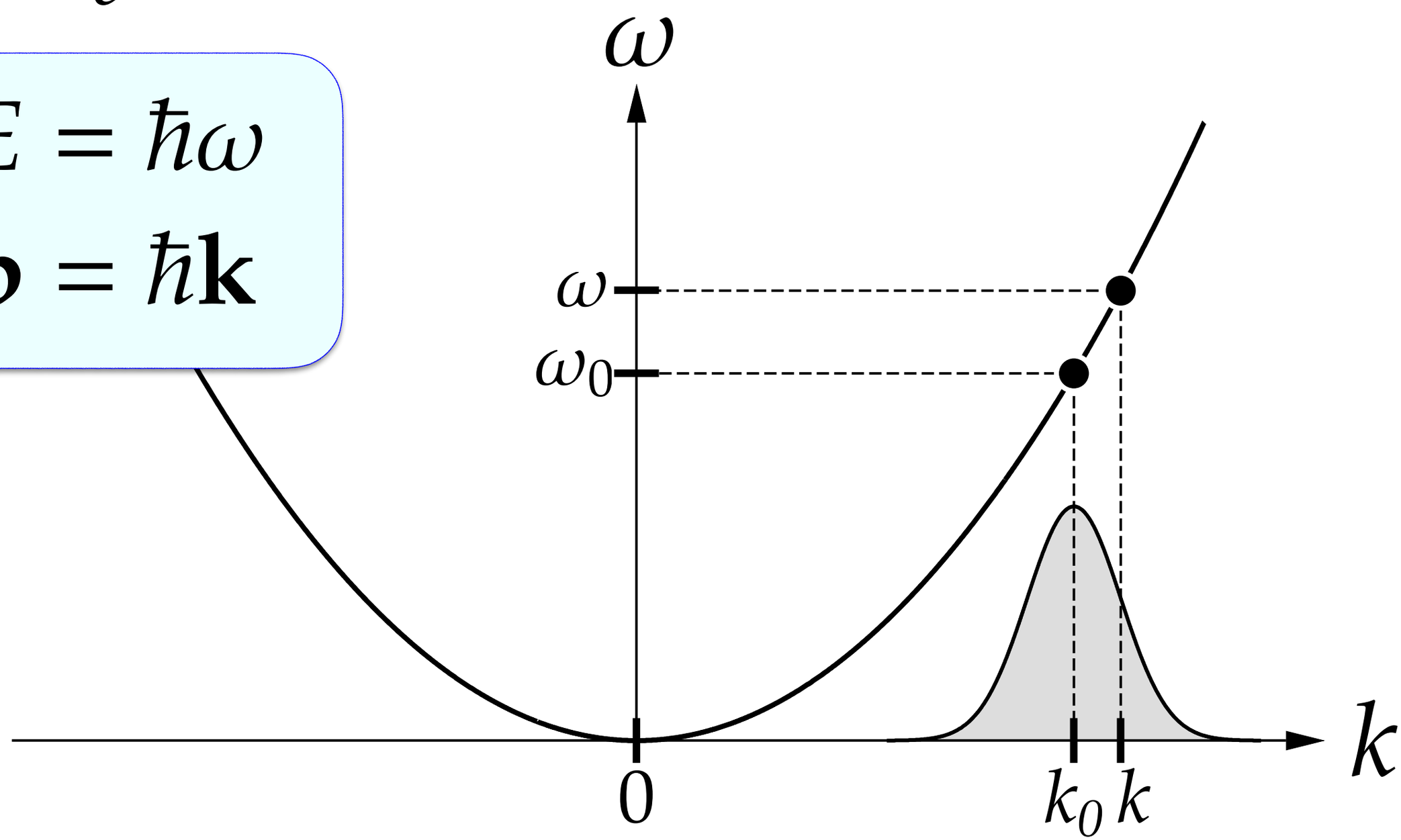
波束の群速度

波数分布 に 幅をつける

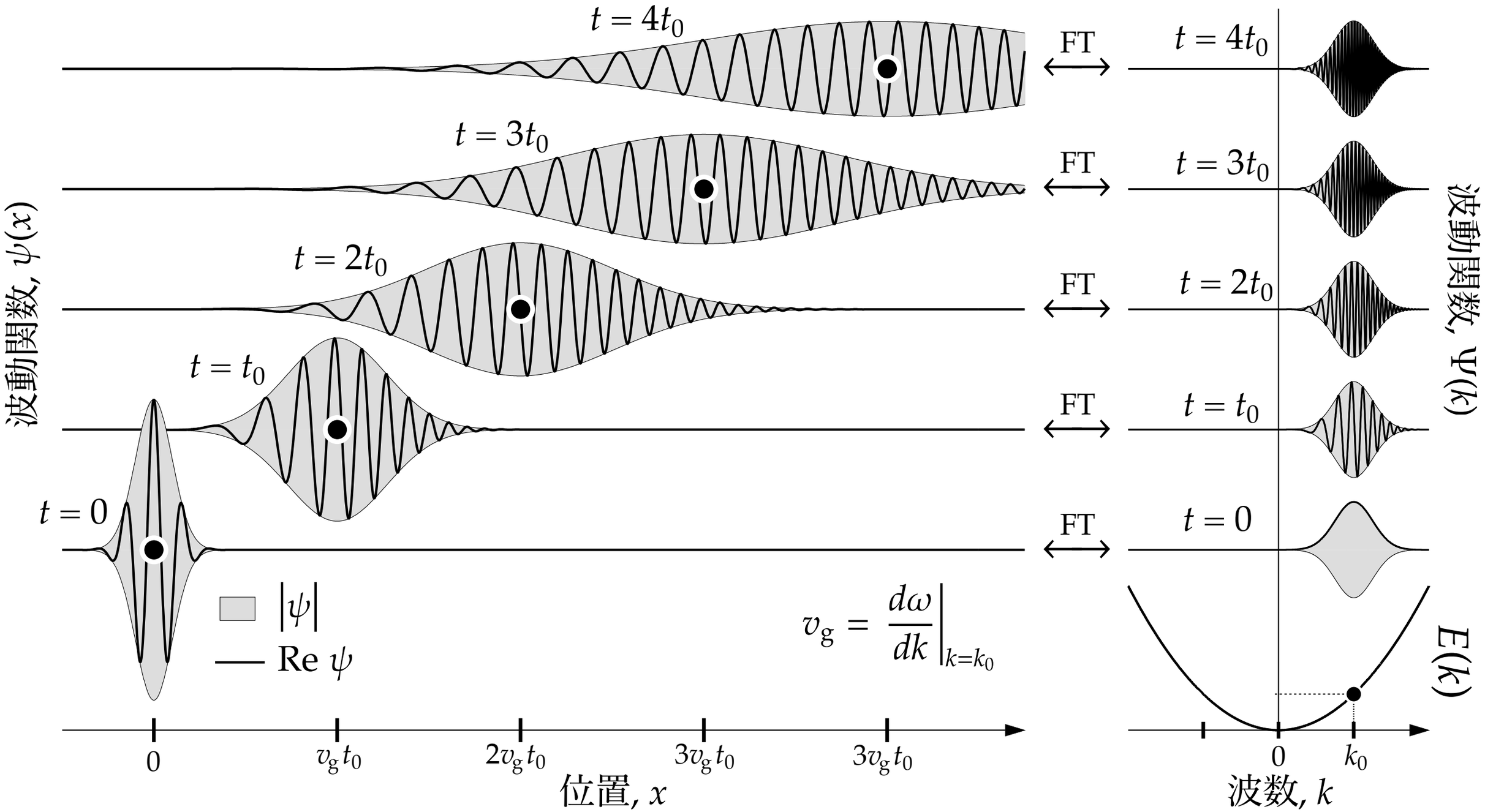
$$\psi = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\omega t}$$

$$E = \hbar\omega$$

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$$



波束 の 時間発展


$t = 4t_0$
$t = 3t_0$
$t = 2t_0$
$t = t_0$
$t = 0$
FT
波動関数, $\psi(x)$
$|\psi|$
Re ψ
$v_g = \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k=k_0}$
0
$v_g t_0$
$2v_g t_0$
$3v_g t_0$
$3v_g t_0$
位置, x
波動関数, $\Psi(k)$
$E(k)$
0
k_0
波数, k

群速度

group velocity

量子力学

ツボQ4

$$v_{\mathrm{g}} = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}$$

$$\mathbf{v}_{\mathrm{g}} = \frac{1}{\hbar}\nabla_{\mathbf{k}}E$$

- 固体物理では g を省略
- 波数空間における **勾配**
- 等エネルギー面に **垂直**

解析力学

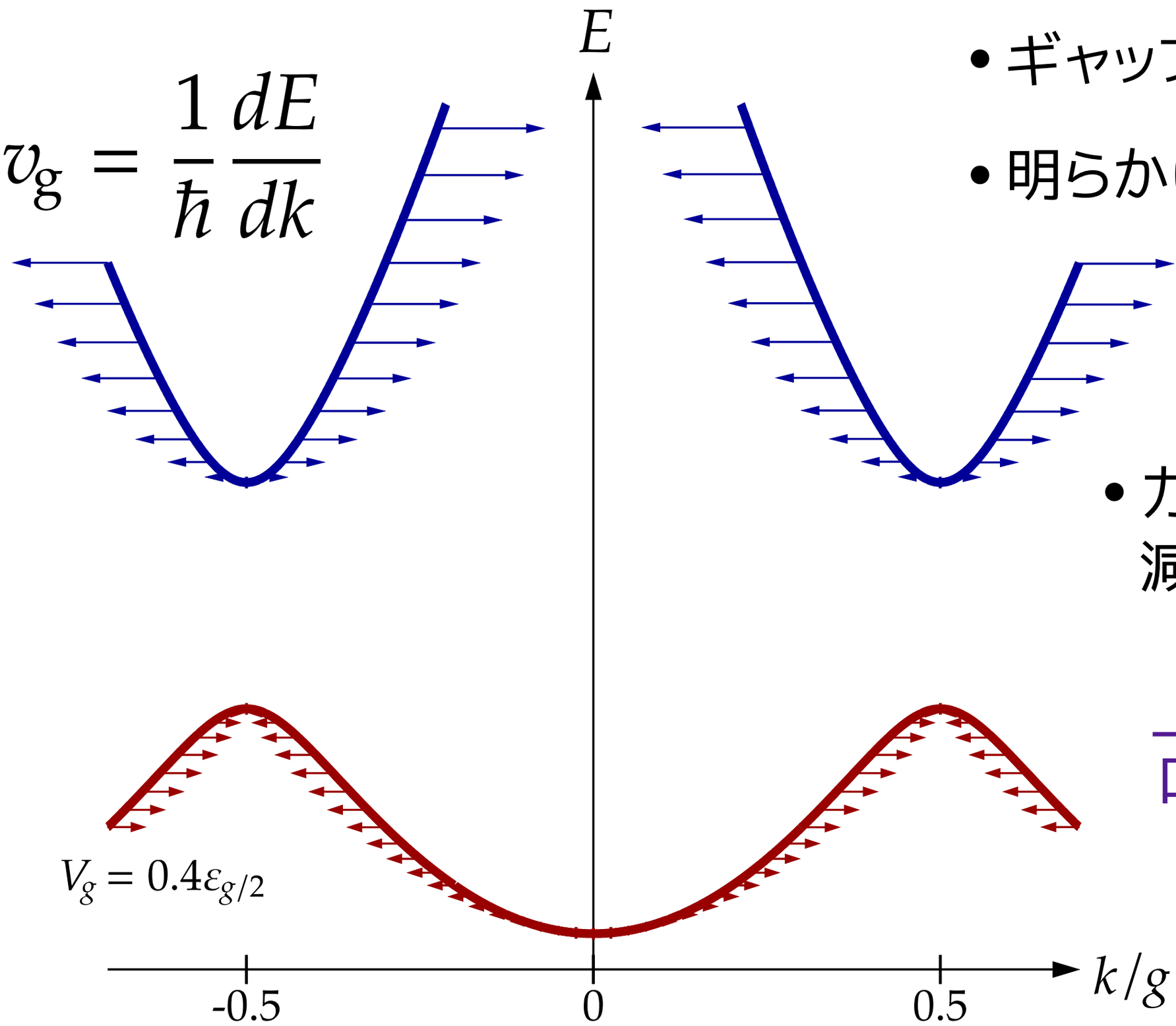
ツボQ3

$$\frac{dr_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}$$

- ハミルトン方程式の片割れ
  $i = x, y, z$

群速度の分布（一次元）

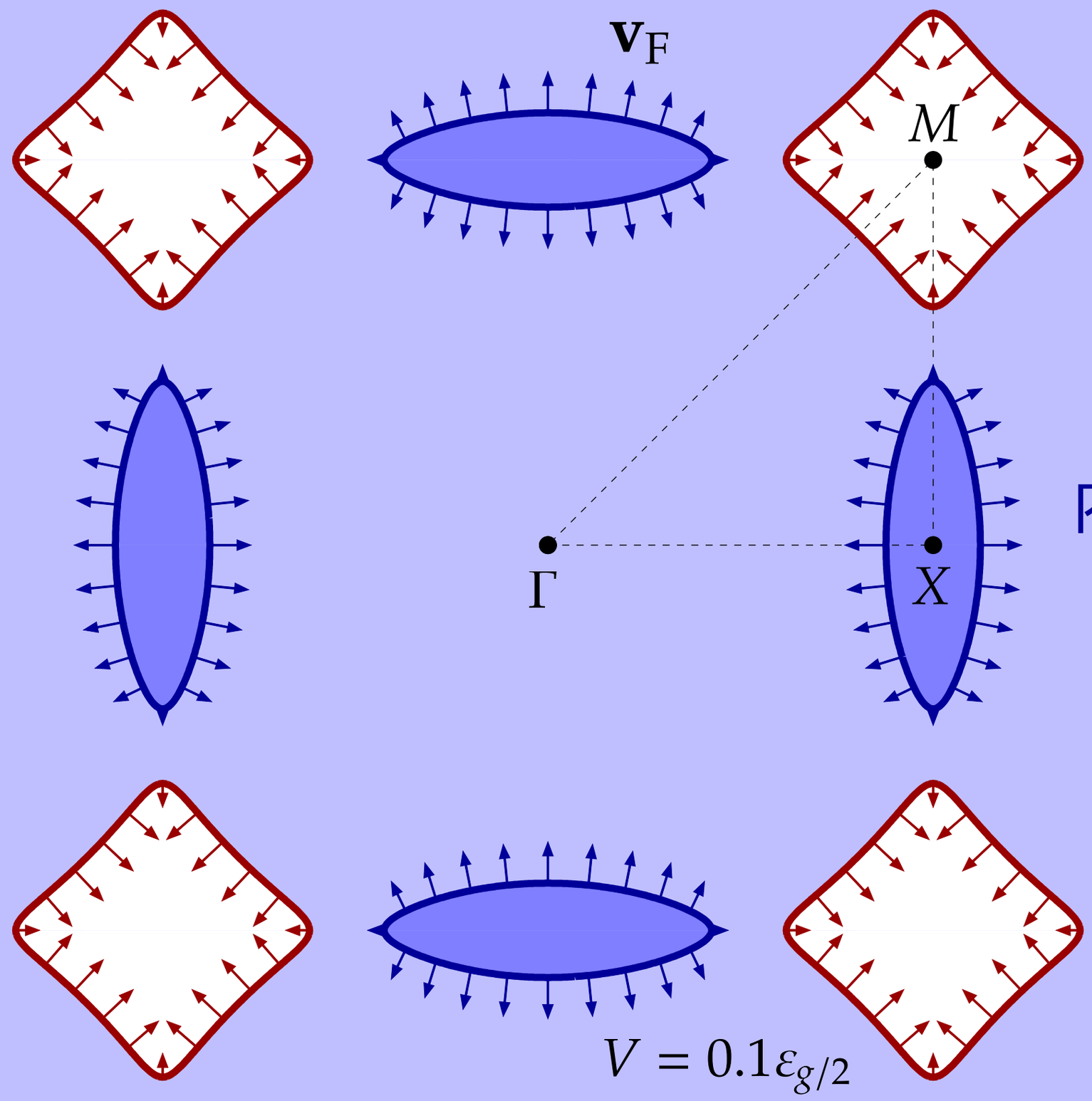
$$v_{\mathrm{g}} = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}$$



- ギャップ端で $v_{\mathrm{g}} = 0$
- 明らかに $p \neq m v_{\mathrm{g}}$
- 力を加えると減速することも

古典力学の破綻

フェルミ速度の分布



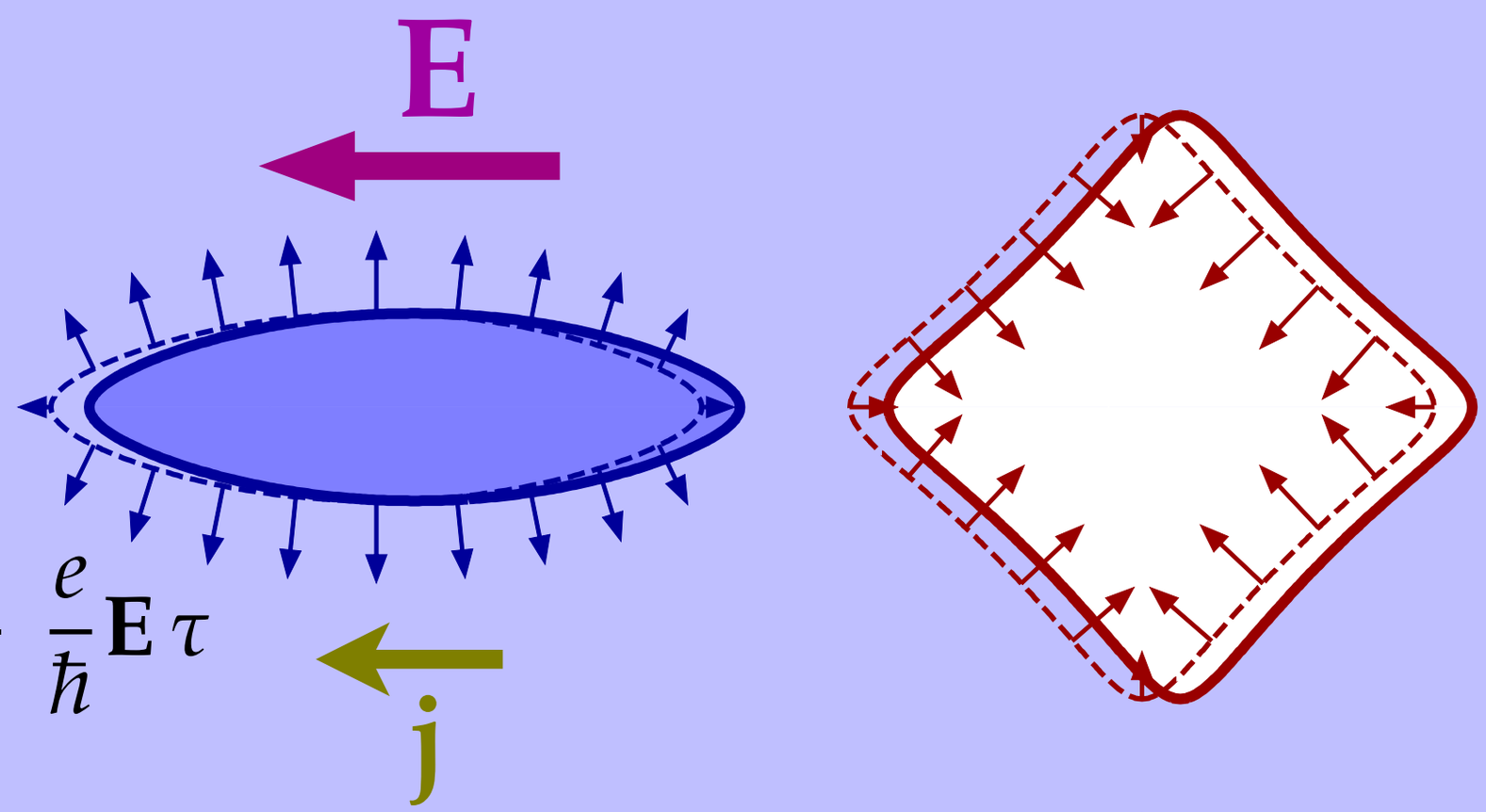
外側に
電子

内側に
電子

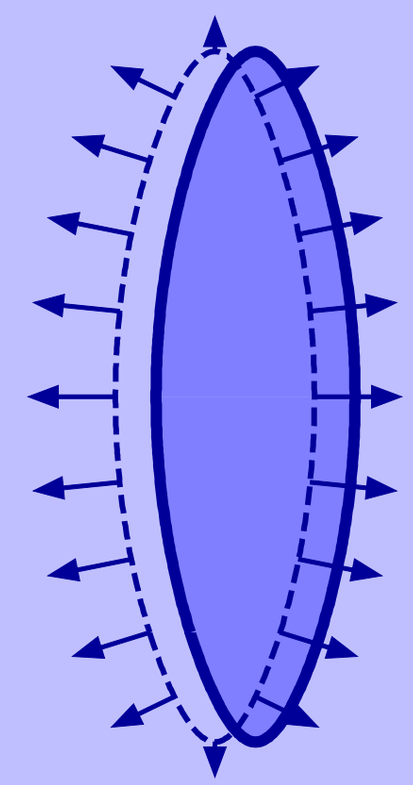
**すべて
フェルミ面
に垂直**

明らかに
$\mathbf{p} \neq m\mathbf{v}_{\mathrm{F}}$

電場による電子の運動

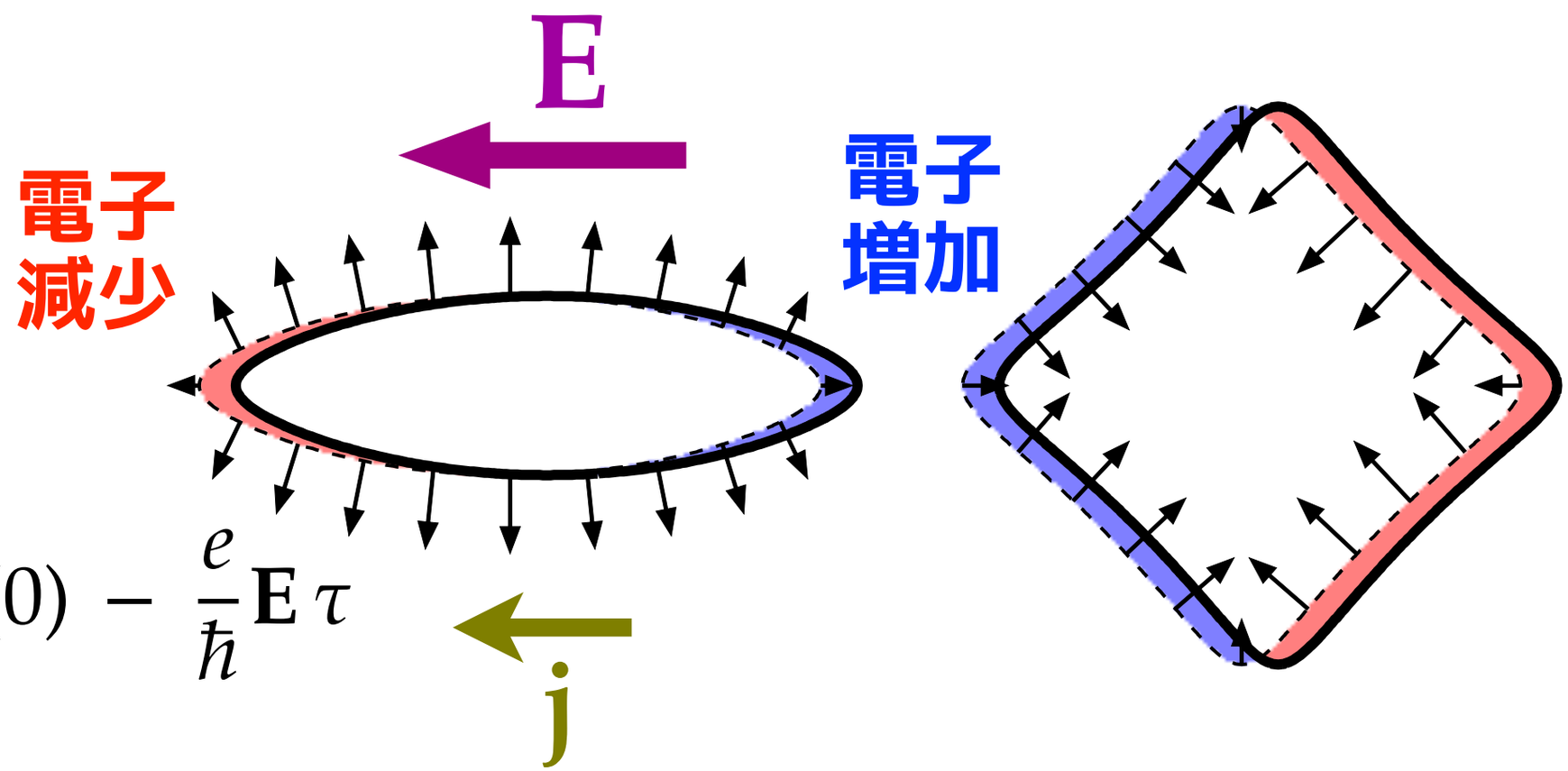


$$\mathbf{k}(\tau) = \mathbf{k}(0) - \frac{e}{\hbar}\mathbf{E}\,\tau$$

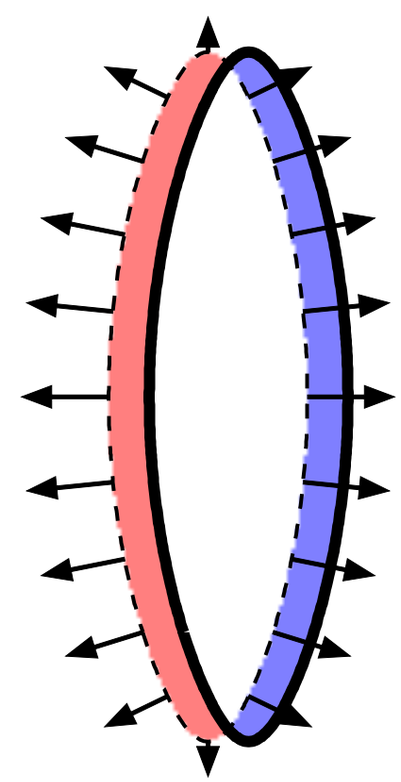


差分表示に移行する

電場による電子の運動



$$\mathbf{k}(\tau) = \mathbf{k}(0) - \frac{e}{\hbar}\mathbf{E}\,\tau$$



電気伝導度

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{4\pi^3\hbar}\int_{\mathrm{FS}} dS\; v_x\,\tau\cos\theta$$

ドルーデの式は間違いなのか？

$$\sigma = e^2 \frac{n\tau}{m}$$

板書

有効質量

ドルーデの式 ver 2.0

動的有効質量

dynamical effective mass

一次元

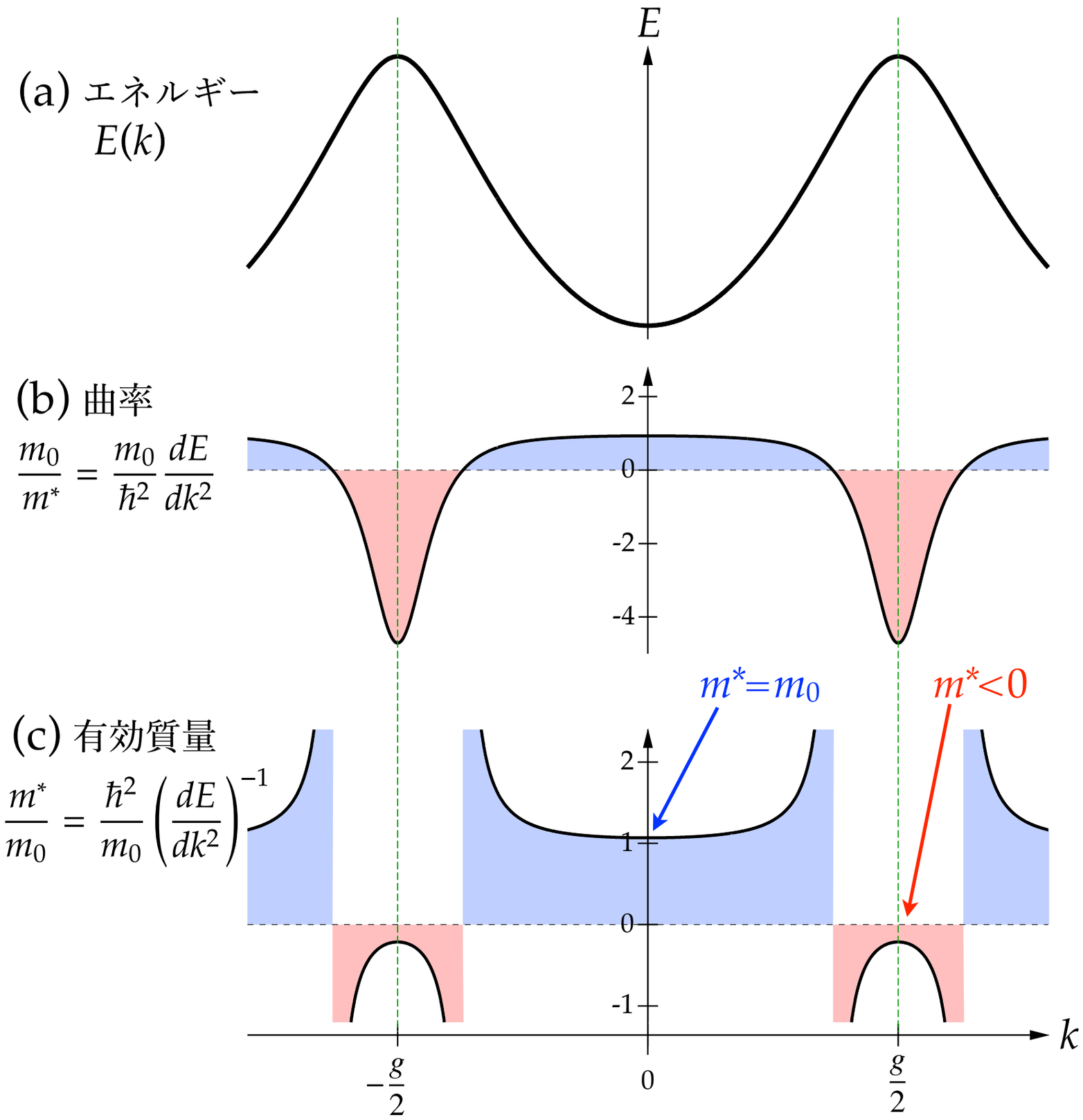
$$\frac{1}{m^*} = \frac{dv}{dp} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2}$$

三次元
$i, j = x, y, z$

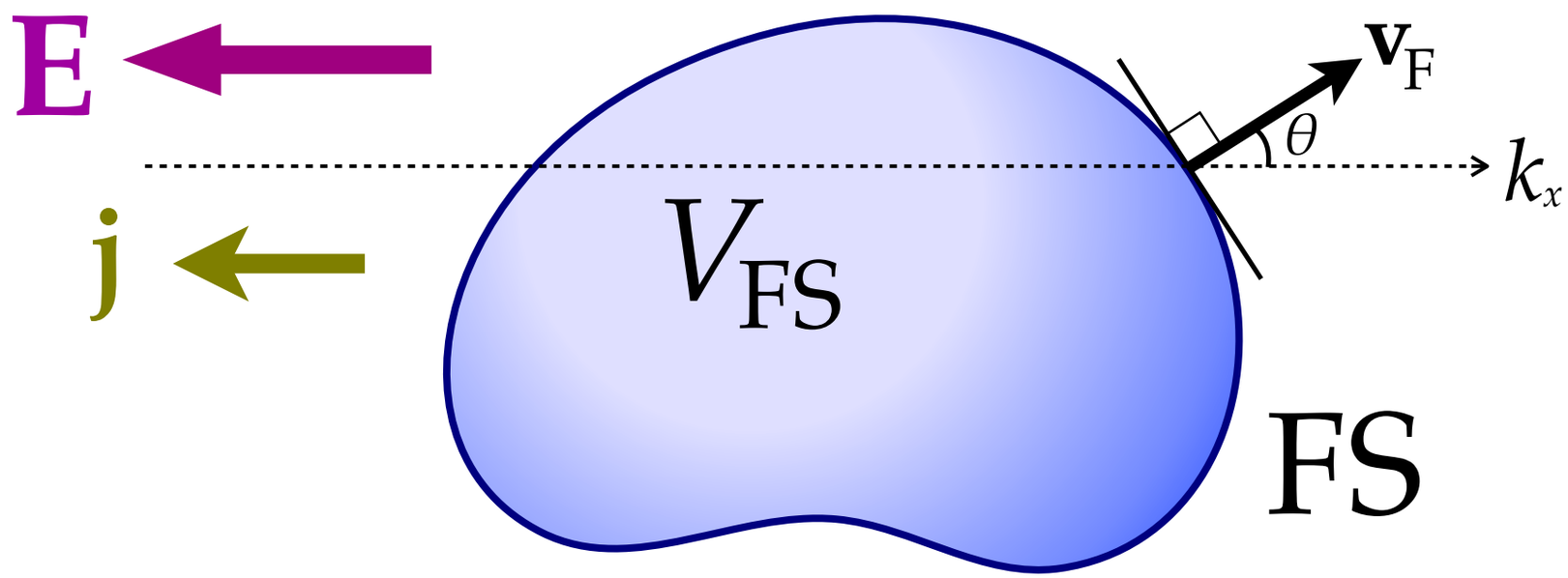
$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \frac{\partial v_i}{\partial p_j} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}$$

- 波数空間における **曲率** の逆数
- m^* は、波数やバンドに依存する

有効質量の分布（一次元）


(a) エネルギー
$E(k)$
E
(b) 曲率
$\frac{m_0}{m^*} = \frac{m_0}{\hbar^2}\frac{dE}{dk^2}$
2
0
-2
-4
(c) 有効質量
$\frac{m^*}{m_0} = \frac{\hbar^2}{m_0}\left(\frac{dE}{dk^2}\right)^{-1}$
$m^*=m_0$
$m^*<0$
2
1
0
-1
k
$-\frac{g}{2}$
0
$\frac{g}{2}$

表面積分 と 体積積分



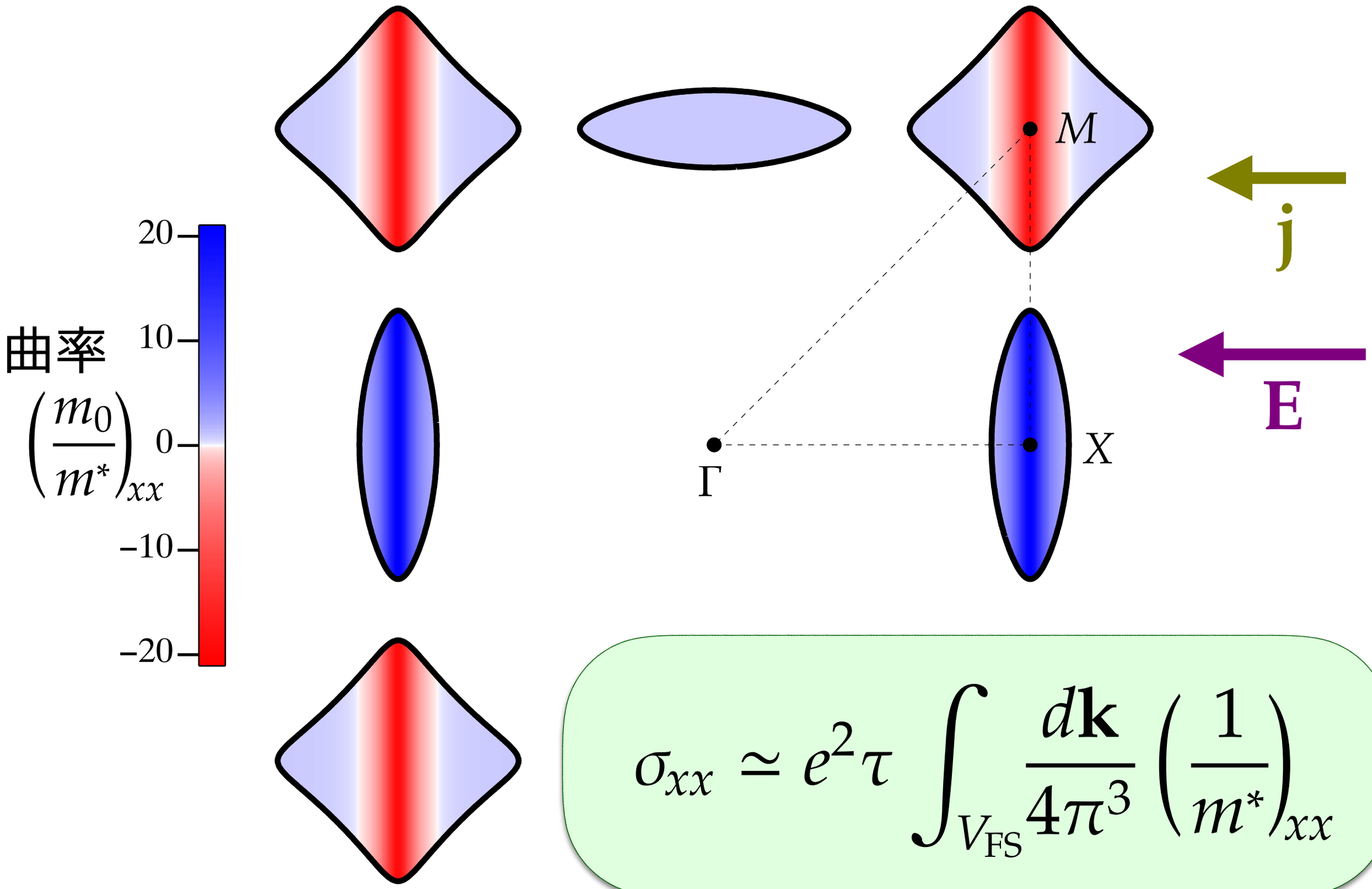
勾配 の
表面積分

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{4\pi^3\hbar}\int_{\mathrm{FS}} dS\, v_x\, \tau \cos\theta$$

曲率 の
体積積分

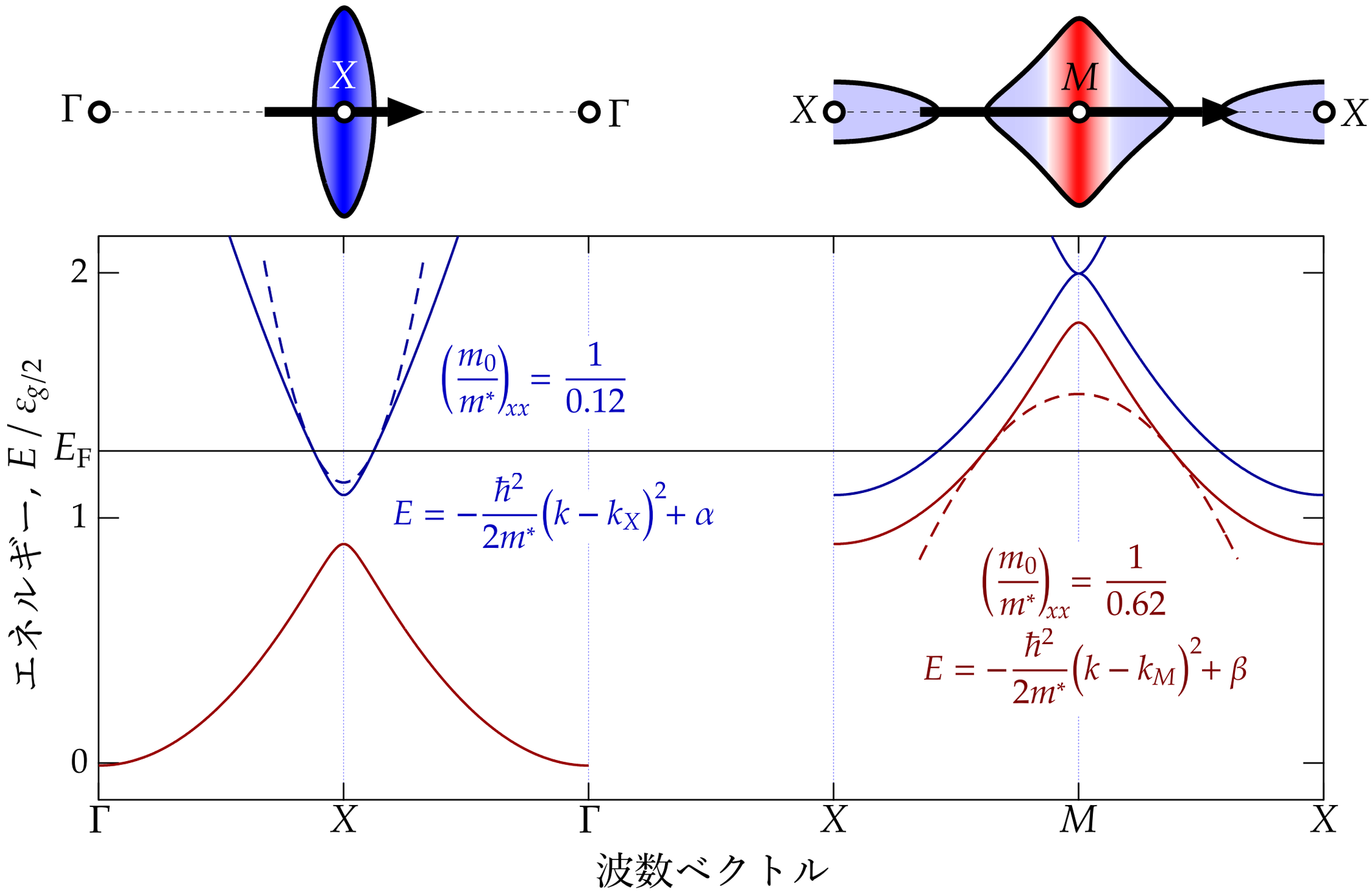
$$\sigma_{xx} \simeq e^2\tau \int_{V_{\mathrm{FS}}} \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3}\left(\frac{1}{m^*}\right)_{xx} \simeq e^2\frac{n\tau}{m^*}$$

逆有効質量 の 体積積分



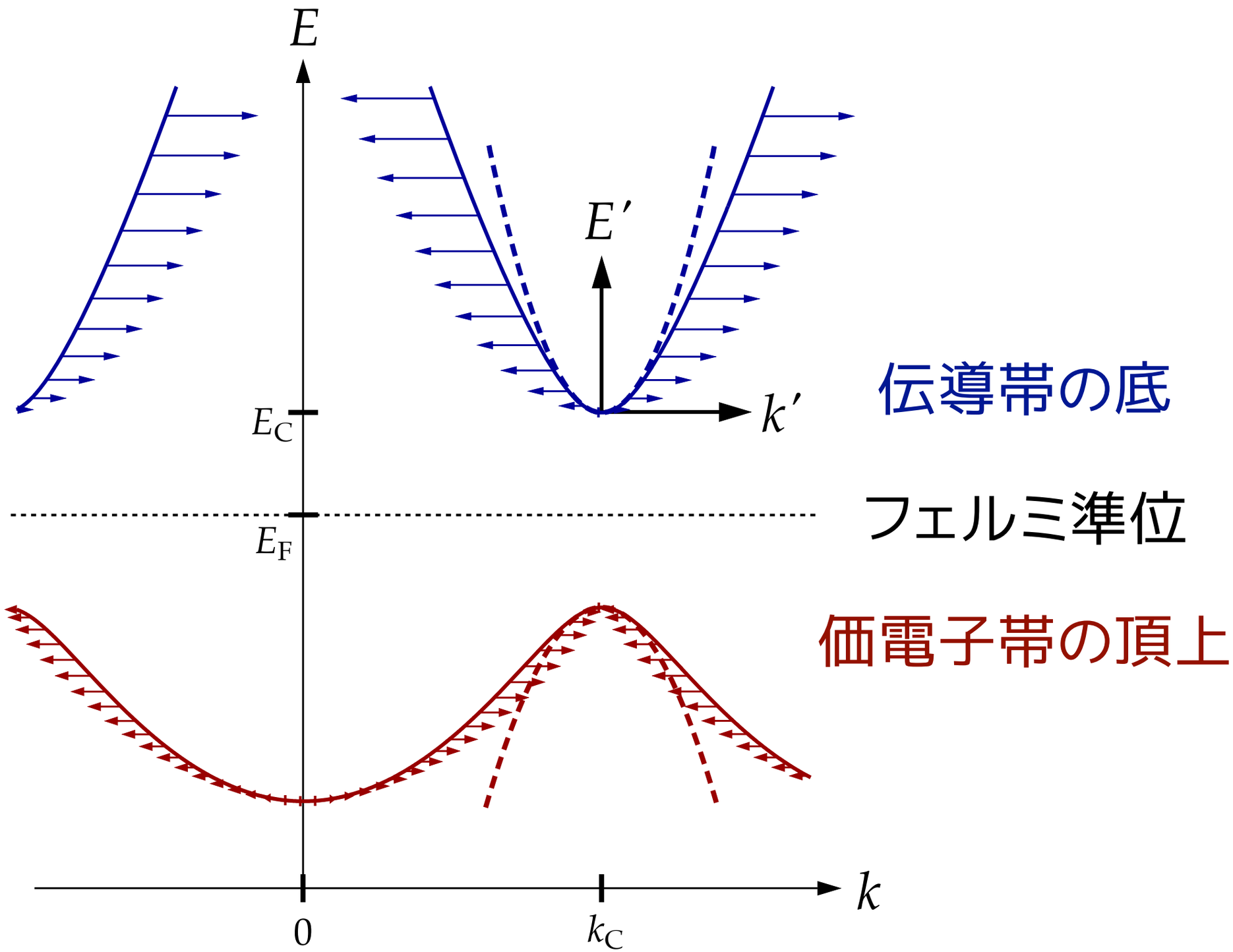
$$\sigma_{xx} \simeq e^2\tau \int_{V_{\mathrm{FS}}} \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \left(\frac{1}{m^*}\right)_{xx}$$

金属における有効質量

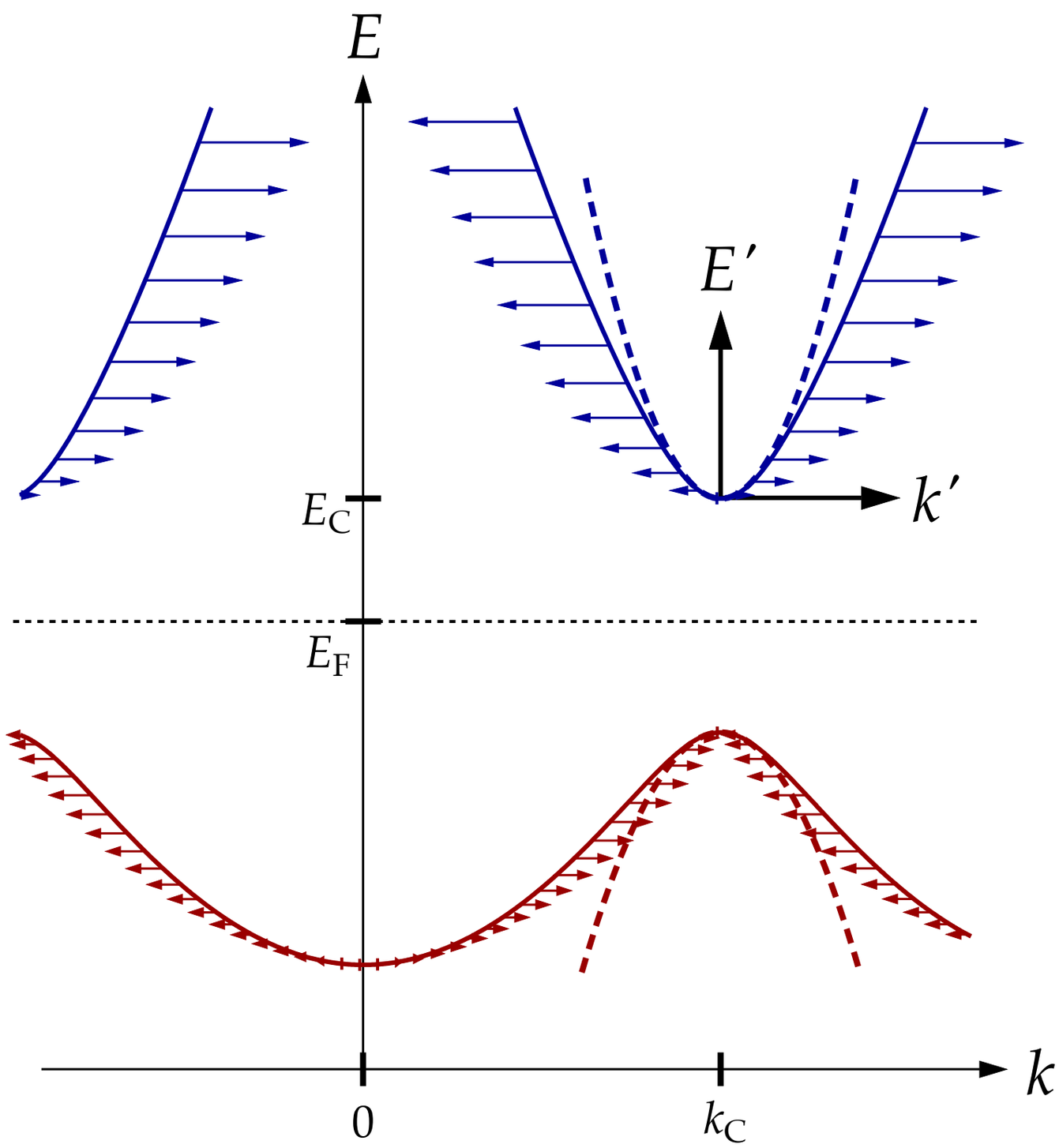


フェルミ速度 を再現するように、放物線を描く

絶縁体における有効質量



古典への回帰



- 運動量は相対的で増減だけが重要
- $v_g = 0$ を波数の原点とするのが合理的

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

$$v = \frac{1}{m^*}\hbar k'$$

$$p' = m^* v$$

質量 m^* の古典粒子!!

ドルーデの式 ver 2.0

- **緩和時間** τ を、フェルミ面の**表面**で平均化
- **曲率** $1/m^*$ を、フェルミ面の**内部**で平均化

$$\sigma = e^2 \left(n \frac{\tau_{\mathrm{e}}}{m_{\mathrm{e}}^*} + p \frac{\tau_{\mathrm{h}}}{m_{\mathrm{h}}^*} \right)$$

電子　　ホール

まとめ

~~ 波束の運動 ~~

群速度 $$v_{\mathrm{g}} = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}$$ 勾配

有効質量 $$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2}$$ 曲率の逆数

電気伝導度 $$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{4\pi^3\hbar}\int_{\mathrm{FS}} dS\, v_x\, \tau \cos\theta$$ 群速度の表面積分

ドルーデの式 ver 2.0 $$\sigma \simeq e^2\left(n\frac{\tau_{\mathrm{e}}}{m_{\mathrm{e}}^*} + p\frac{\tau_{\mathrm{h}}}{m_{\mathrm{h}}^*}\right)$$ 電子とホールの有効質量

次回

磁場とフェルミ面の意外な関係

第10講　磁場中の固体電子

次回

手がかりは群速度

第10講　磁場中の固体電子