

固体物理学 I 講義ノート

井野明洋
ino@hiroshima-u.ac.jp

広島大学

2017 年 12 月 9 日

第9章

波束としての電子

—— あるときは波、またあるときは粒。

9.1 導入

■ 運動量とは、何なのか？

- 古典力学では、具体的な $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ ではなく、力積による抽象的な式 $\Delta\mathbf{p} = \int \mathbf{F}(t)dt$ によって定義される。
- 例えば、光子は質量がゼロだが、運動量 $p = \frac{\hbar}{\lambda} = \hbar k$ をもつ。

■ 量子論

ド・ブロイの物質波が、量子論の主発点になる。

—— 量子論における エネルギー E と 運動量 $\mathbf{p}$ ——

$$E = \hbar\omega \quad (9.1)$$

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \quad (9.2)$$

ただし、 $\mathbf{k}$ と ω は、波動関数 $\psi(\mathbf{r}, t) = e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}$ の **位相** の座標微分 $\mathbf{k}$ と時間微分 ω を表す。換算プランク定数 $\hbar = 1.0546 \times 10^{-34}$ Js は、質量・電荷・スピン・座標などに依存せず、一粒子の状態から、多粒子複合体の状態、はては宇宙の状態に至るまで、同じ値とさ

れている。比例係数が絶対不変ならば、もはや、**両者は完全に同じ物理量**であり、違うのは単位だけである。巨視的には、運動量 $\mathbf{p}$ は力積として、エネルギー E は仕事として導入されるが、ここで、波動関数の位相の微分という **微視的な意味** が、(9.1)–(9.2) 式によって与えられる。古典力学に登場する保存量 $(\mathbf{p}, E)$ の正体は、**逆空間の座標軸** $(\mathbf{k}, \omega)$ であった。

$$\text{実空間座標} \left\{ \begin{array}{ccc} \mathbf{r} & \xleftrightarrow{\text{FT}} & \mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar \\ t & \xleftrightarrow{\text{FT}} & \omega = E/\hbar \end{array} \right\} \text{逆空間座標}$$

■ 課題

固体電子の運動量・速度・質量の関係を再構築

■ 方針

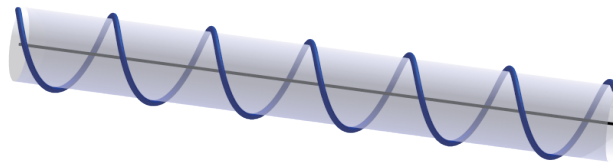
波束で考える。 群速度。有効質量。半古典運動方程式。

9.2 波束の群速度

電子の不確定性

電子の速度 $\mathbf{v}$ を決めるには、電子の位置 $\mathbf{r}$ を知る必要があるだろう。しかし、図 9.1(a) に示すように、平面波やブロッホ波の存在確率 $|\psi(\mathbf{r})|^2$ は、無限に広い空間に分布しており、その位置 $\mathbf{r}$ を特定できない。つまり、粒子の位置という概念と、完全なる並進対称性は、両立しない。

(a) 平面波



(b) 波束

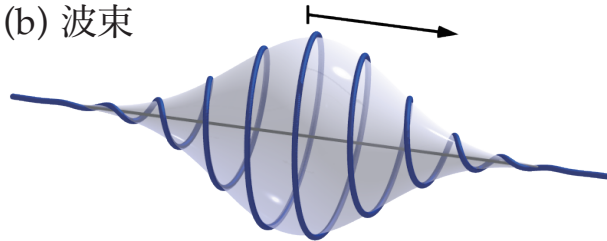


図 9.1 波動関数。(a) 平面波。(b) 波束。

■ 波束

そこで、ひとまず 並進対称性を破り、波動関数の広がりを制限しよう。図 9.1(b) のように、包絡線が有限の幅をもつ波を、**波束 (wave packet)** と呼ぶ。確率分布の平均から、波束の **位置** と **速度** を定義できる。次に、波束の逆空間像を求めよう。簡単な例として、図 9.2 左側のように、実空間で波数 k_0 の平面波にガウシアンをかけあわせれば、波束が得られる。一方、逆空間ではガウシアンとの畳み込み積分になるので、図 9.2 右側のように、 $k = k_0$ のデルタ関数に **有限の幅をつける** ことになる。波束の実空間幅を 2ℓ とおいて、数式で表現すると、次のようになる。

$$\text{平面波} \quad \exp(ik_0x) \xleftrightarrow{\text{FT}} 2\pi \delta(k-k_0)$$

$$\begin{aligned}
 \text{ガウシアン} \quad & \frac{1}{\sqrt{\ell}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\ell^2}\right) \xleftrightarrow{\text{FT}} \sqrt{2\pi\ell} \exp\left(-\frac{\ell^2 k^2}{2}\right) \\
 \text{波束} \quad & \frac{1}{\sqrt{\ell}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\ell^2}\right) \exp(ik_0 x) \xleftrightarrow{\text{FT}} \sqrt{2\pi\ell} \exp\left[-\frac{\ell^2(k-k_0)^2}{2}\right] \quad (9.3)
 \end{aligned}$$

周期場中の固有状態はブロッホ波なので、固体物理における波束は、図 9.3 のような **ブロッホ波束** になる。逆空間では、 $k = k_0 + ng$ のデルタ関数を、有限の幅で一様に広げたものになる。最終的に $\ell \rightarrow \infty$ とすれば、平面波やブロッホ波に帰着する。しかし、固体中では、図 4.13 のように電子の平均自由行程 ℓ が有限なため、純粋なブロッホ波より、波束のほうがむしろ現実的だ。

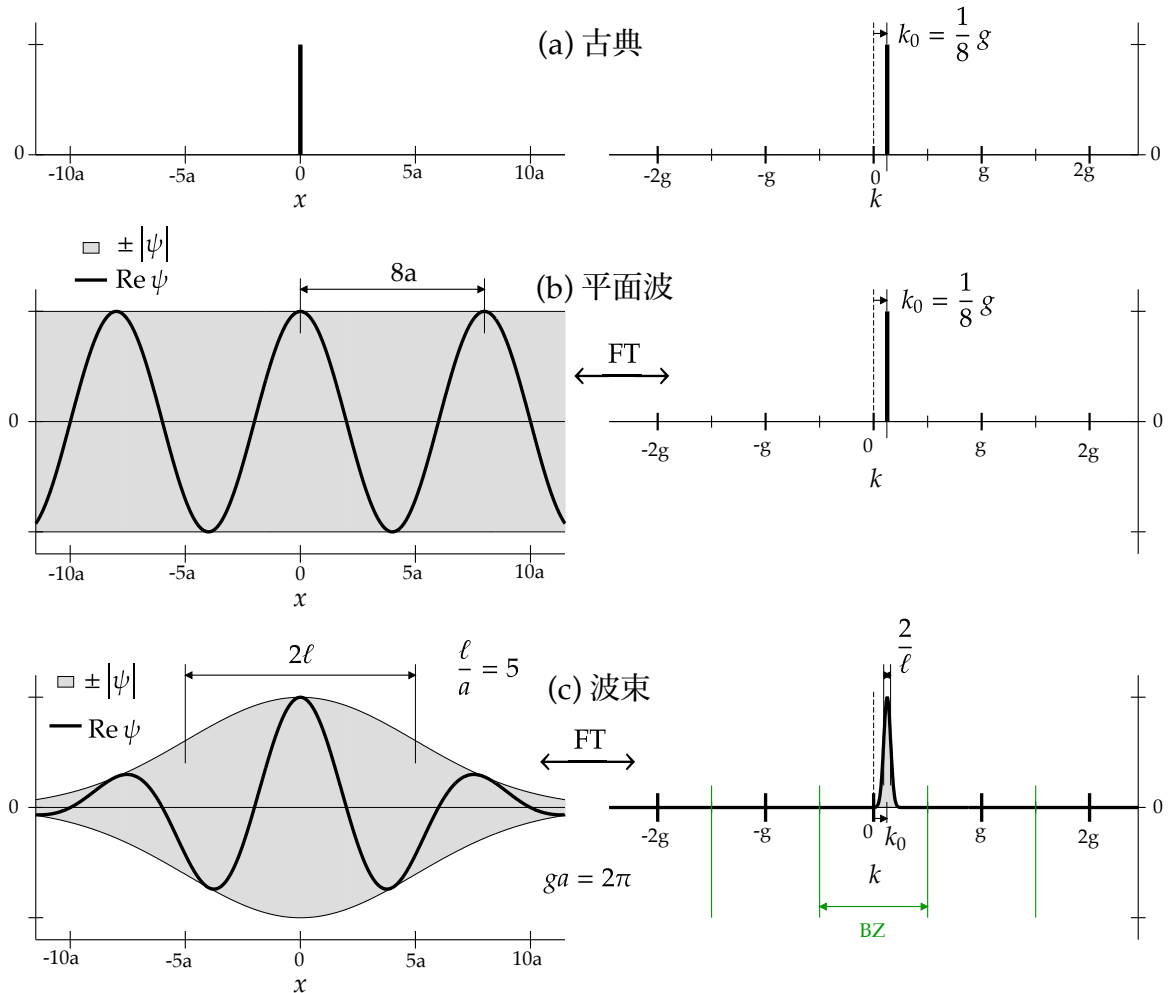


図 9.2 (a) 古典描像。 (b) 平面波。 (c) 波束。

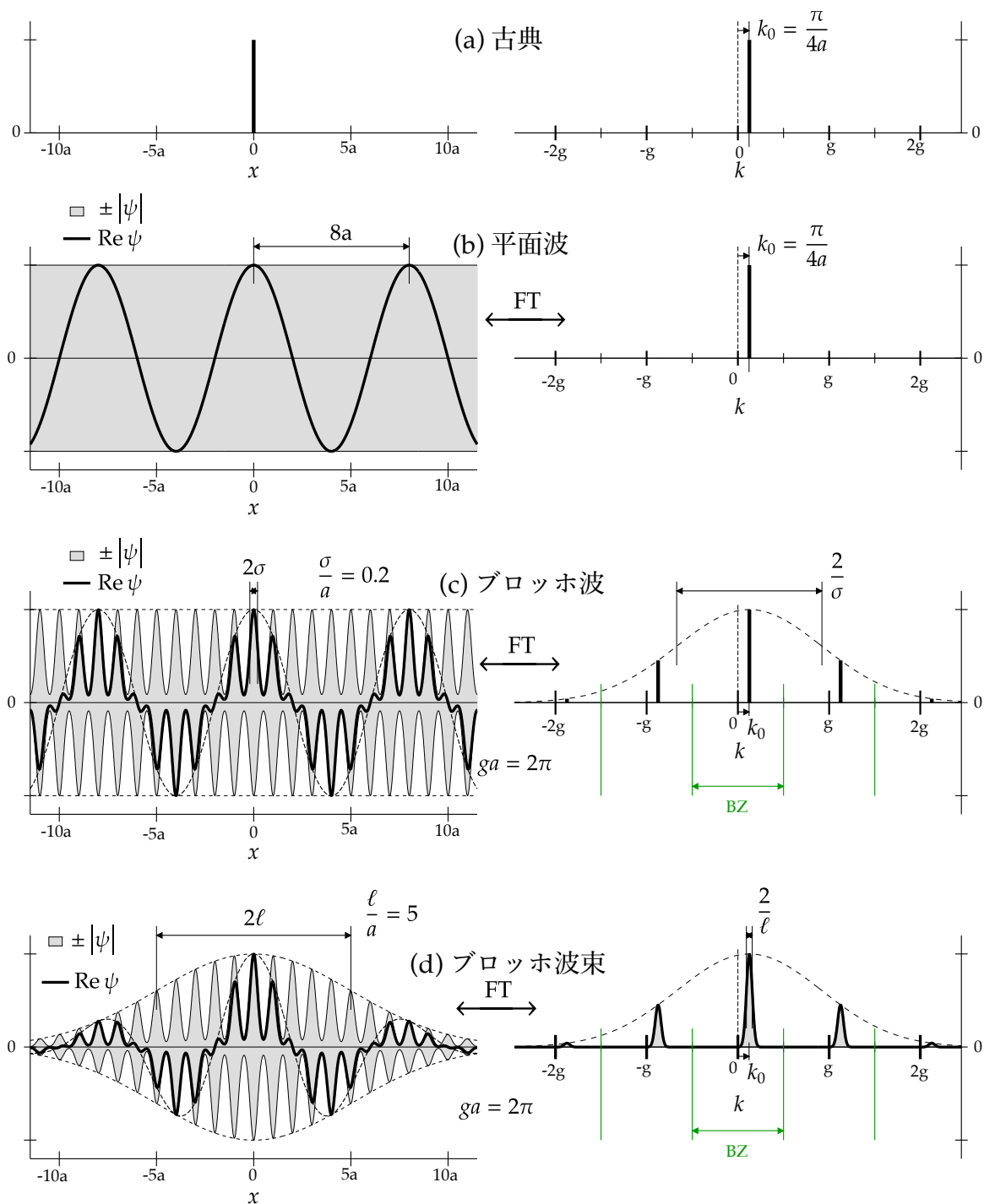


図 9.3 (a) 古典。 (b) 平面波。 (c) ブロツホ波。 (d) ブロツホ波束。

表 9.1 ブロッホ波束の実空間と逆空間。

実空間		逆空間
結晶波数 e^{ik_0x}	$\longleftrightarrow$	波数シフト $0 \rightarrow k_0$
格子周期 $a = 2\pi/g$	$\longleftrightarrow$	逆格子周期 $g = 2\pi/a$
na のピーク幅 2σ	$\longleftrightarrow$	包絡線の波数幅 $2/\sigma$
包絡線の幅 2ℓ	$\longleftrightarrow$	$k_0 + ng$ の波数幅 $2/\ell$

■ 群速度

(9.3) 式のフーリエ逆変換で、波束の波動関数を表すと、

$$\psi(x) = \sqrt{2\pi\ell} \int \frac{dk}{2\pi} \exp\left[-\frac{\ell^2(k-k_0)^2}{2}\right] \exp(ikx) \quad (9.4)$$

となる。従って、幅 2ℓ の波束には、波数が

$$k_0 - \frac{1}{\ell} \lesssim k \lesssim k_0 + \frac{1}{\ell}$$

の範囲の平面波の **重ね合わせ** になる。

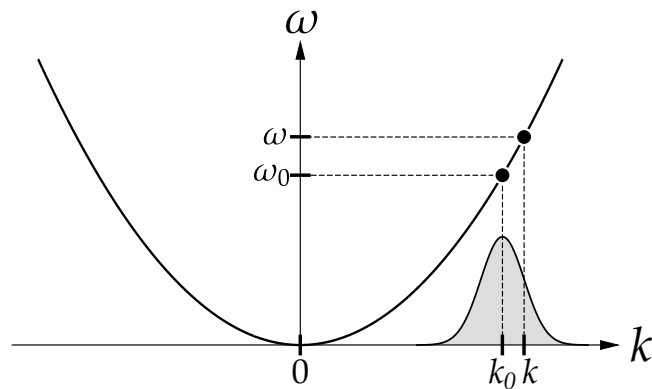


図 9.4 波数分布に幅をつける。

分散関係を $\omega(k)$ とおくと、図 9.4 に示す e^{ik_0x} 成分と e^{ikx} 成分の時間発展の周波数は、

$$\omega_0 = \omega(k_0)$$

$$\omega = \omega(k)$$

で与えられ、波動関数の時間発展は、

$$\phi_0(x, t) = e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}$$

$$\phi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)}$$

となる。二つの波の位相が一致して、**互いに強め合う条件** は、

$$k_0 x - \omega_0 t = k x - \omega t$$

であり、変形すると、

$$x = \frac{\omega - \omega_0}{k - k_0} t$$

となる。 $t = 0$ のときは、座標原点 $x = 0$ で位相がそろうので、 $x = 0$ で最大振幅となる。

そして、時間 t とともに、位相がそろう座標 x が、等速で移動する。(9.4) 式右辺の波数積分の重みは、 $k = k_0$ の近傍に分布しているので、波束の中心の位置は、

$$x = \left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k=k_0} t$$

に従って運動する。実際に、分散関係を $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ とおいて、(9.4) 式の時間発展

$$\psi(x, t) = \sqrt{2\pi\ell} \int \frac{dk}{2\pi} \exp\left[-\frac{\ell^2(k-k_0)^2}{2} + i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)\right]$$

を計算した結果を、図 9.5 に示す。時間に比例して、波束の中心点が移動することがわかる^{*1}。このようにして波束の中心が動く速度を、**群速度 (group velocity)** と呼ぶ。

$$\text{群速度 (一次元)} \quad v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \quad (9.5)$$

群速度は、エネルギーの波数微分で与えられ、位相速度 (phase velocity) $v_p = \frac{\omega}{k}$ とは

^{*1} 電子のように分散関係 $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ が曲率をもつとき、(9.4) 式の波束には、わずかに低速の波数成分 $k_0 - \ell$ と、わずかに高速の波数成分 $k_0 + \ell$ が含まれており、時間とともにこれらの波数成分が徐々にばらけて、波束の幅が広がることになる。光子や音響フォノンのように分散関係 $\omega \propto |k|$ が直線であれば、波形が変化せずに伝わることになる。

異なる概念なので、注意せよ。三次元における群速度ベクトル $\mathbf{v}_g$ は、波数空間におけるエネルギー勾配になり、常に、等エネルギー面に垂直となる。

$$\text{群速度ベクトル} \quad \mathbf{v}_g = \nabla_{\mathbf{k}} \omega = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E \quad (9.6)$$

(9.6) 式を成分表示すると、

$$\frac{dr_i}{dt} = v_i = \frac{\partial E}{\partial p_i} \quad (i = x, y, z)$$

と表すことができる。つまり、群速度の公式は、古典的な解析力学におけるハミルトン方程式の片割れと **完全に一致** する。固体物理では、位相速度を使うことはないので、 $\mathbf{v}_g$ の添え字が無くても混乱しない。今後の「速度 $\mathbf{v}$ 」は、**すべて群速度を表す** ものとする。

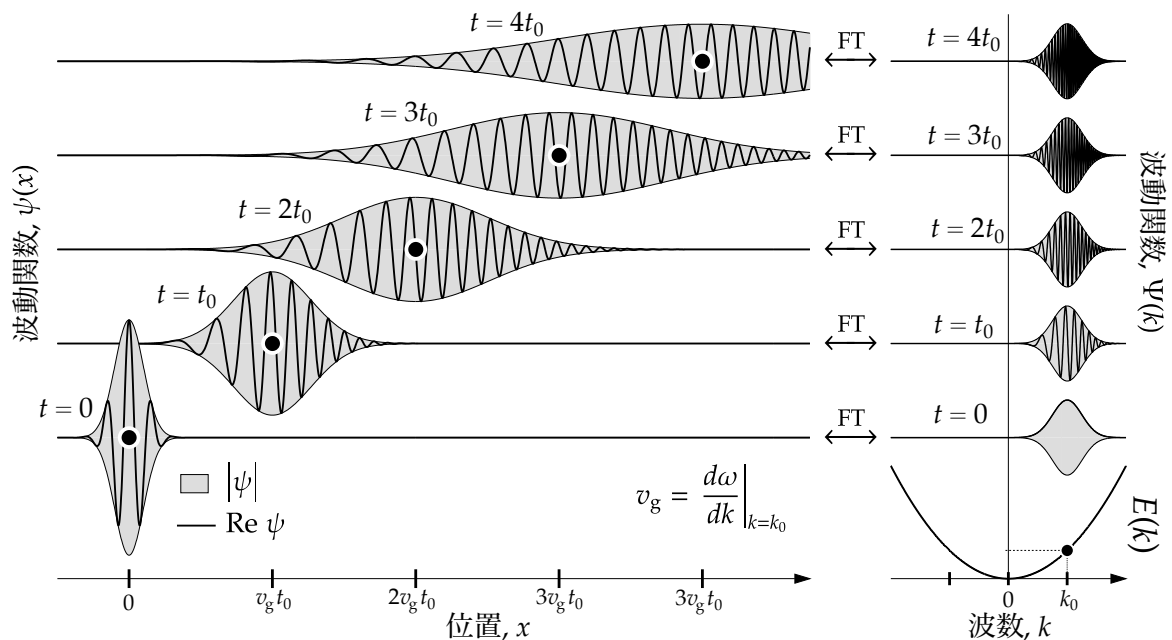


図 9.5 波束の時間発展。波束に含まれる平面波成分は、それぞれ異なる周波数で振動する。

■ 固体電子の群速度

自由電子の分散関係 $E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ を (9.6) 式に代入すると、 $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ が再現される。しかし、電子の分散関係が放物線から外れると、もはや $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ が **成り立たない**。固体中では、周期場の効果により、ブリルアン・ゾーン境界でギャップが開き、分散関係が放物線から変更される。(9.5) 式に従って一次元周期場模型のエネルギーを微分して得られた群速度の分布を、図 9.6 に示す。明らかに、 $p = mv$ が破綻している。また、ブリルアン・ゾーン境界のギャップ端で、 $v_g = 0$ であり、運動量を与えると電子が減速する波数領域が存在する。

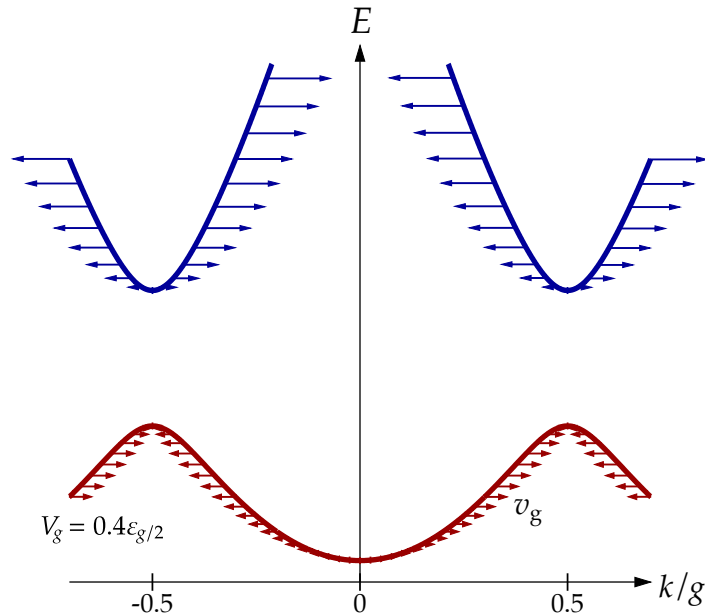


図 9.6 電子の群速度 $v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$ の分布 (矢印)。一次元周期場模型の計算値 ($V_g = 0.4\epsilon_{g/2}$)。

■ フェルミ速度

固体の物性はフェルミ面近傍の電子に左右されるため、フェルミ面における電子の群速度、すなわち、**フェルミ速度**

$$\mathbf{v}_F \stackrel{\text{def.}}{=} \nabla_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k}) \Big|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_F}$$

が、とりわけ重要になる。(9.6) 式に従って、二次元正方格子模型のエネルギー勾配から得られたフェルミ速度の分布を、図 9.7 に示す。必然的に、フェルミ速度は、フェルミ面に常に垂直となり、 $\mathbf{p} \neq m\mathbf{v}$ である。また、

- フェルミ速度 $\mathbf{v}_F$ が外側を向き、内側が電子で占有されたフェルミ面（青）
- フェルミ速度 $\mathbf{v}_F$ が内側を向き、外側が電子で占有されたフェルミ面（赤）

の二種類が、存在する。

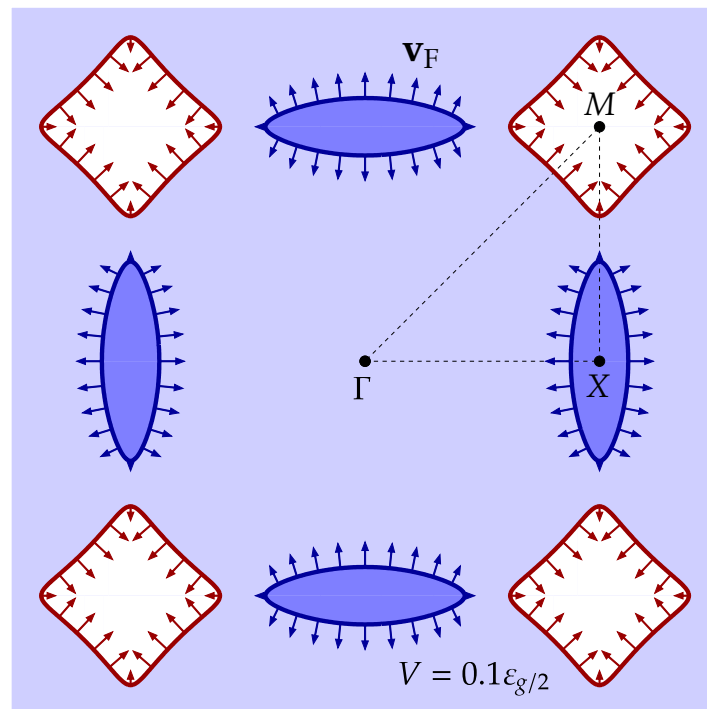


図 9.7 フェルミ速度ベクトル $\mathbf{v}_F$ の分布。周期場は (8.6) 式 ($V = 0.1\epsilon_g/2$)。薄い青は、1つのバンドが電子に占有されている領域で、濃い青は、2つのバンドが電子に占有されている領域。

9.3 電気伝導度

■ 電子分布と電流密度

第2章のドルーデ模型では、伝導電子の密度 n と平均速度 $\mathbf{v}_d = \frac{\langle \mathbf{p}(\infty) \rangle}{m}$ を用いて、

$$\mathbf{j} = -en \mathbf{v}_d \quad (2.11)$$

という単純な式で電流密度 $\mathbf{j}$ を算出した。しかし、固体中では、もはや $\mathbf{v} \neq \frac{\mathbf{p}}{m}$ なので、周期場によって電子の速度が $\frac{\hbar \mathbf{k}}{m}$ から外れる効果を取り込む必要がある。そこで、波数 $\mathbf{k}$ の電子の速度を $\mathbf{v}(\mathbf{k})$ とおき、波数 $\mathbf{k}$ の状態の占有率 $g(\mathbf{k})$ をかけて、電流密度を積算する。

$$\mathbf{j} = -e \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} g(\mathbf{k}) \mathbf{v}(\mathbf{k}) \quad (9.7)$$

(4.7) 式より $\int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} g(\mathbf{k}) = n$ が成り立つので、(9.7) 式は、まさしく (2.11) 式に電子速度の波数依存性を取り込んだ形になっている。外場が無いときの熱平衡基底状態における占有率は、(4.18) 式のフェルミ–ディラック分布関数 $f_{FD}(E)$ によって与えられる。従って、波数 $\mathbf{k}$ の状態のエネルギー $E(\mathbf{k})$ を代入すれば、**基底状態の占有率の波数分布**

$$f(\mathbf{k}) = f_{FD}[E(\mathbf{k})] = \frac{1}{\exp\left[\frac{E(\mathbf{k}) - \mu}{k_B T}\right] + 1}$$

が得られる。基底状態では正味の電流が消えるので、

$$-e \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} f(\mathbf{k}) \mathbf{v}(\mathbf{k}) = 0 \quad (9.8)$$

となる。これを用いると、(9.7) 式は

$$\mathbf{j} = -e \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} [g(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k})] \mathbf{v}(\mathbf{k}) \quad (9.9)$$

と書き換えられる。このように、「**電子分布の差分** $g(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k})$ が電流を担う」と解釈すると、伝導現象を理解しやすい。

■ 電場下の定常状態

運動量の定義 $\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}$ と $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ より、静電場 $\mathbf{E}$ から力を受けた電子は、

$$\frac{d\mathbf{k}}{dt} = -\frac{e}{\hbar}\mathbf{E}$$

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

に従って一斉に、波数空間を $-\mathbf{E}$ の方向に移動する。平均すると、緩和時間 τ が経過して、 $-\frac{e}{\hbar}\mathbf{E}\tau$ ほど移動したのちに電子が散乱されて、基底状態の分布 $f(\mathbf{k})$ に戻ろうとする。従って、図 9.8 のように、 $-\frac{e}{\hbar}\mathbf{E}\tau$ ほどフェルミ面がシフトしたところで、電場による波数移動 と 散乱による緩和 がつりあった 定常状態 $g(\mathbf{k})$ になる。このときの電子分布の差分 $g(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k})$ を示すと、図 9.9 のようになる。

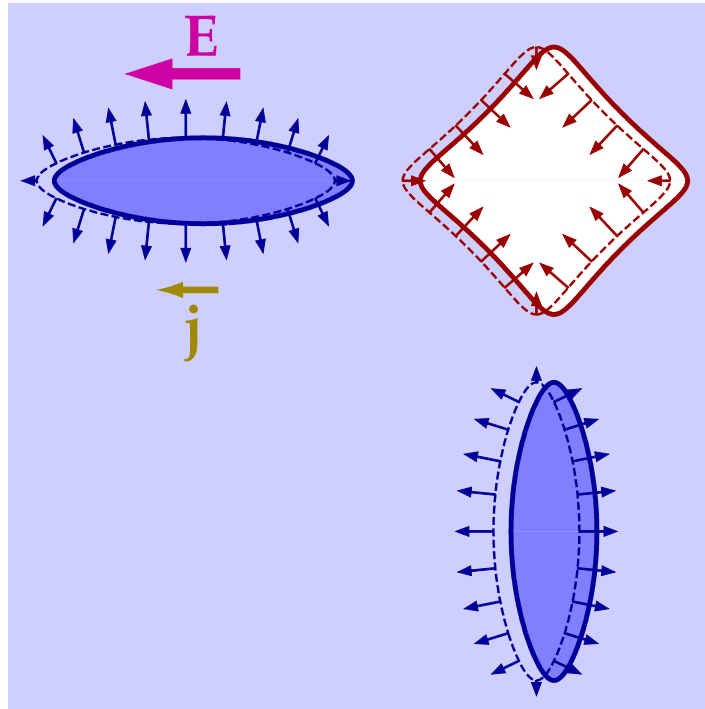


図 9.8 電場を印加したときの図 9.7 の電子分布の変化。電場 $\mathbf{E}$ によってフェルミ面が $-\frac{e}{\hbar}\mathbf{E}\tau$ ほどシフトし、電流 $\mathbf{j}$ が発生する。

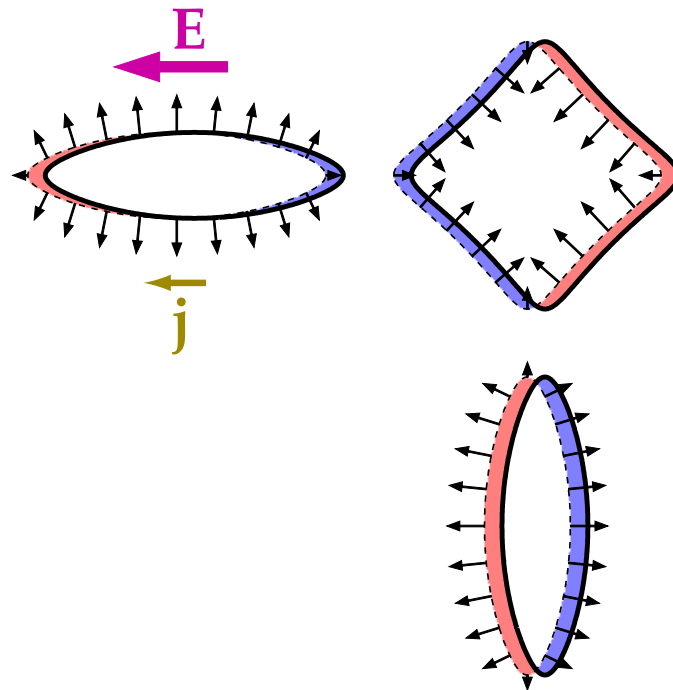


図 9.9 電場 $\mathbf{E}$ による電子分布の差分 $g(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k})$ の表示。青い領域は電子が増えたところで、赤い領域は電子が減ったところ、黒い矢印はフェルミ速度 $\mathbf{v}_F$ を表す。

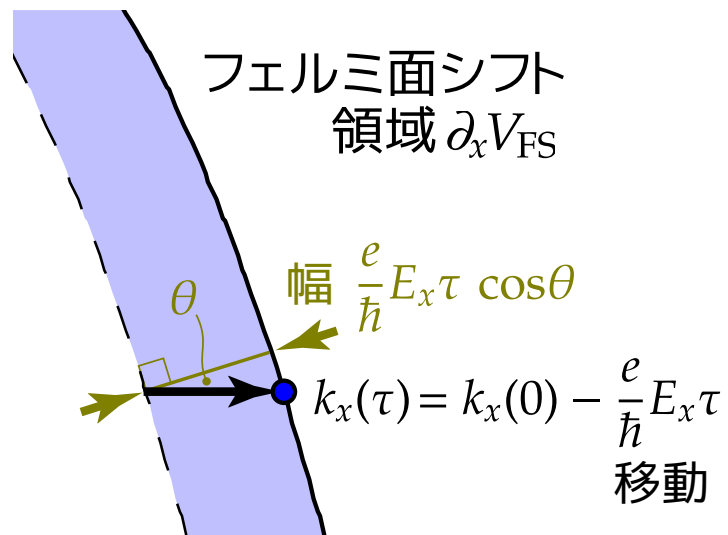


図 9.10 電場によるフェルミ面のシフトで、電子が増減する領域 $\partial_x V_{FS}$ の拡大図。

■ フェルミ速度の表面積分

簡単のため、(9.9) 式の電流密度の x 成分を考える。

$$j_x = -e \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} [g(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k})] v_x(\mathbf{k})$$

$g(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k})$ は、図 9.9 のように、フェルミ面がシフトした領域でのみ値をもつので、フェルミ面に沿った表面積分に書き換えることができる。図 9.10 より、フェルミ面の法線ベクトルが x 軸と成す角を $\theta(\mathbf{k})$ とおくと、シフト領域の幅は $\frac{e}{\hbar} E_x \tau \cos \theta$ で与えられるので、これを重みとして v_x をフェルミ面に沿って積分すれば良い。

$$j_x = \frac{e}{4\pi^3} \int_{\text{FS}} dS \left(\frac{e E_x \tau}{\hbar} \cos \theta \right) v_x$$

$\mathbf{k}$ に依存しない定数を積分の外に出す。

$$j_x = \frac{e^2 E_x}{4\pi^3 \hbar} \int_{\text{FS}} dS v_x(\mathbf{k}) \tau(\mathbf{k}) \cos \theta$$

電場と電流の比例係数が伝導度 σ_{xx} なので、 $j_x = \sigma_{xx} E_x$ と比較すると、電気伝導度の表式が得られる。

$$\text{電気伝導率} \quad \sigma_{xx} = \frac{e^2}{4\pi^3 \hbar} \int_{\text{FS}} dS v_x \tau \cos \theta \quad (9.10)$$

(9.8) 式より、**フェルミ面上の電子だけ**が電流に寄与すると理解され、伝導率は、フェルミ面上の電子の速度 $\mathbf{v}_F$ と散乱確率 $\tau(\mathbf{k}_F)$ で決まる。また、バンド・ギャップが開いてフェルミ面が消失すると、電流は流れず、絶縁体になる。

9.4 有効質量

■ 慣性質量

ニュートン力学における **慣性質量** m は、力と加速度の間の比例係数 として定義される。

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{1}{m} \mathbf{F} \quad (9.11)$$

量子力学では、運動量で表記するほうが都合が良い。そこで、両辺を時間 t で積分する。

$$\begin{aligned} \mathbf{v}(t_2) - \mathbf{v}(t_1) &= \frac{1}{m} \int_{t_1}^{t_2} \mathbf{F} dt = \frac{1}{m} [\mathbf{p}(t_2) - \mathbf{p}(t_1)] \\ \Delta \mathbf{v} &= \frac{1}{m} \Delta \mathbf{p} \end{aligned} \quad (9.11')$$

(9.11') 式より、慣性質量 m は、

外からの力積による **運動量の増加** に対する **加速のしにくさ**

を表すもの、と理解できる。

■ 動的有効質量

固体中の電子については $\mathbf{p} \neq m\mathbf{v}$ なので、(9.11') 式は成り立たない。そこで、

$$\Delta \mathbf{v} = \frac{1}{m^*} \Delta \mathbf{p}$$

を満たすように **有効質量** m^* を定義して、古典力学からのズレを有効質量に封じ込める。

具体的には、一次元なら

$$\frac{1}{m^*} = \frac{dv}{dp} \quad (9.12)$$

を有効質量とすれば良い。三次元なら、

$$\left(\frac{1}{m^*} \right)_{ij} = \frac{dv_i}{dp_j} \quad (i, j = x, y, z) \quad (9.13)$$

で与えられる **有効質量テンソル** を用いて、速度と運動量の関係を、

$$\Delta v_i = \sum_j \left(\frac{1}{m^*} \right)_{ij} \Delta p_j \quad (9.14)$$

と表記する。ただし、 m^* の値は、もはや電子固有の定数ではなく、電子の波数ベクトルやバンドに依存して変化する。(9.12) 式と (9.13) 式に、群速度の表式 $v_i = \frac{\partial E}{\partial p_i}$ を代入すると、有効質量の逆数が **分散の曲率** を表すことがわかる。

$$\text{有効質量} \quad \frac{1}{m^*} = \frac{d^2 E}{dp^2} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 \omega}{dk^2} \quad (9.15)$$

$$\text{有効質量テンソル} \quad \left(\frac{1}{m^*} \right)_{ij} = \frac{\partial^2 E}{\partial p_i \partial p_j} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 \omega}{\partial k_i \partial k_j} \quad (9.16)$$

ただし、 $i, j = x, y, z$

(9.16) 式の曲率は対称テンソルなので、適切な波数軸 k_1, k_2, k_3 を選ぶことで、対角化できる。このとき、運動方程式は軸方向に分解され、

$$\frac{dv_i}{dt} = \frac{1}{m_i^*} F_i \quad (i = 1, 2, 3)$$

となる。電子の有効質量としては、異なる定義が使われることもあるので注意せよ^{*2}。慣性質量を発展させた (9.12) – (9.16) 式の m^* は、**動的有効質量 (Dynamical effective mass)** と呼ばれる。

■ 固体電子の有効質量

一次元周期場模型の分散関係を、(9.15) 式に従って二回微分して得られた曲率と有効質量を、図 9.11 に示す。自由電子の質量 m_0 を基準とすると、波数原点 $k = 0$ の周辺では $m^* \simeq m_0$ だが、 k がゾーン境界に近づくと、有効質量が負に転じ、 $m^* < 0$ の領域が広がっている。ここで、正の方向に力をかけると、電子は正の方向に減速、もしくは、負の方向に加速されることになる。

^{*2} 固体中の電子の有効質量については、研究の対象や実験手法に応じて **様々な定義が存在する** が、すべての定義に共通する性質として、電子の分散関係を質量 m^* の自由粒子の分散関係で近似できるときは、 m^* が有効質量になる。

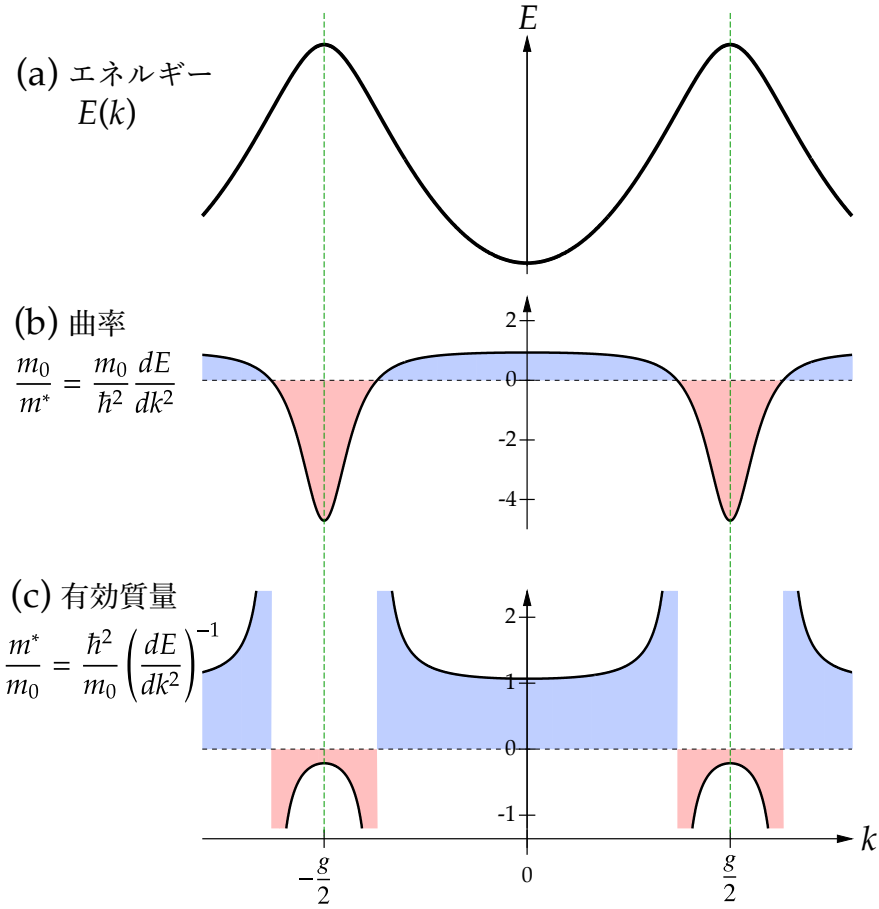


図 9.11 電子の有効質量 m^* の分布。一次元周期場模型の計算値 ($V = 0.4\varepsilon_g/2$)。 m_0 は自由電子の質量を表す。(a) エネルギー。(b) 曲率。(c) 有効質量。

■ 表面積分と体積積分

まず、面積分 dS を、直交座標系の積分 $dk_y dk_z$ に変換する。図 9.12 より、変換式は $\cos \theta dS = dk_y dk_z$ で与えられる。そして、 $(k_x, k_y) = (\text{一定})$ の直線が、フェルミ面と交わる 2 点の k_x 座標を $k_{x1}(k_x, k_y)$ および $k_{x2}(k_x, k_y)$ とおくと、

$$\begin{aligned}
 \int_{\text{FS}} v_x(\mathbf{k}) \cos \theta dS &= \int_{\text{FS}} [v_x(k_{x2}, k_y, k_z) - v_x(k_{x1}, k_y, k_z)] dk_y dk_z \\
 &= \int_{V_{\text{FS}}} \frac{\partial v_x}{\partial k_x} dk_x dk_y dk_z \\
 &= \hbar \int_{V_{\text{FS}}} \left(\frac{1}{m^*} \right)_{xx} d\mathbf{k}
 \end{aligned} \tag{9.17}$$

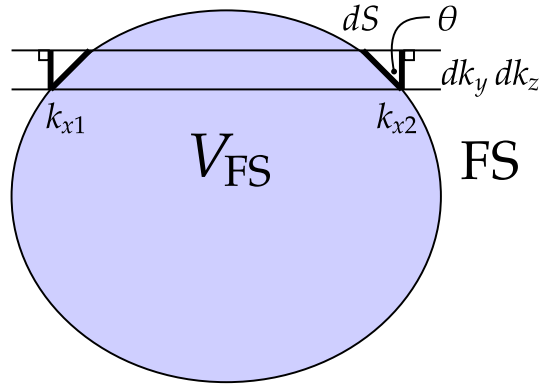


図 9.12 積分の変数を、 $\cos \theta dS = dk_y dk_z$ と変換することができる。

と変換され、フェルミ速度の表面積分を、有効質量の逆数の体積積分に書き換えることができる。そこで、(9.10) 式における緩和時間 $\tau(\mathbf{k})$ を定数で近似して積分の外に出し、(9.17) 式を適用する。

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

さらに、逆質量 $\frac{1}{m^*}$ を、フェルミ面内部における平均値でおきかえると、

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

となり、ドルーデの式に帰着する。ここでの τ はフェルミ面の表面における平均値だが、 $\frac{1}{m^*}$ はフェルミ面の内部における平均値を表す。

■ 金属における有効質量

金属において、有効質量の逆数をフェルミ面の内部の平均値で置き換えることは、フェルミ面の内側の分散を 単純な放物線で近似することを意味する。金属の伝導度はフェルミ速度で決まるので、フェルミ速度さえ再現できれば、伝導現象の記述には十分である。図 9.13 に、弱周期場模型におけるフェルミ面の内側の逆質量分布を示す。また、フェルミ速度を再現するように放物線をあてはめた結果を図 9.14 の破線で示す。X 点周りのフェルミ面のように、内側が電子で占有されているときは、下に凸の放物線でフェルミ速度が再現されるため、**電子** が伝導を担うと考える。一方、M 点周りのフェルミ面のように、外側が電子で占有されているときは、上に凸の放物線でフェルミ速度が再現されるため、**ホール** が伝導を担うと解釈すると、簡潔な記述が得られる。

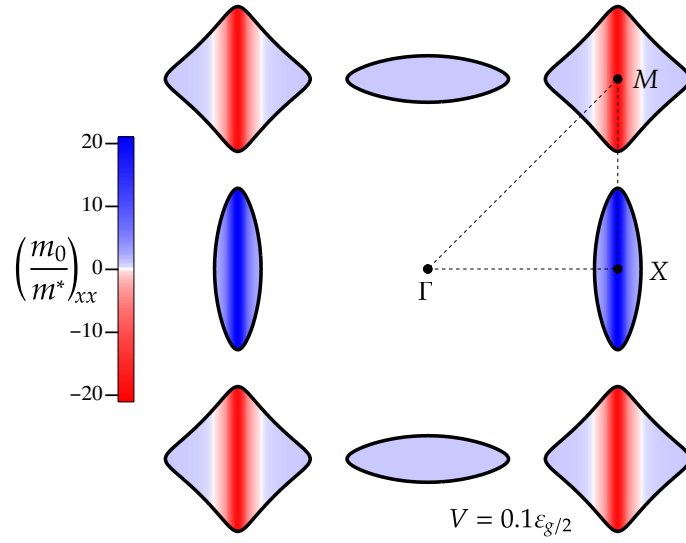


図 9.13 弱周期場模型 ($V = 0.1\varepsilon_g/2$) における有効質量の逆数の分布。フェルミ面の内部において、分散の曲率 $\left(\frac{m_0}{m^*}\right)_{xx} = \frac{m_0}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2}$ が正の領域を青、負の領域を赤で示す。

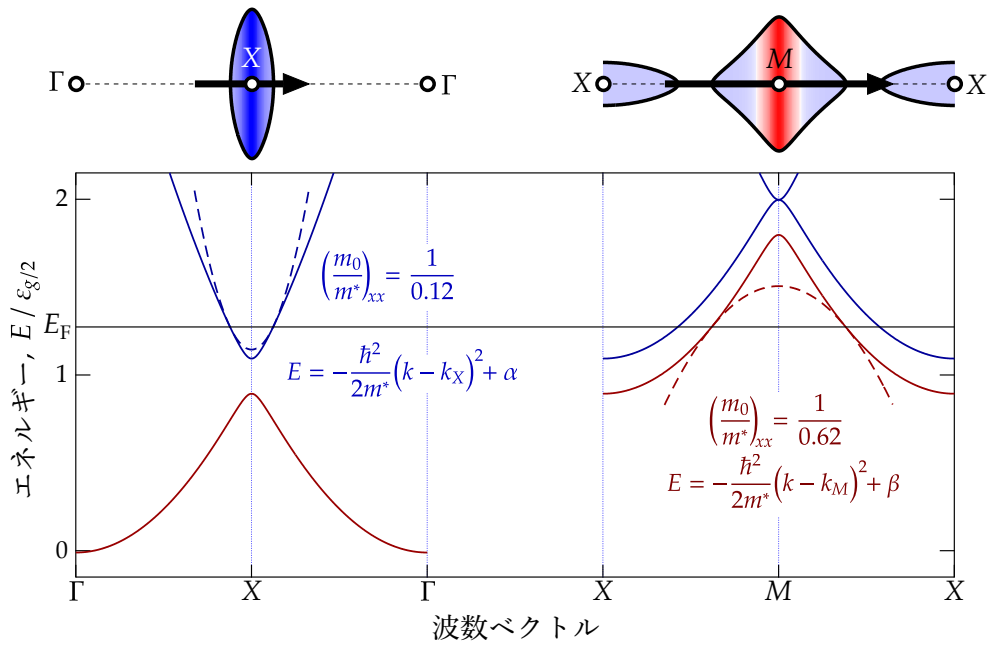


図 9.14 Γ -X- Γ および X-M-X の経路における分散関係（実線）と有効質量近似による放物線状の分散（破線）。周期場は (8.6) 式 ($V = 0.1\varepsilon_g/2$)。

■ 絶縁体における有効質量

絶縁体では、フェルミ準位 E_F がギャップ中に位置しているため、図 9.15 のように、伝導帯の底と、価電子帯の頂上を放物線で近似するのが有効だ。

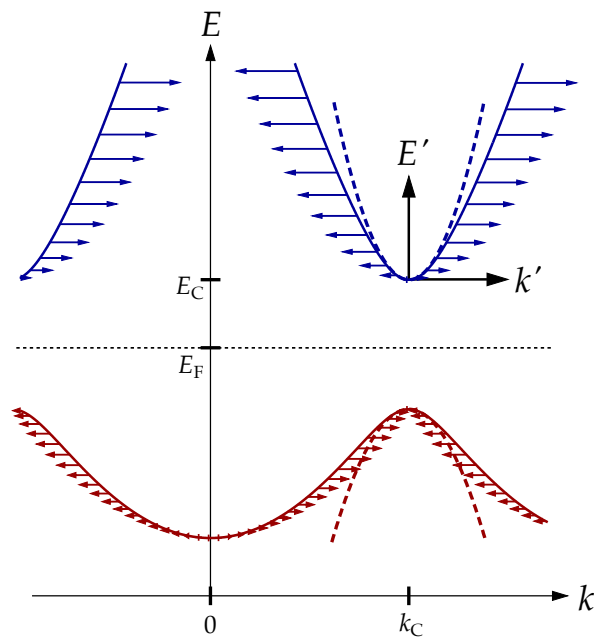


図 9.15 波数原点を $k = k_C$ に設定すると、その近傍の分散関係が、質量 m^* の自由粒子と同じになる。

■ 古典への回帰

一般論として、エネルギーには絶対的な基準点がなく、相対的な増減にのみ意味がある。実は、運動量も全く同様で、**力積を介した運動量の増減** が本質なので、 $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ が破れているのであれば、もはや運動量の絶対値に意味は無く、 $\mathbf{p} = 0$ を原点とする必然性はない。例えば、図 9.15 の伝導帯のように、分散関係が

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*} |\mathbf{k} - \mathbf{k}_C|^2 + E_C \quad (9.18)$$

と近似されるのであれば、その群速度がゼロになる波数 $\mathbf{k}_C$ を原点とするのが合理的だ。
そこで、 $\mathbf{k}' = \mathbf{k} - \mathbf{k}_C$ 、 $E' = E - E_C$ において座標変換すると、

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

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

となり、古典的な関係式 $\mathbf{p}' = m^* \mathbf{v}$ が復活する。つまり、この電子は、質量 m^* の古典的な自由粒子と 全く同じように振る舞う。

■ ドルーデの式（改訂版）

二種類のキャリアが共存するときの伝導率は、次のようにまとめられる。

ドルーデの式（改訂版）

$$\text{電気伝導率} \quad \sigma = e^2 \left(n \frac{\tau_e}{m_e^*} + p \frac{\tau_h}{m_h^*} \right) = e(n\mu_e + p\mu_h) \quad (9.19)$$

ただし、電子的なフェルミ面の体積から算出した電子密度を n 、電子の有効質量を m_e^* 、緩和時間を τ_e 、易動度を $\mu_e = e \frac{\tau_e}{m_e^*}$ とした。また、ホール的なフェルミ面の体積から算出したホール密度を p 、ホールの有効質量を m_h^* 、緩和時間を τ_h 、易動度を $\mu_h = e \frac{\tau_h}{m_h^*}$ とした。

9.5 まとめ

■ 波束の運動

- 電子の群速度は、**勾配** $v_g \stackrel{\text{def.}}{=} \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$
- 電気伝導率は、フェルミ速度の面積分 $\sigma_{xx} = \frac{e^2}{4\pi^3\hbar} \int_{\text{FS}} dS \, v_x \tau \cos\theta$
- 電子の動的有効質量の逆数は、**曲率** $\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2E}{dk^2}$
- 有効質量を用いた電気伝導率は、 $\sigma = e^2 \left(n \frac{\tau_e}{m_e^*} + p \frac{\tau_h}{m_h^*} \right)$