

固体物理学1

第7講

周期場中の電子

~~ 規則正しく永遠に ~~

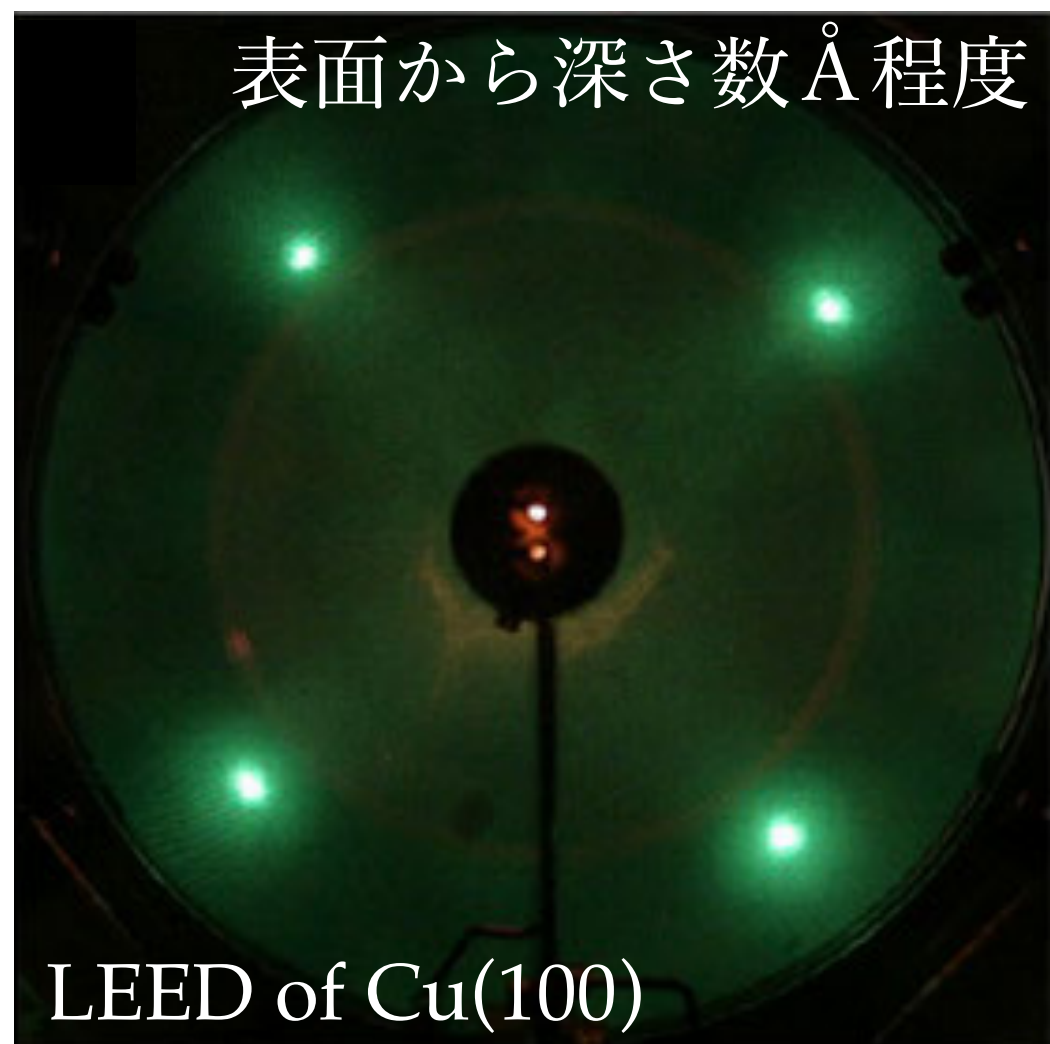
広島大学 井野明洋

居室：理D205、放射光セ408

実 験 事 実

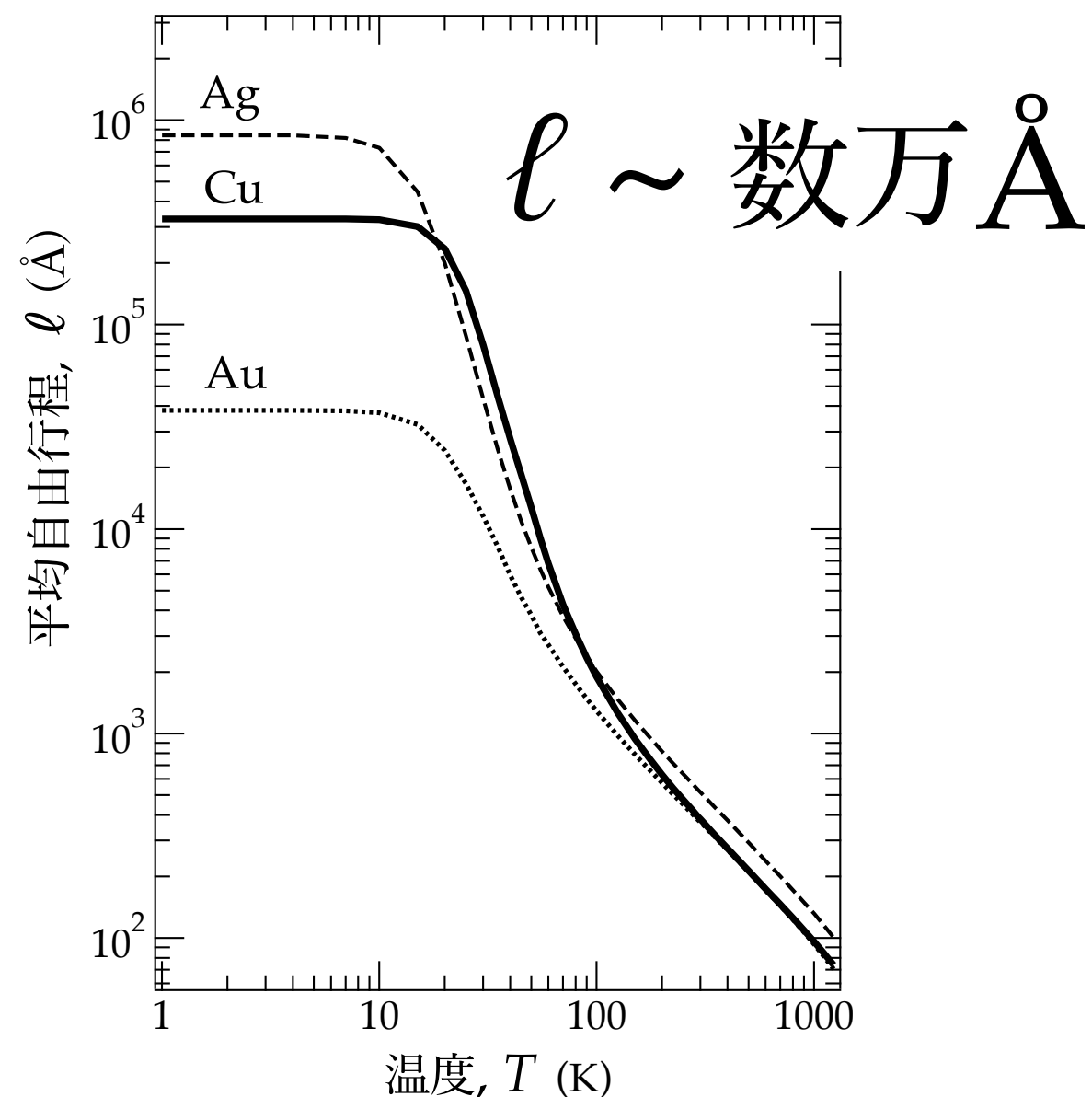
食い違い？

電子線回折の実験



Robinson *et al.*, J. Phys. Chem. C 117, 23919 (2013).

電気抵抗の実験



周期場による散乱は、

ある!!!



周期場による散乱は、

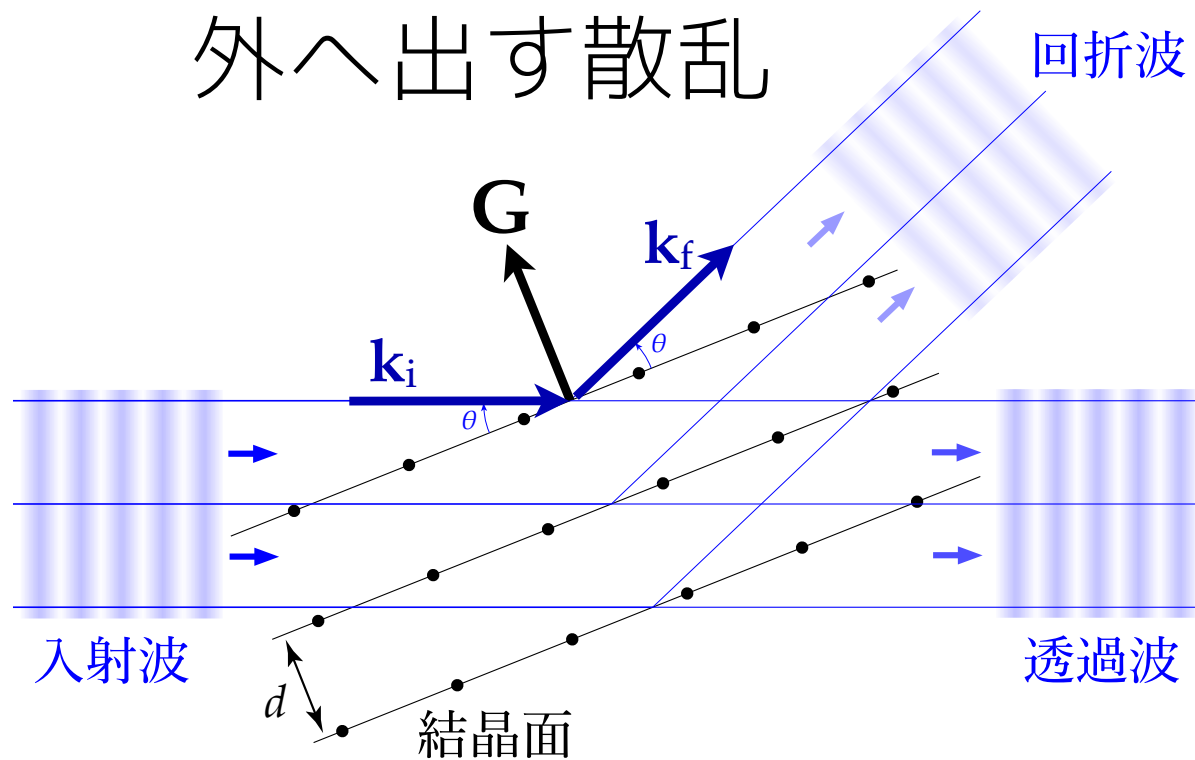
検出され **ない!?!**

一体、何が、起きているのか？

周期場による電子の散乱

回折実験

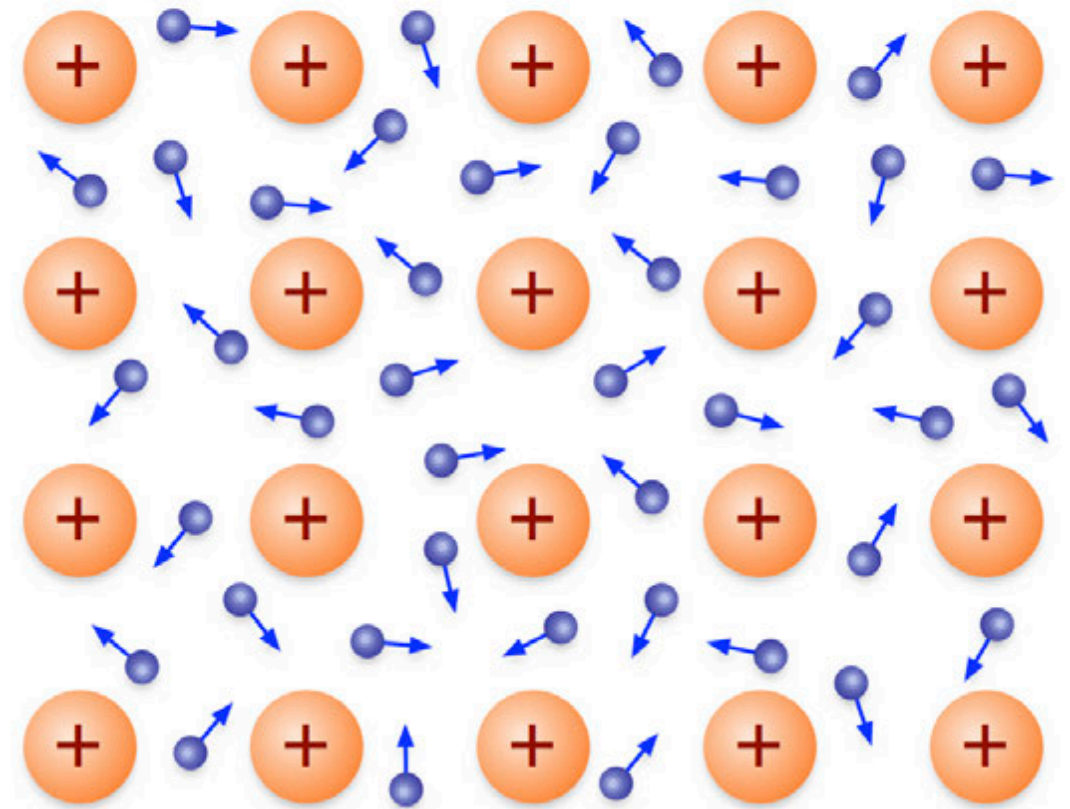
外から来た電子を
外へ出す散乱



- **1回ポッキリ** の散乱を想定
- 終状態の平面波は、**定常状態**

抵抗実験

固体の内部にとどまる散乱



- 周期場によって、**何度も** 散乱される
- 平面波は、もはや **定常ではない**

まずは、定常状態を求めよう!

課題

結晶中の電子の
定常状態を
探し出す

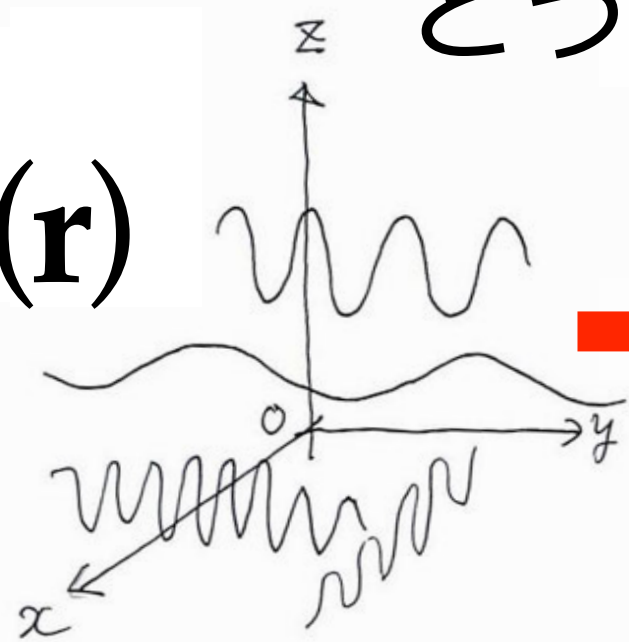
実空間

どうやって?

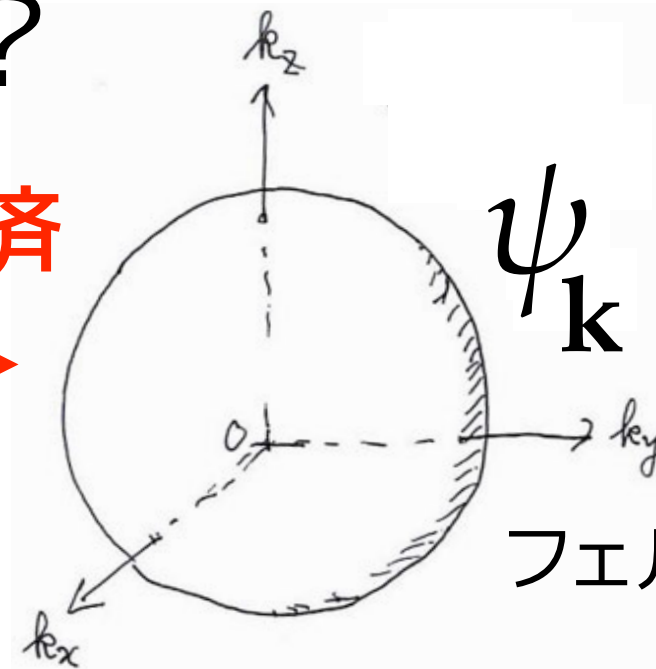
逆空間

 $\psi(\mathbf{r})$

電子の確率
密度分布



召喚済

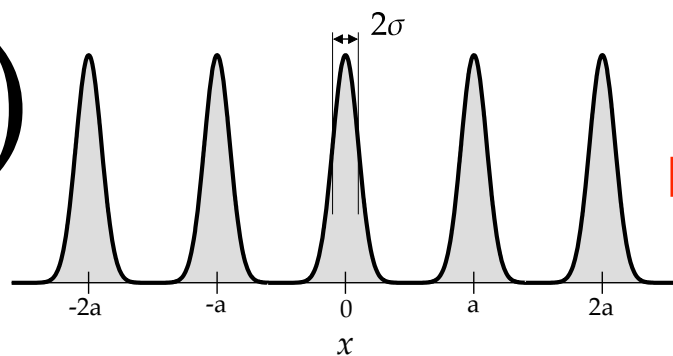


フェルミ球

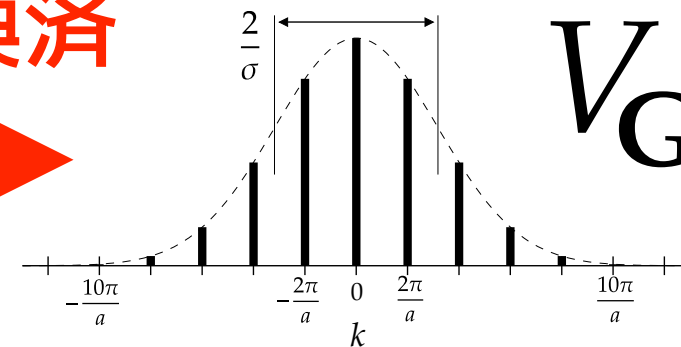
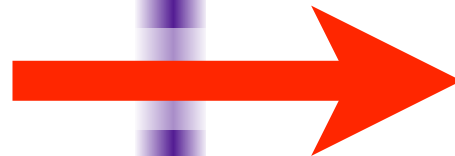
周期場

 $V(\mathbf{r})$

結晶格子



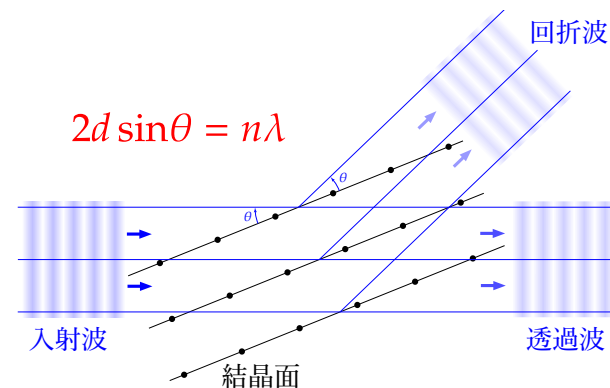
召喚済

 V_G

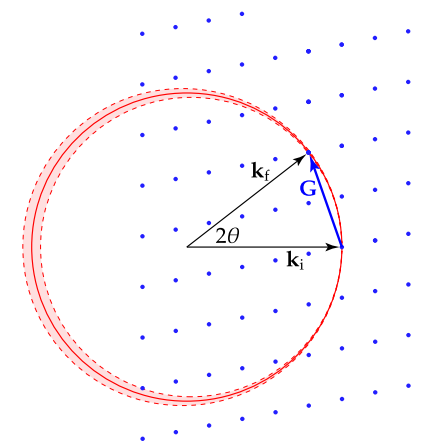
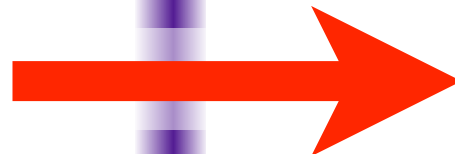
離散化
逆格子

ブラッグ散乱

$$2d \sin \theta = n\lambda$$



召喚済



$$\mathbf{k}_f = \mathbf{k}_i + \mathbf{G}$$

$$|\mathbf{k}_f| = |\mathbf{k}_i|$$

シュレーディンガー方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r})$$

召喚しよう



方針

シミュレータディンガー
方程式を
逆空間に召喚する

- Blochの定理
- バンド理論

周期場中の方程式

実空間 $\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r})$

微分則

周期関数

掛け算と
畳み込み

逆空間 $\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \Psi_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} \Psi_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} = E \Psi_{\mathbf{k}}$

有限区間・離散波数のフーリエ変換
 $[\psi(\mathbf{r}) \text{ に周期的境界条件}]$

時間軸で考えよう

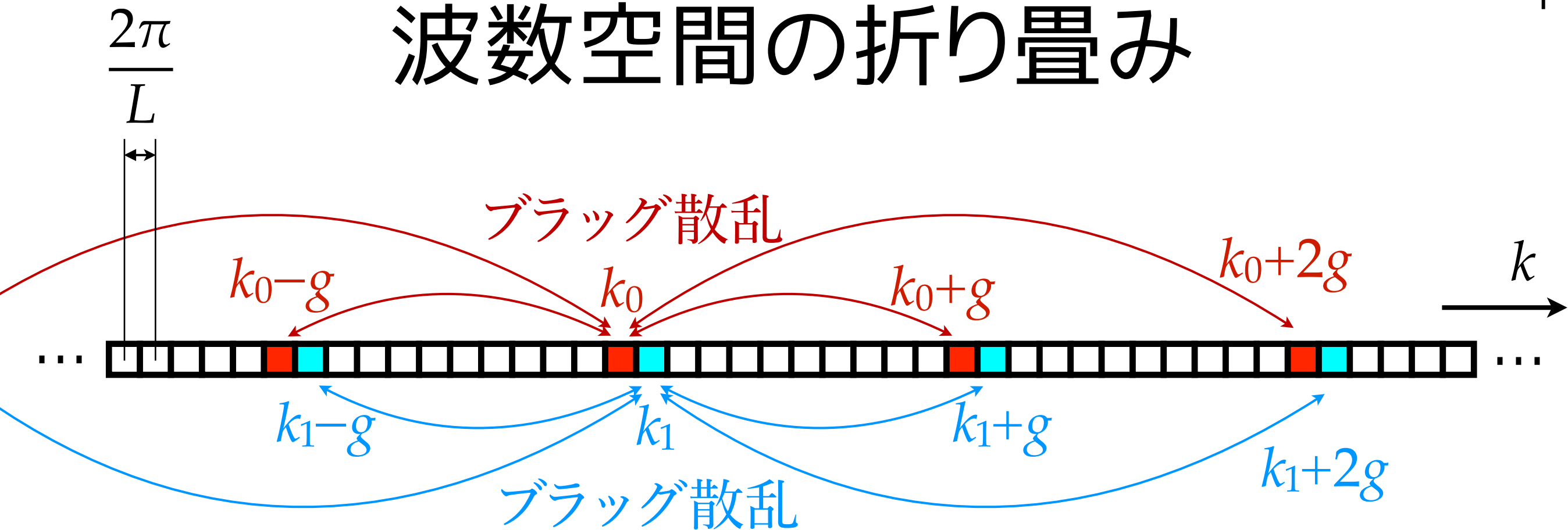
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{G} \neq 0} V_{\mathbf{G}} \Psi_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} = E \Psi_{\mathbf{k}}$$

ツボ Q1

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \vdots \\ \Psi_{k-g} \\ \Psi_k \\ \Psi_{k+g} \\ \Psi_{k+2g} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \\ \dots & \varepsilon_{k-g} & V_{-g} & V_{-2g} & V_{-3g} & \dots \\ \dots & V_g & \varepsilon_k & V_{-g} & V_{-2g} & \dots \\ \dots & V_{2g} & V_g & \varepsilon_{k+g} & V_{-g} & \dots \\ \dots & V_{3g} & V_{2g} & V_g & \varepsilon_{k+2g} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \Psi_{k-g} \\ \Psi_k \\ \Psi_{k+g} \\ \Psi_{k+2g} \\ \vdots \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \vdots \\ \Psi_{k-g} \\ \Psi_k \\ \Psi_{k+g} \\ \Psi_{k+2g} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

- V_{ng} は、**ブラッグ散乱** $k_f = k_i \pm ng$ を表す
- $V_{-g} = V_g^*$ より、 H はエルミート → **必ず、固有ベクトルが存在**

波数空間の折り畳み



$$\psi(x) = \cdots + \Psi_{k-g} e^{i(k-g)x} + \Psi_k e^{ikx} + \Psi_{k+g} e^{i(k+g)x} + \Psi_{k+2g} e^{i(k+2g)x} + \cdots$$

k と $k+G$ を同一視したものを、結晶波数 $\tilde{k}$ と定義

周期場中では、結晶運動量 $\hbar\tilde{k}$ が保存される

通常は結晶波数も $\mathbf{k}$ と表記される。文脈で判断せよ。

ブロッホの定理

位置表示

波数表示

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}$$

周期的な振幅変調

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

離散化された波数成分

$$\mathbf{G} = m_1 \mathbf{g}_1 + m_2 \mathbf{g}_2 + m_3 \mathbf{g}_3$$

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

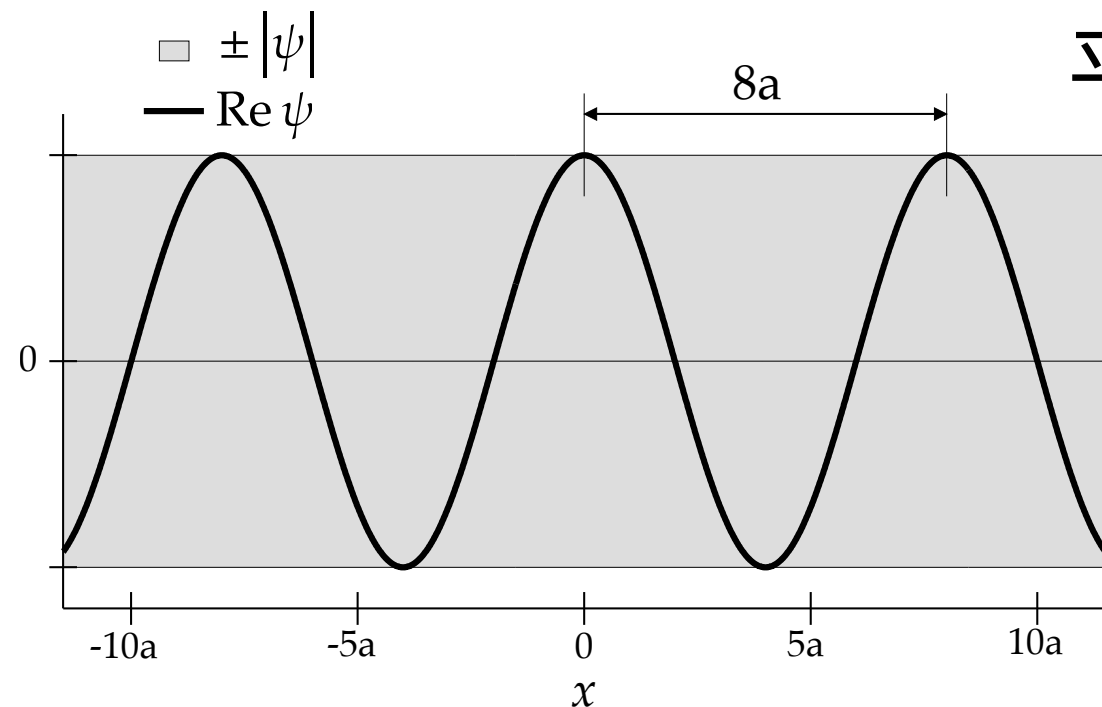
$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}$$

周期場 $V(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = V(\mathbf{r})$ ならば、
必ず、固有状態が存在し、
それは、ブロッホ状態になる。



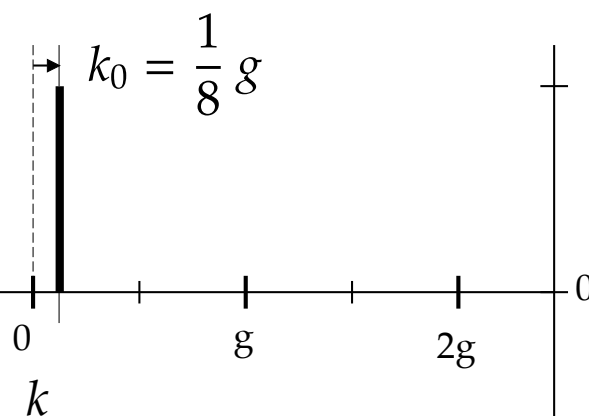
Felix Bloch
1905 — 1983

平面波



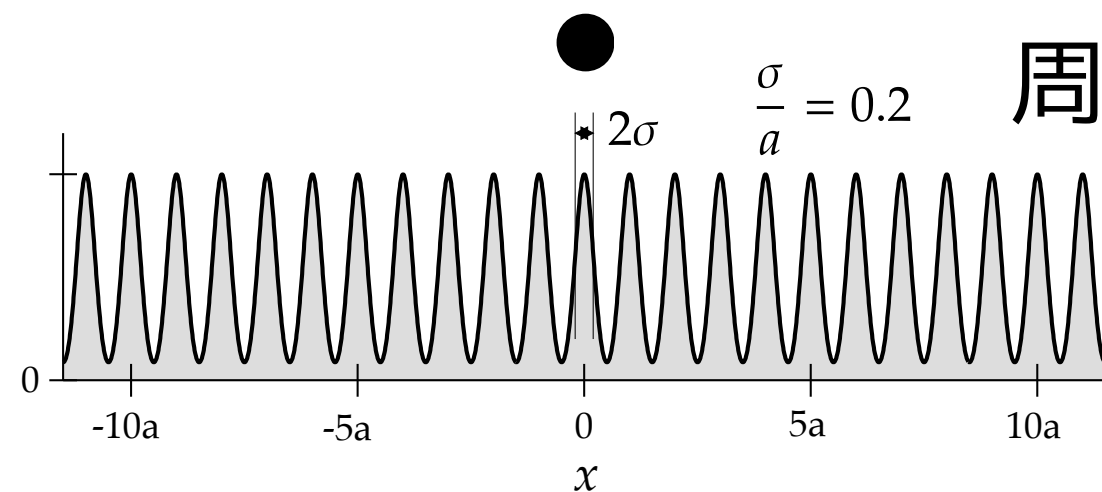
FT

真空中



逆空間

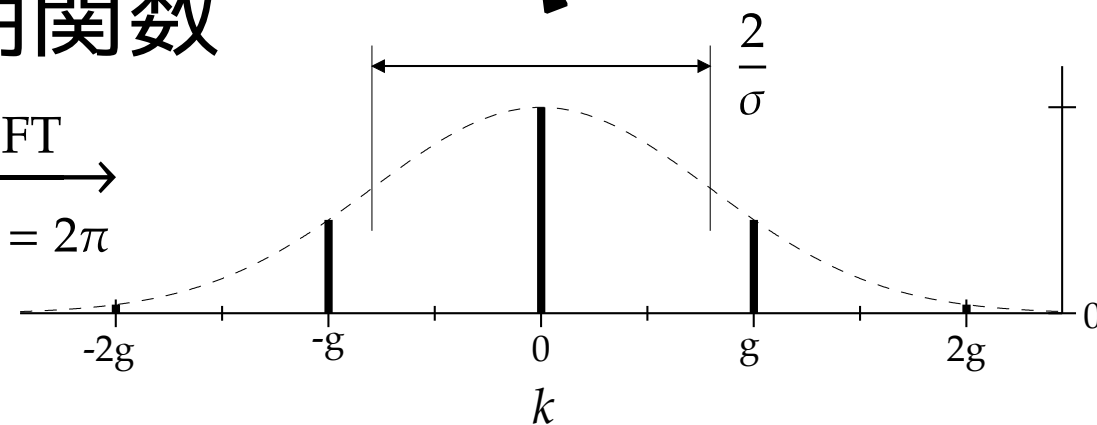
周期関数



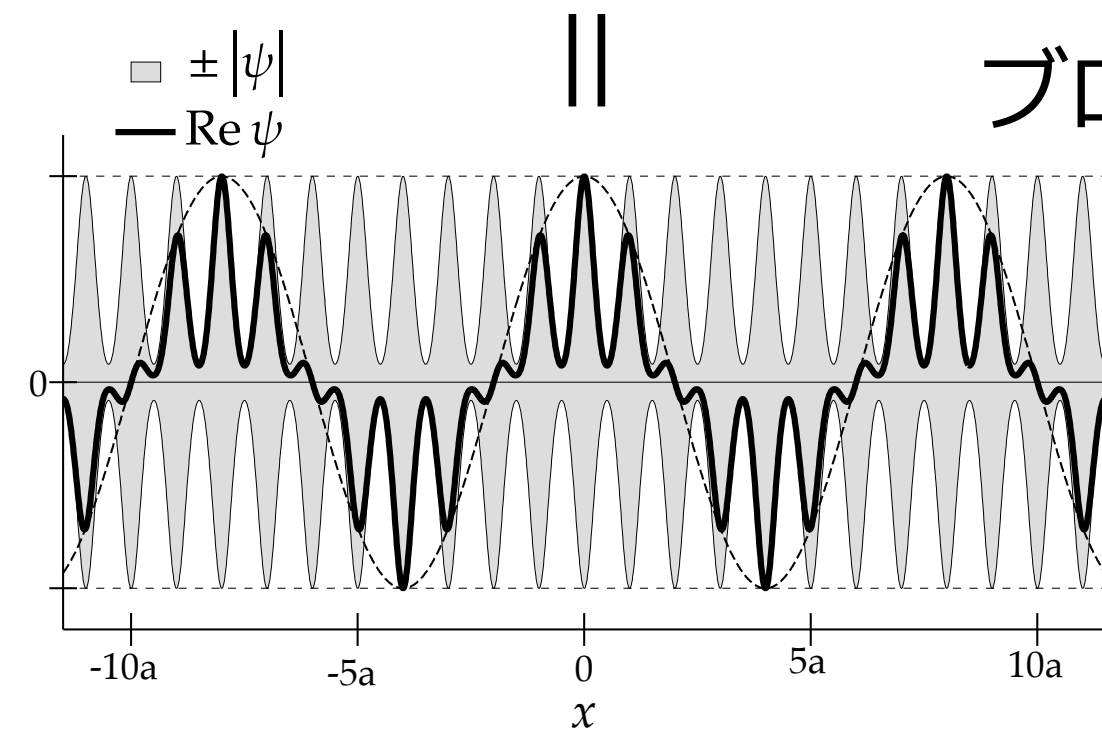
FT

 $ga = 2\pi$ $ga = 2\pi$

*

ブラッグ散乱 $\pm g$

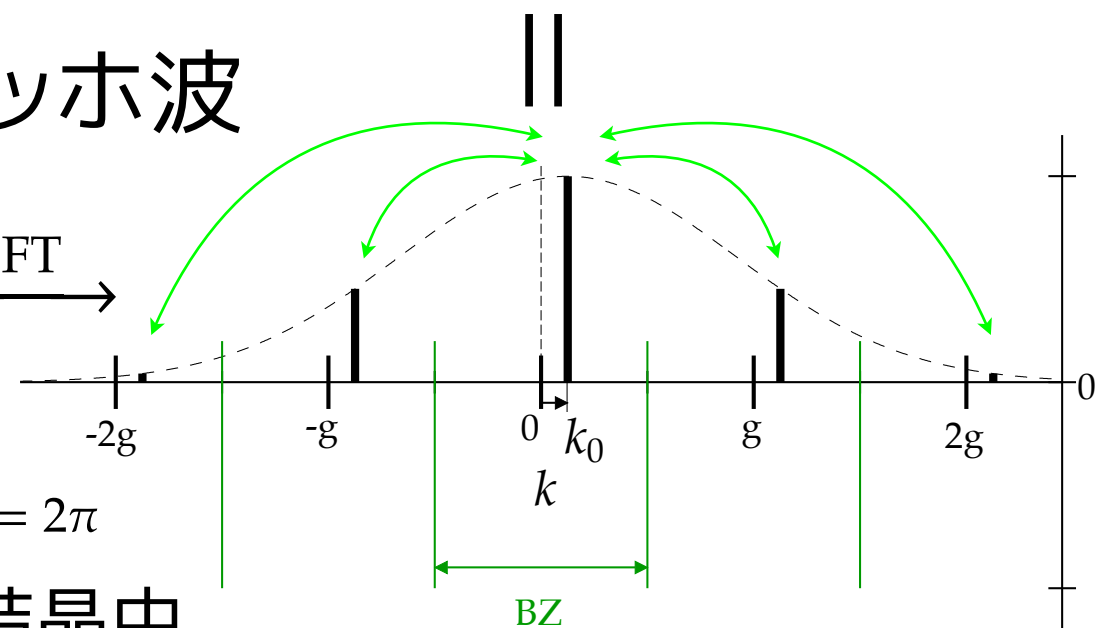
ブロッホ波



FT

 $ga = 2\pi$

結晶中



振幅変調

固有状態 = 定常状態 ツボQ1

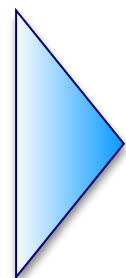
固有状態 が 見つかってしまった

- 『周期場による **規則正しい** 散乱』を取り込んだ新しい固有状態 = **定常状態** が実現する。
- ブロツホ波 (定常状態) が運ぶ電流は、**散逸しない**。
- 周期場による散乱は、**電気抵抗にならない**。

規則正しく永遠に

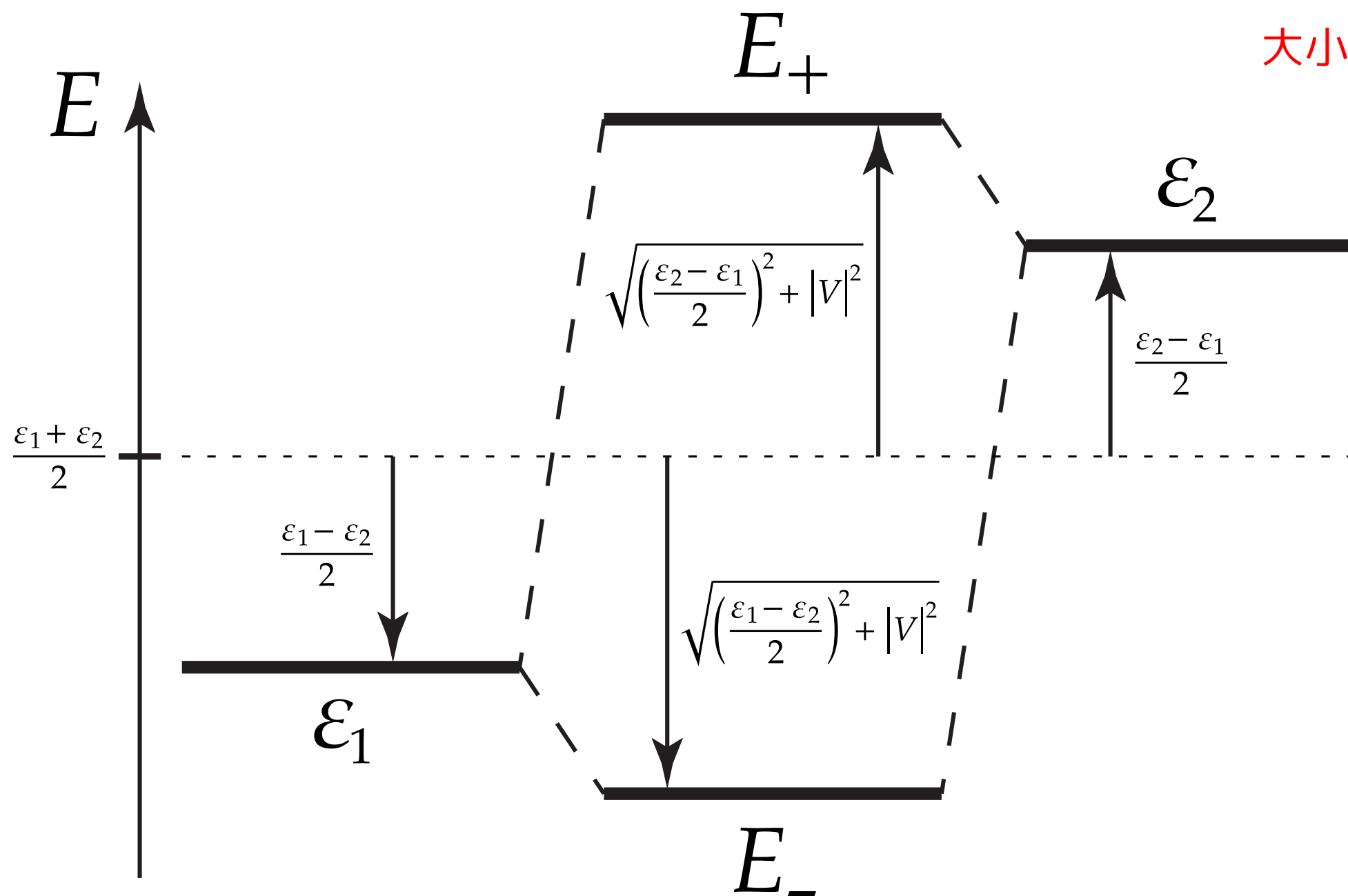
二準位問題

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_1 & V^* \\ V & \varepsilon_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}$$



$$E = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2}\right)^2 + |V|^2}$$

大小関係で決まる



二準位の混成

エネルギー固有値

$$E = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2}\right)^2 + |V|^2}$$

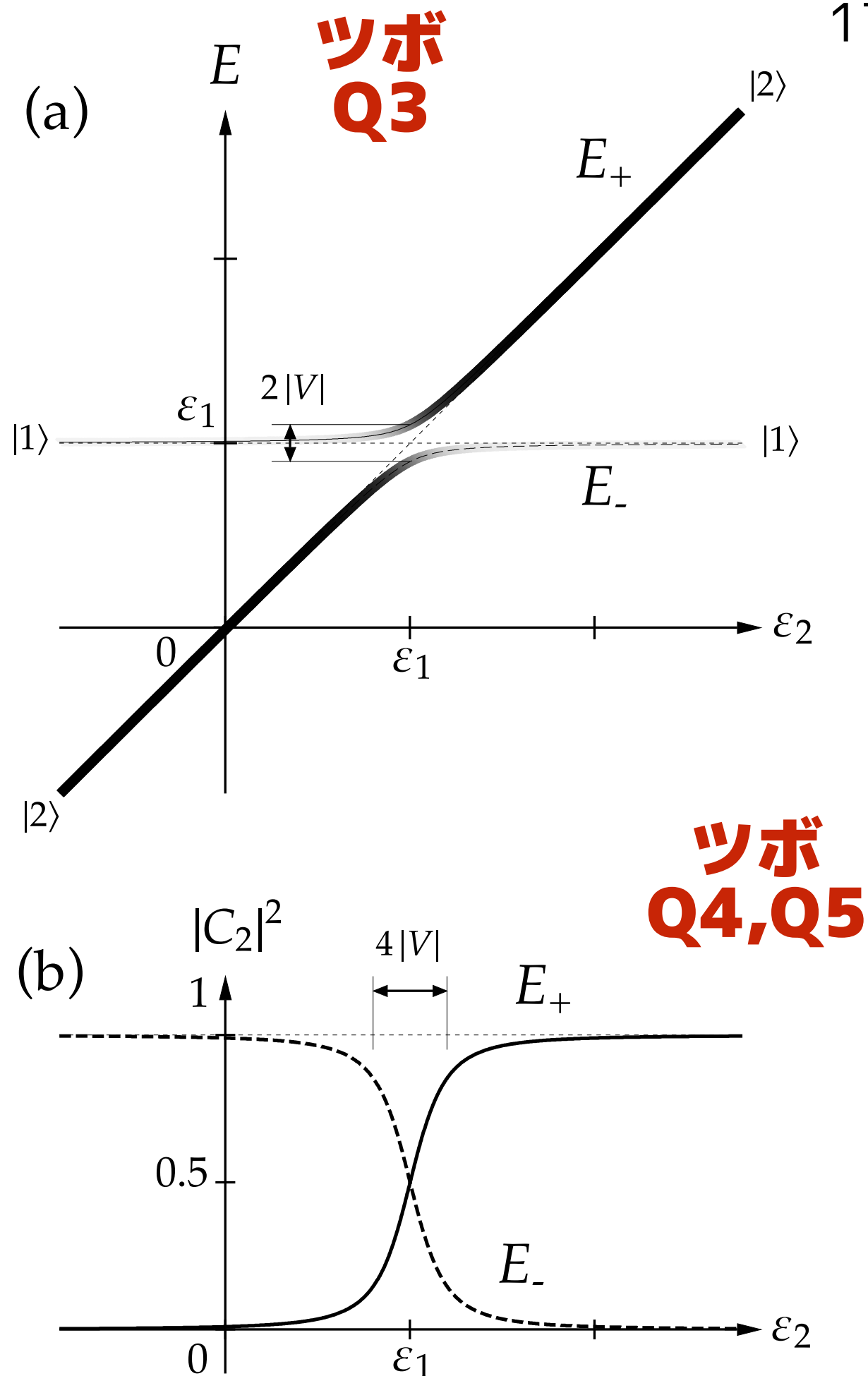
固有状態 $|\psi\rangle = C_1 |1\rangle + C_2 |2\rangle$

確率 $|C_2|^2 = \frac{1}{1 + \left|\frac{E - \varepsilon_2}{V}\right|^2}$

混成条件

$$-2|V| \lesssim \varepsilon_2 - \varepsilon_1 \lesssim 2|V|$$

神様は、よそ見をしている、、、



ブラッグ点近傍の方程式

対角要素

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

$$k \simeq \frac{g}{2} \text{ のとき、 } \varepsilon_{k-g} \simeq \varepsilon_k$$

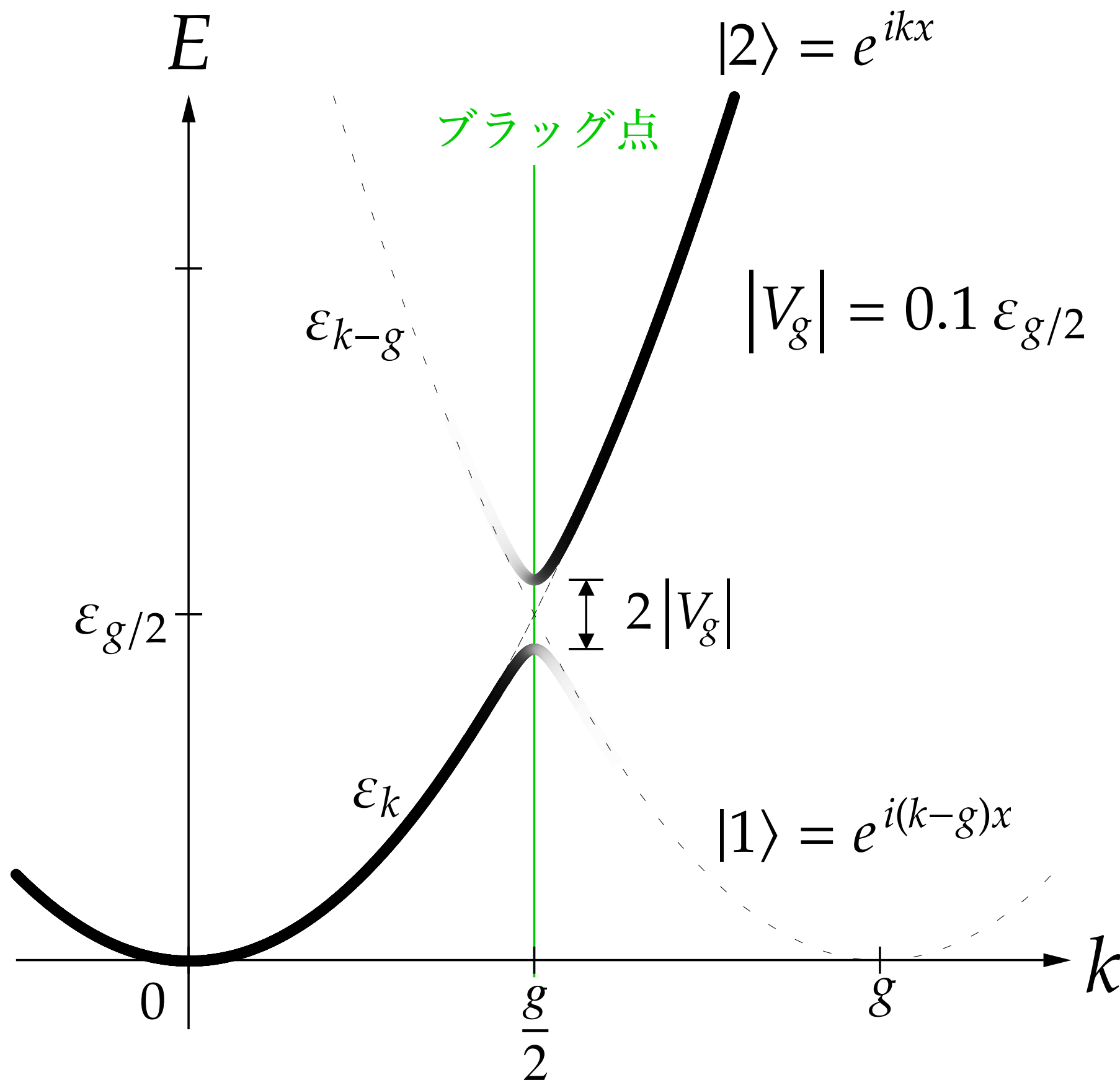
$$\begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \cdots & \boxed{\varepsilon_{k-g}} & \boxed{V_{-g}} & \cancel{V_{-2g}} & \cancel{V_{-3g}} & \cdots \\ \cdots & \boxed{V_g} & \boxed{\varepsilon_k} & \cancel{V_{-g}} & \cancel{V_{-2g}} & \cdots \\ \cdots & \cancel{V_{2g}} & \cancel{V_g} & \boxed{\varepsilon_{k+g}} & \boxed{V_{-g}} & \cdots \\ \cdots & \cancel{V_{3g}} & \cancel{V_{2g}} & \cancel{V_g} & \boxed{\varepsilon_{k+2g}} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \boxed{\Psi_{k-g}} \\ \boxed{\Psi_k} \\ \cancel{\Psi_{k+g}} \\ \cancel{\Psi_{k+2g}} \\ \vdots \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \vdots \\ \boxed{\Psi_{k-g}} \\ \boxed{\Psi_k} \\ \cancel{\Psi_{k+g}} \\ \cancel{\Psi_{k+2g}} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

弱周期場で、混成可能な成分だけを抜き出す

$$|1\rangle = e^{i(k-g)x}, \quad \varepsilon_1 = \varepsilon_{k-g} = \frac{\hbar^2}{2m}(k-g)^2$$

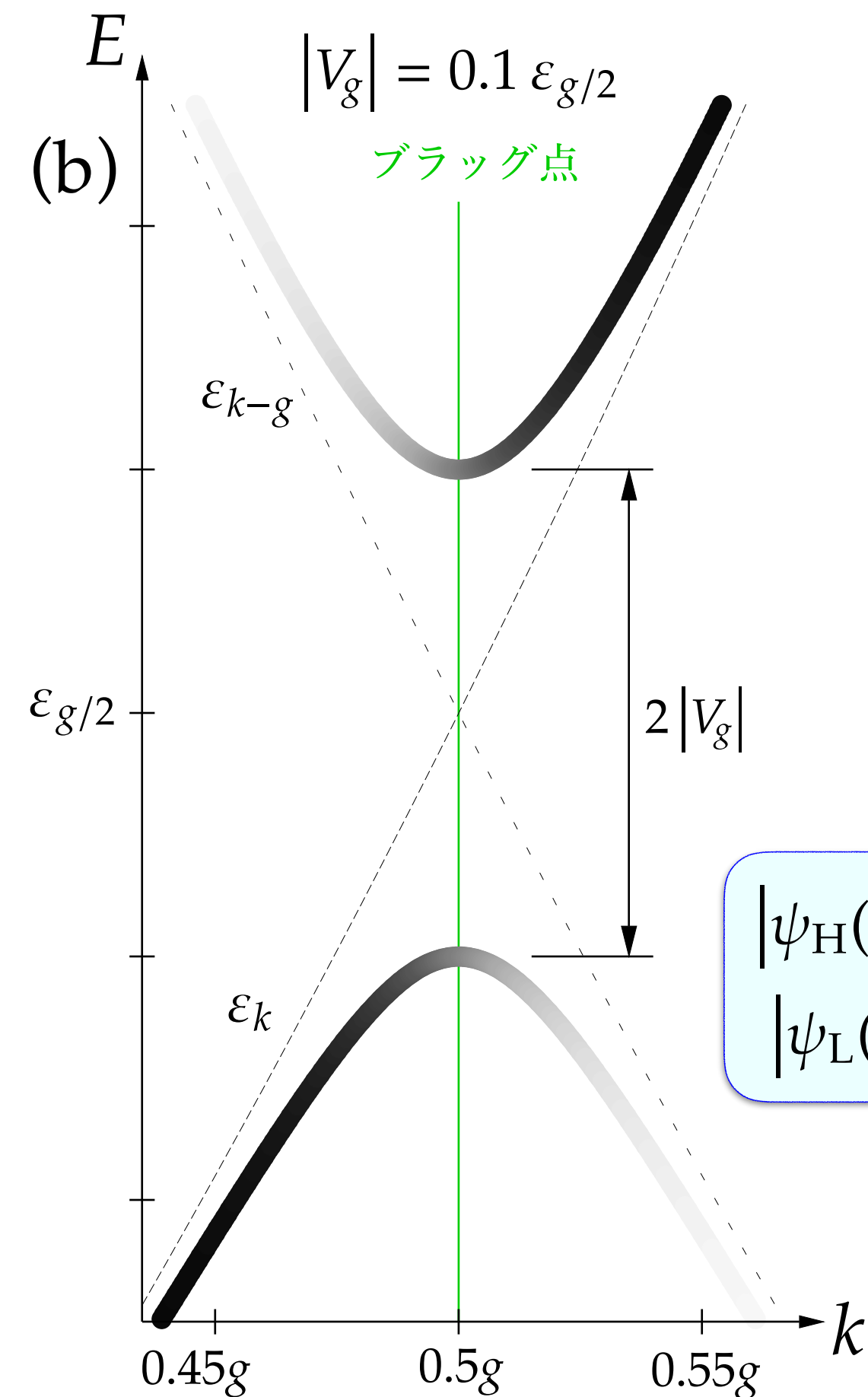
$$|2\rangle = e^{ikx}, \quad \varepsilon_2 = \varepsilon_k = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$$

二つの平面波の混成



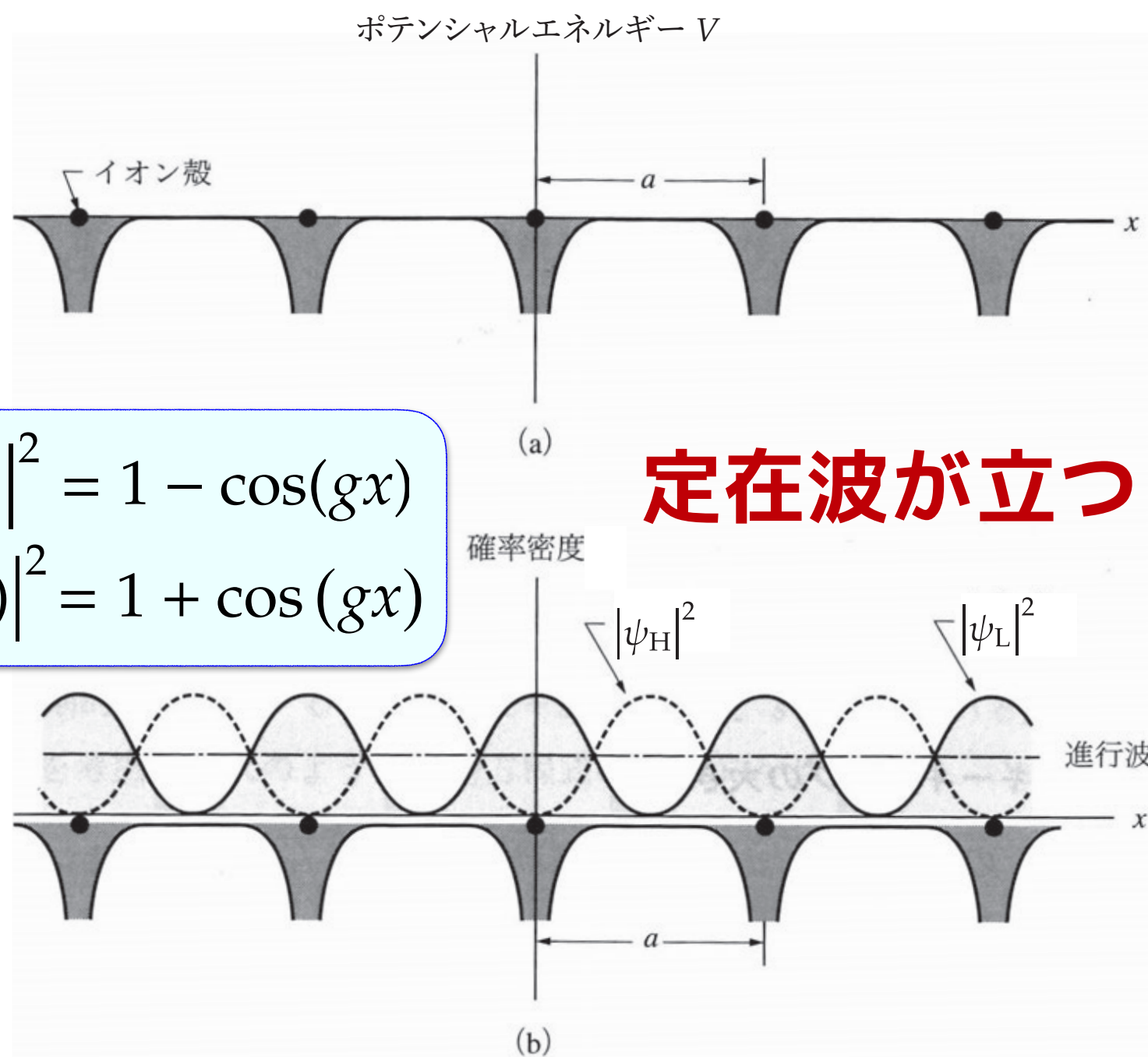
ギャップ端の状態

ツボQ2



$$|\psi_H(x)|^2 = 1 - \cos(gx)$$

$$|\psi_L(x)|^2 = 1 + \cos(gx)$$



定在波が立つ

量子力学の復習

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{縦軸} \\ E = \hbar\omega; \quad \omega = \frac{2\pi}{T} \\ \\ p = \hbar k; \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} \\ \text{横軸} \end{array} \right.$$

波動関数 $\psi(x,t) = e^{i(kx - \omega t)}$

ただし、観測できるのは振幅 $|\psi|^2$ だけ。

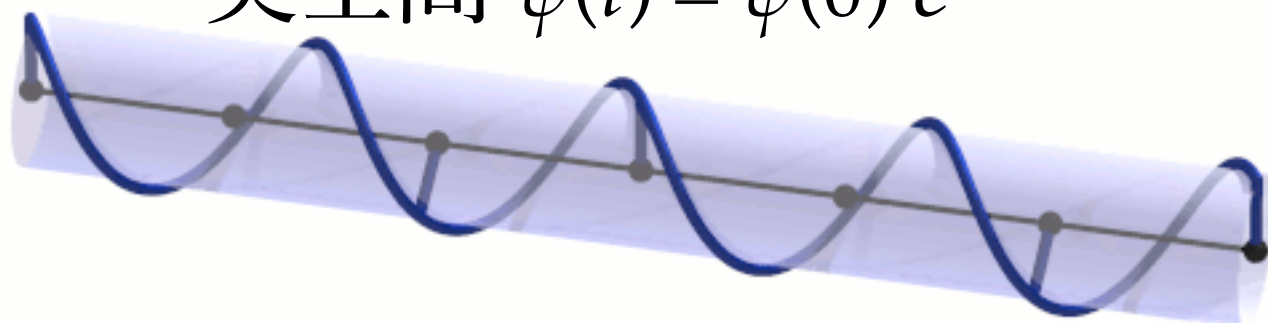
真空中の波動関数 ($V=0$)

実空間 $\psi(t) = \psi(0) e^{-iEt/\hbar}$

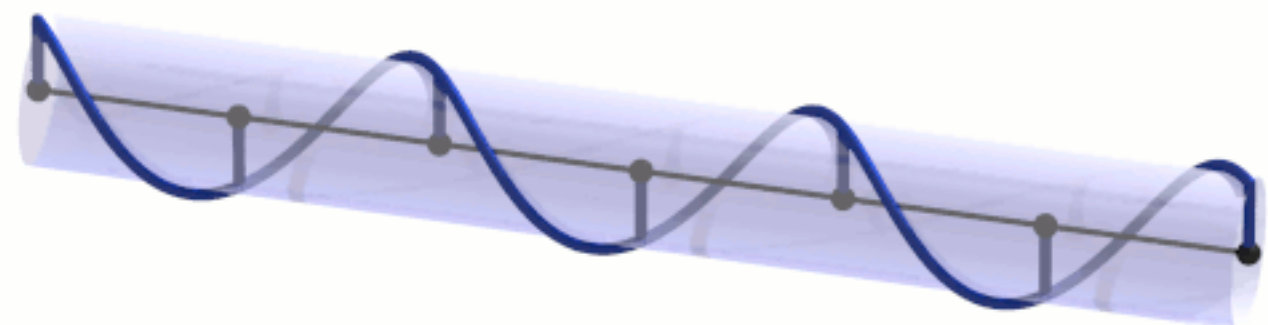
逆空間 $E(k)$

進行波

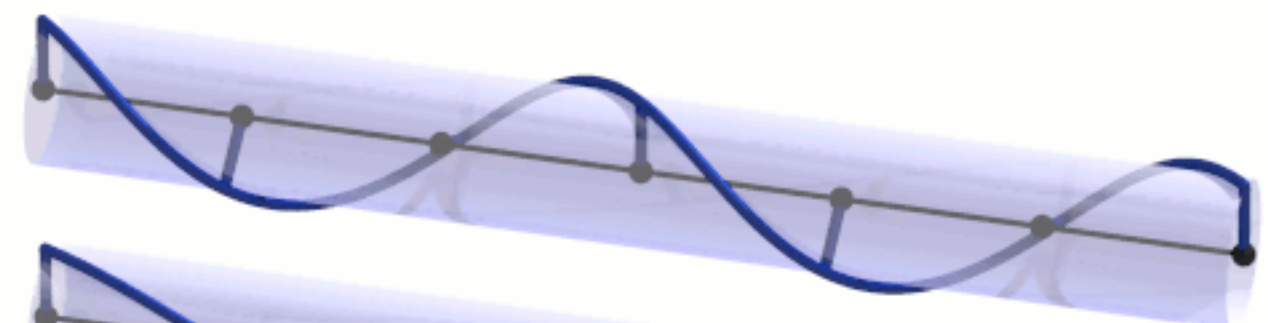
$$k = \frac{4\pi}{3a}$$



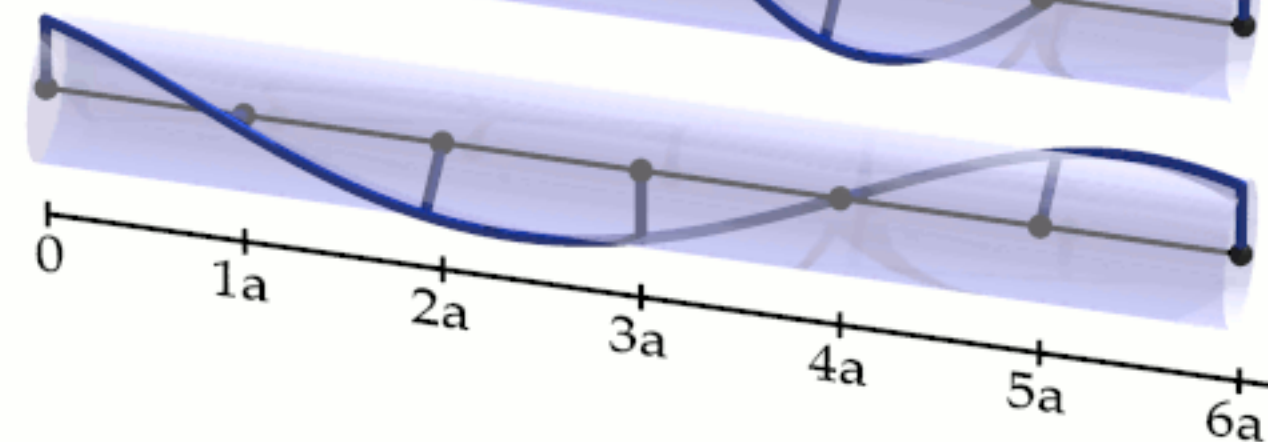
$$k = \frac{\pi}{a}$$



$$k = \frac{2\pi}{3a}$$



$$k = \frac{\pi}{3a}$$



E

e^{ikx}

e^{ikx}

ϵ_k

e^{ikx}

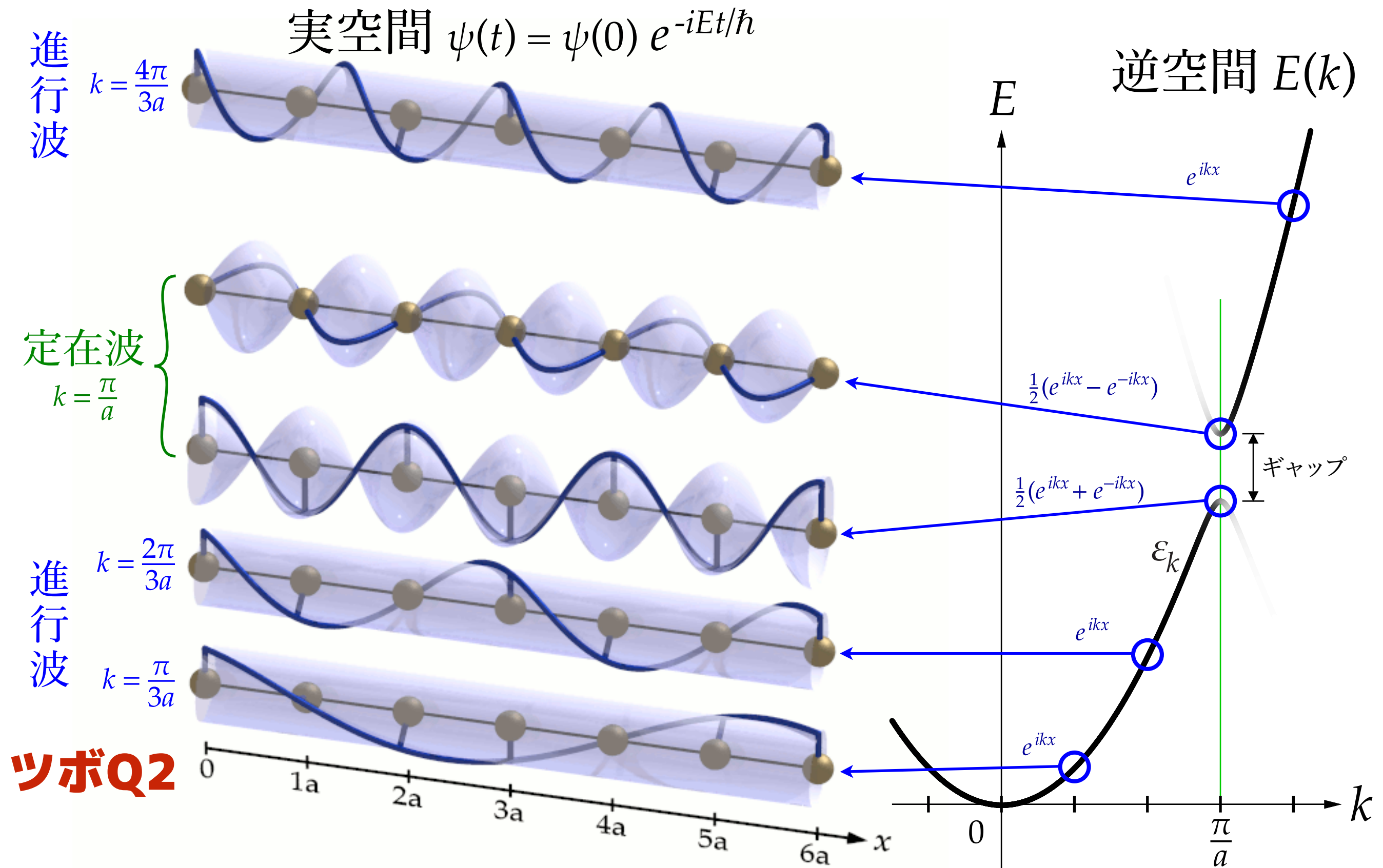
e^{ikx}

0

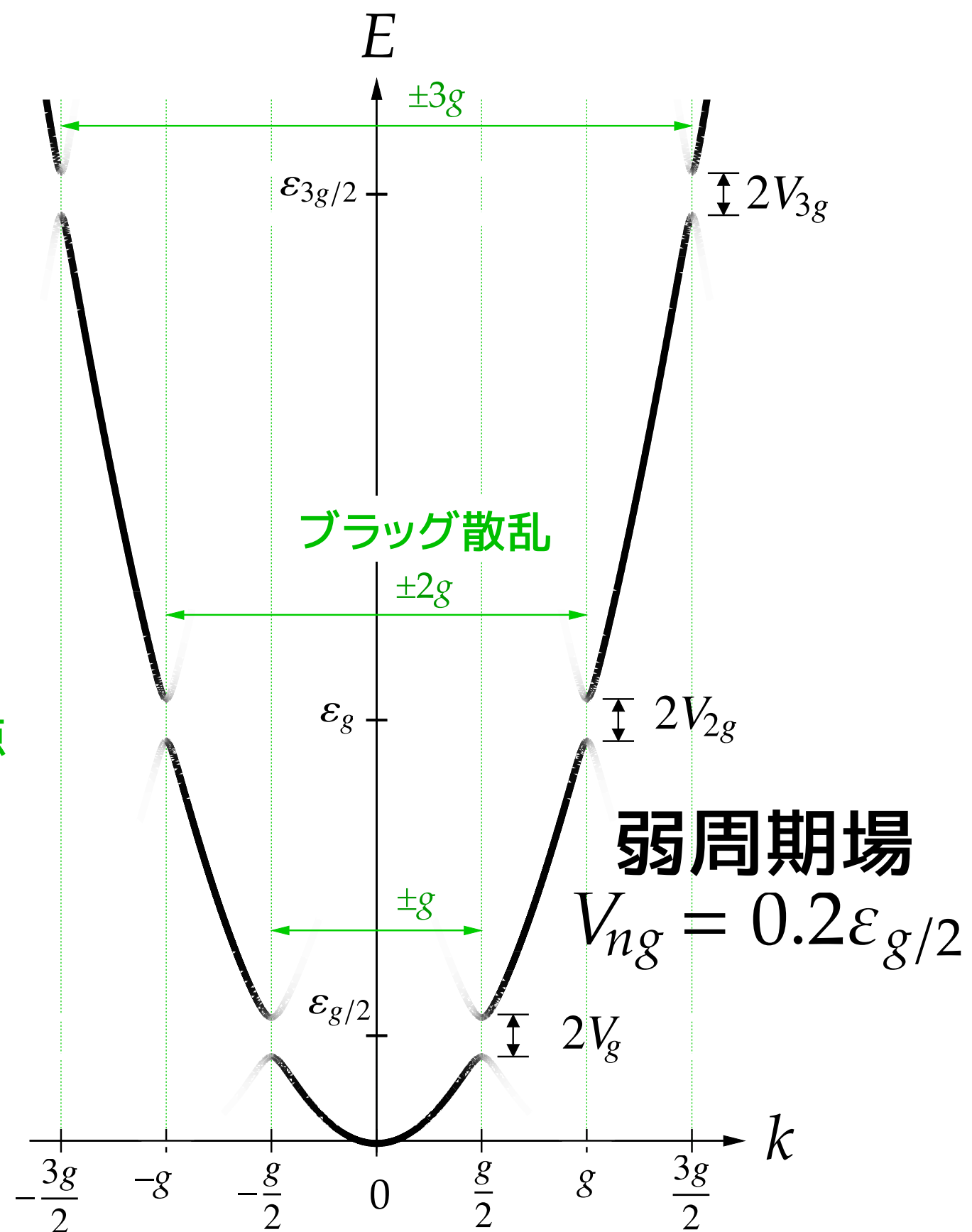
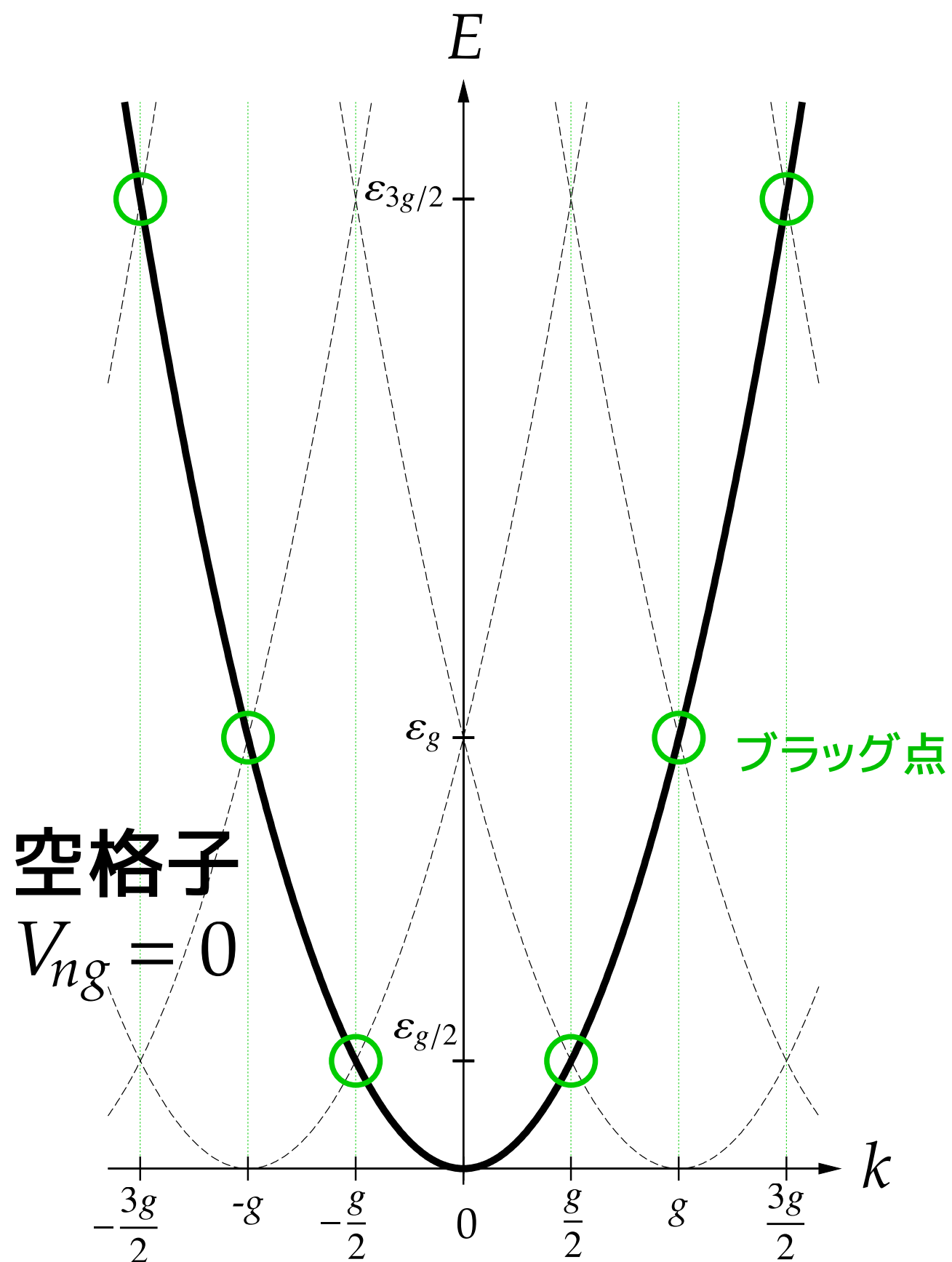
$\frac{\pi}{a}$

k

弱周期場中の波動関数 ($V < 0$)

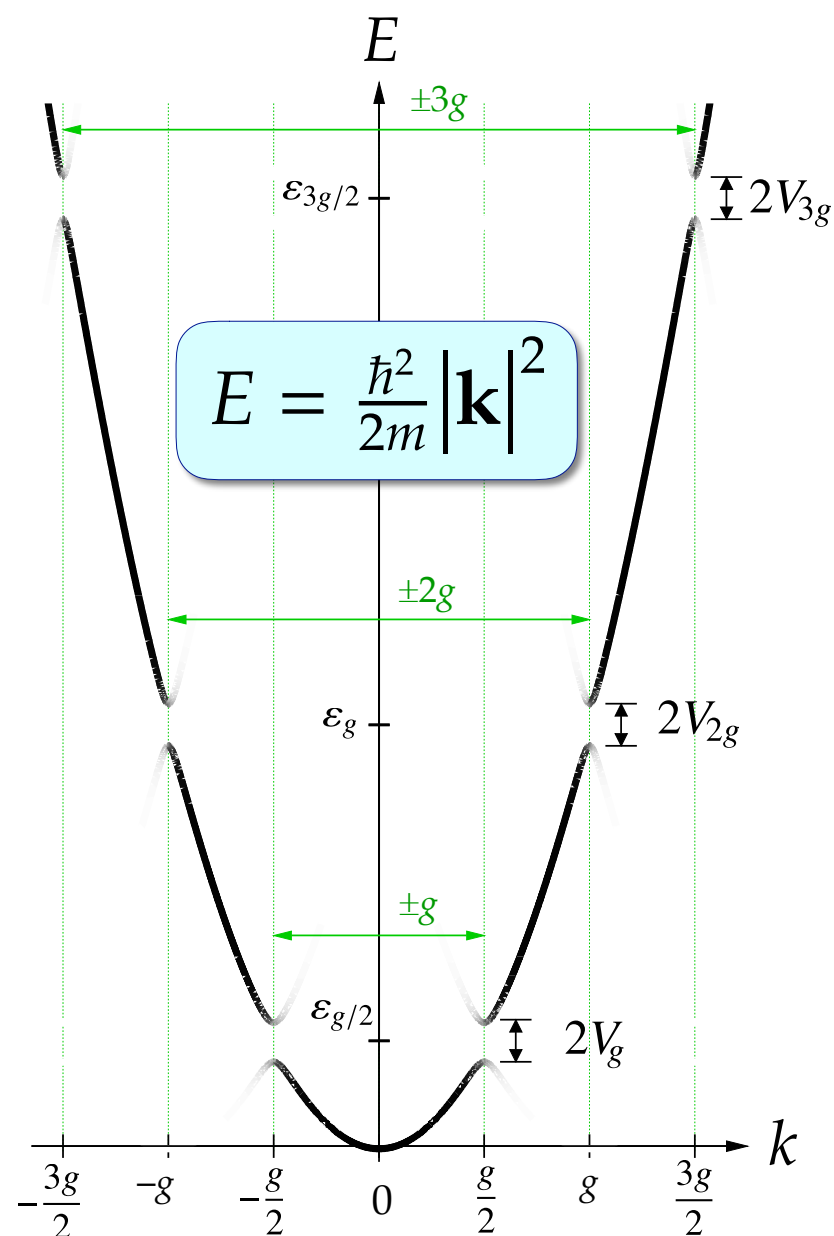


周期場 と 電子構造



3つの表示形式

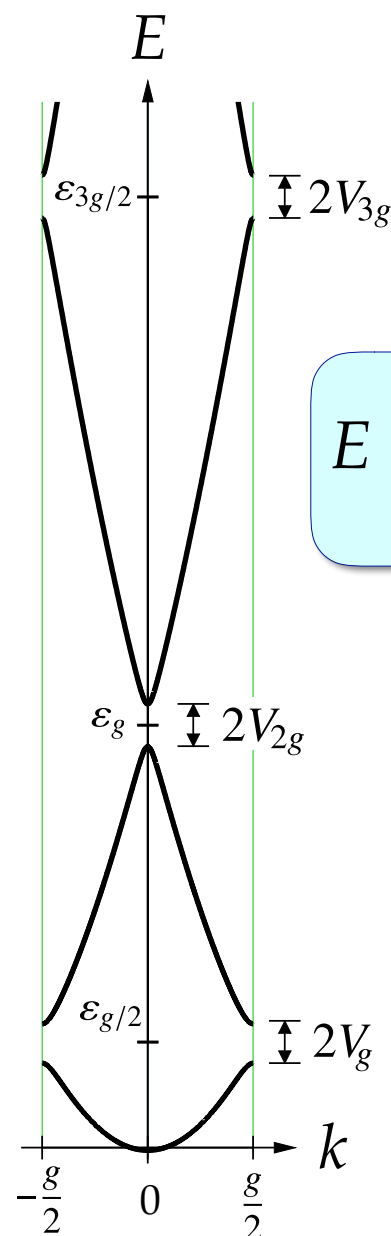
拡張ゾーン形式



区別

波数 $\mathbf{k} \neq \mathbf{k} - \mathbf{G}$

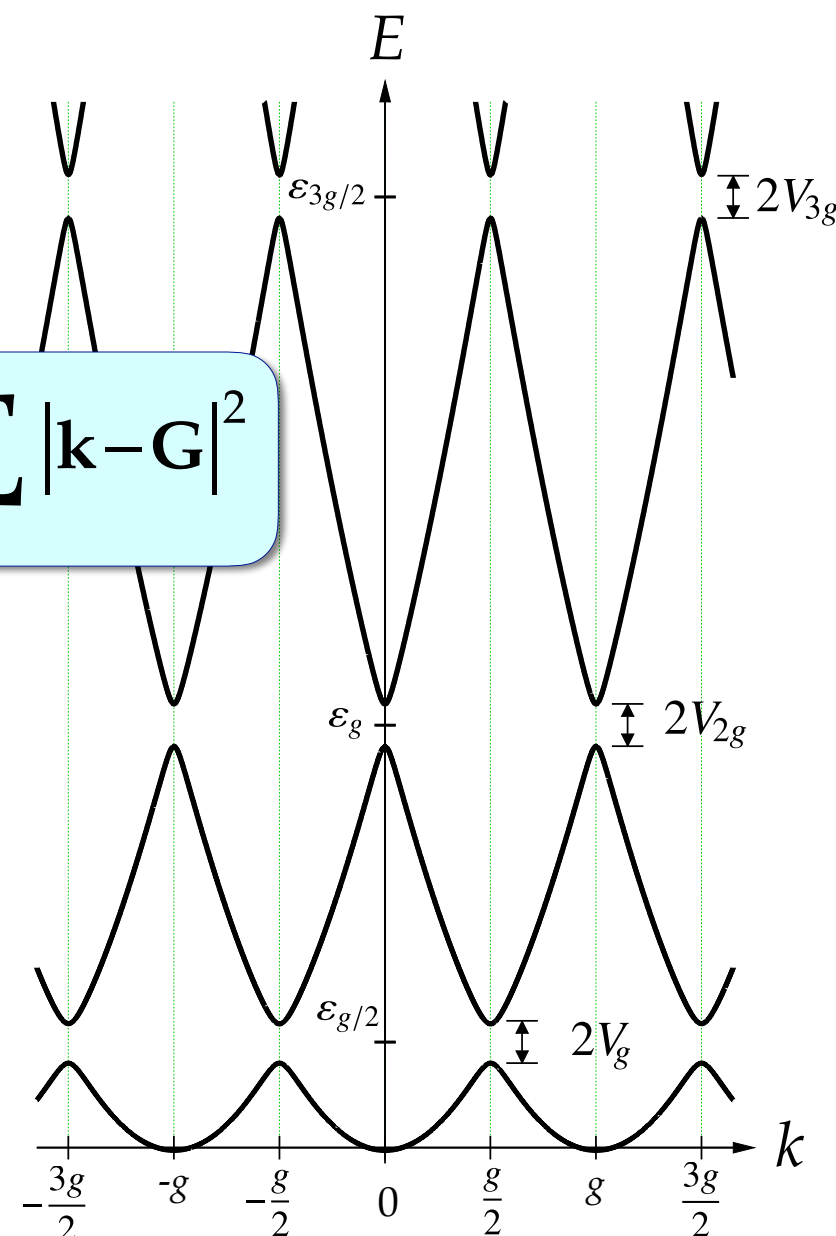
還元ゾーン形式



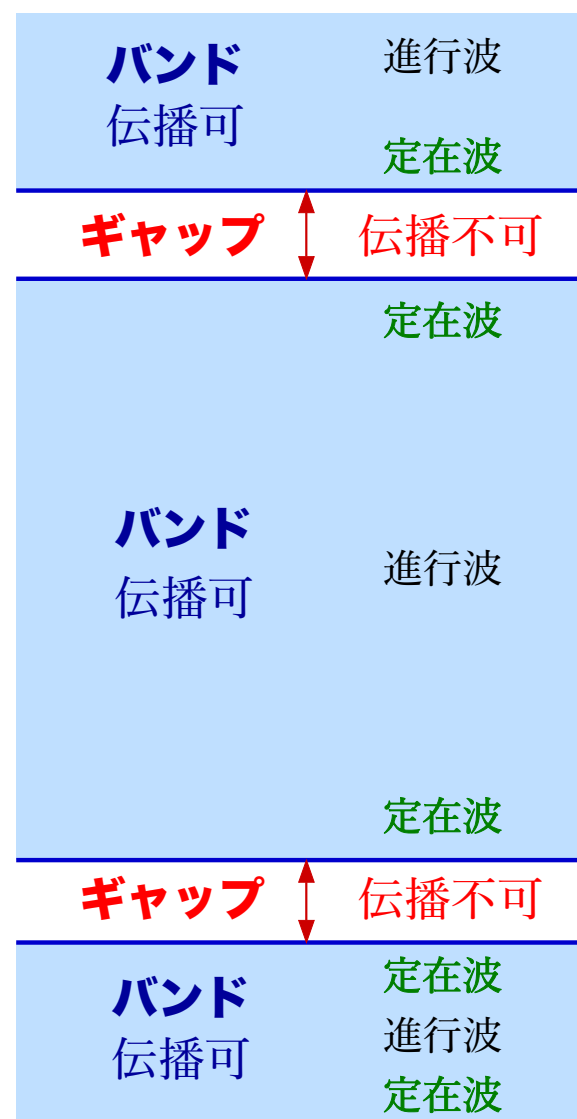
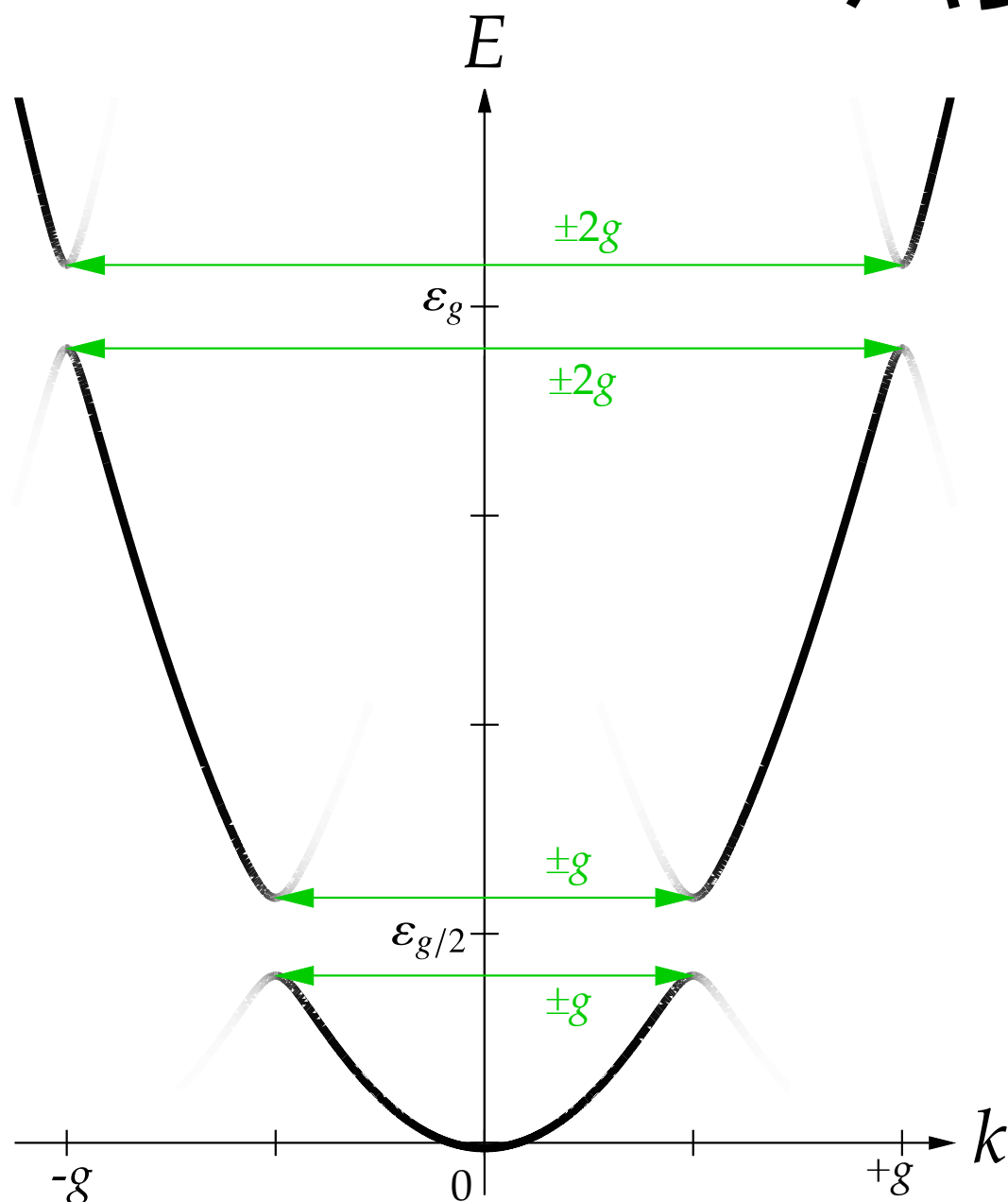
同一視

結晶波数 $\mathbf{k} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{G}$

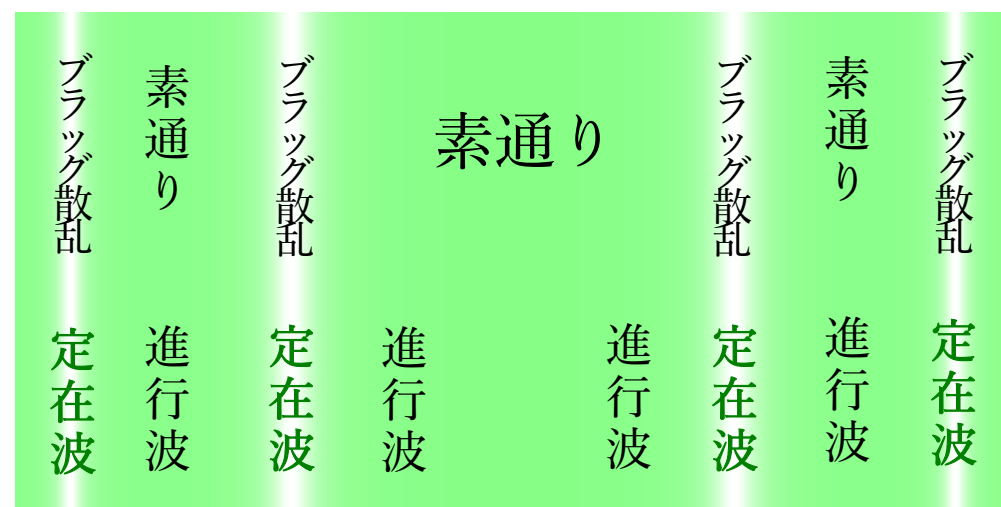
周期ゾーン形式



バンド構造



伝播可能な領域
と
伝播不可な領域



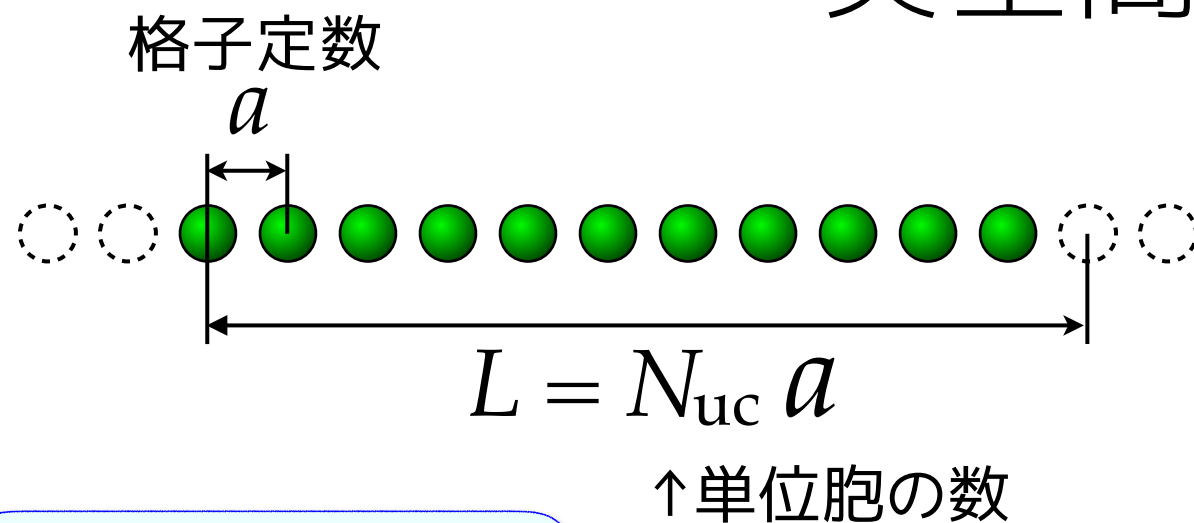
波長が合わねば、**素通り**。

波長が合えば、**定在波**。

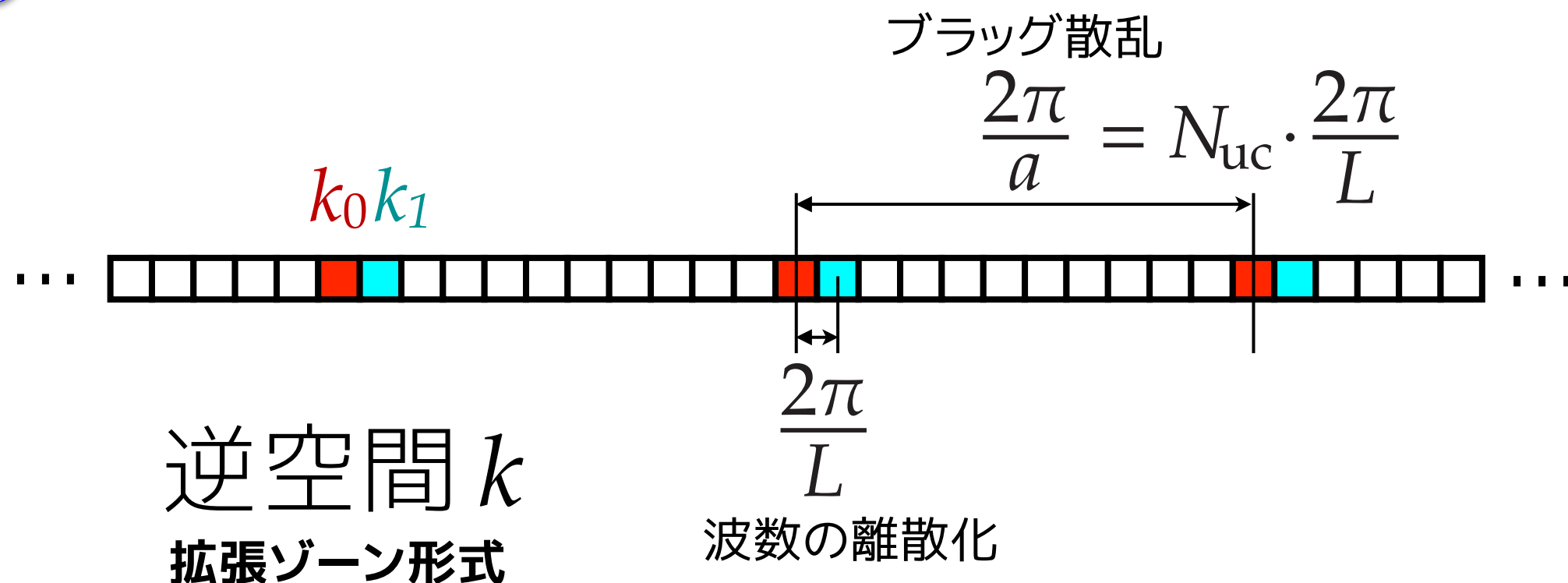
二種類の周期性

周期場 (単位胞)
 $V(x+a) = V(x)$

実空間 x



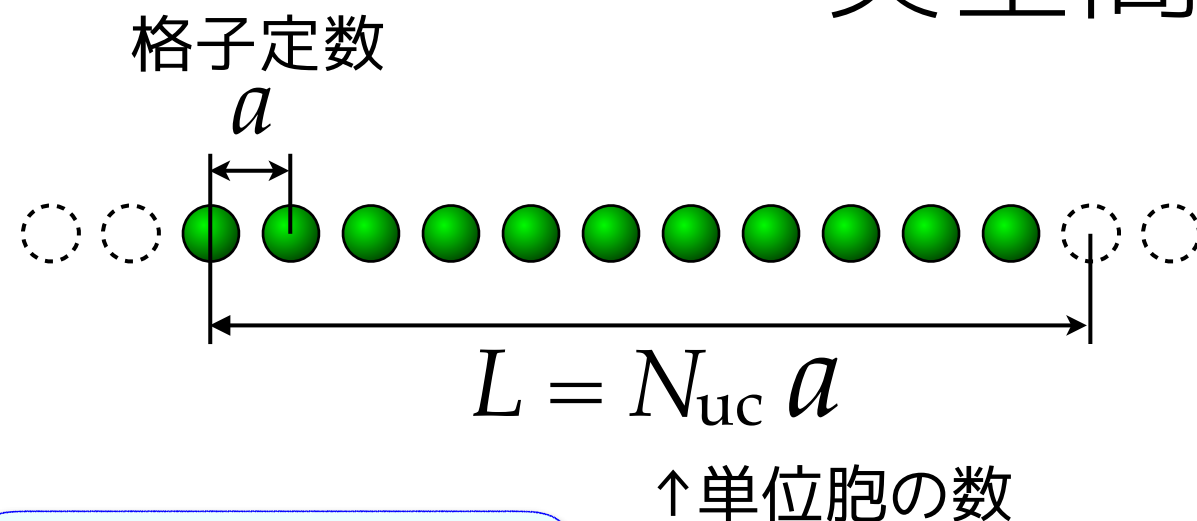
$\psi(x+L) = \psi(x)$
 周期的境界条件



二種類の周期性

周期場 (単位胞)
 $V(x+a) = V(x)$

実空間 x

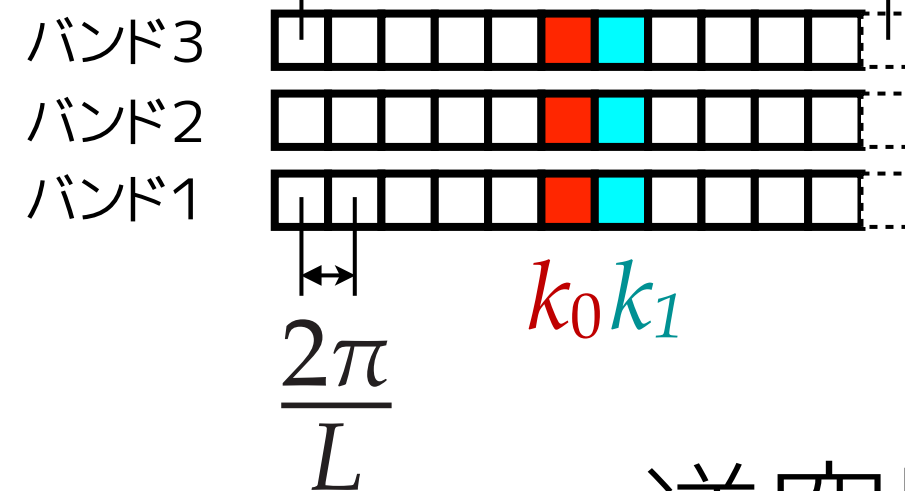


$\psi(x+L) = \psi(x)$
 周期的境界条件

1つのバンドは、BZ全体で
 $2N_{uc}$ 個の電子を収容する

ブリルアン・ゾーン (BZ)

$$\frac{2\pi}{a} = N_{uc} \cdot \frac{2\pi}{L}$$



波数の離散化

逆空間 k
 還元ゾーン形式

電子の収容数

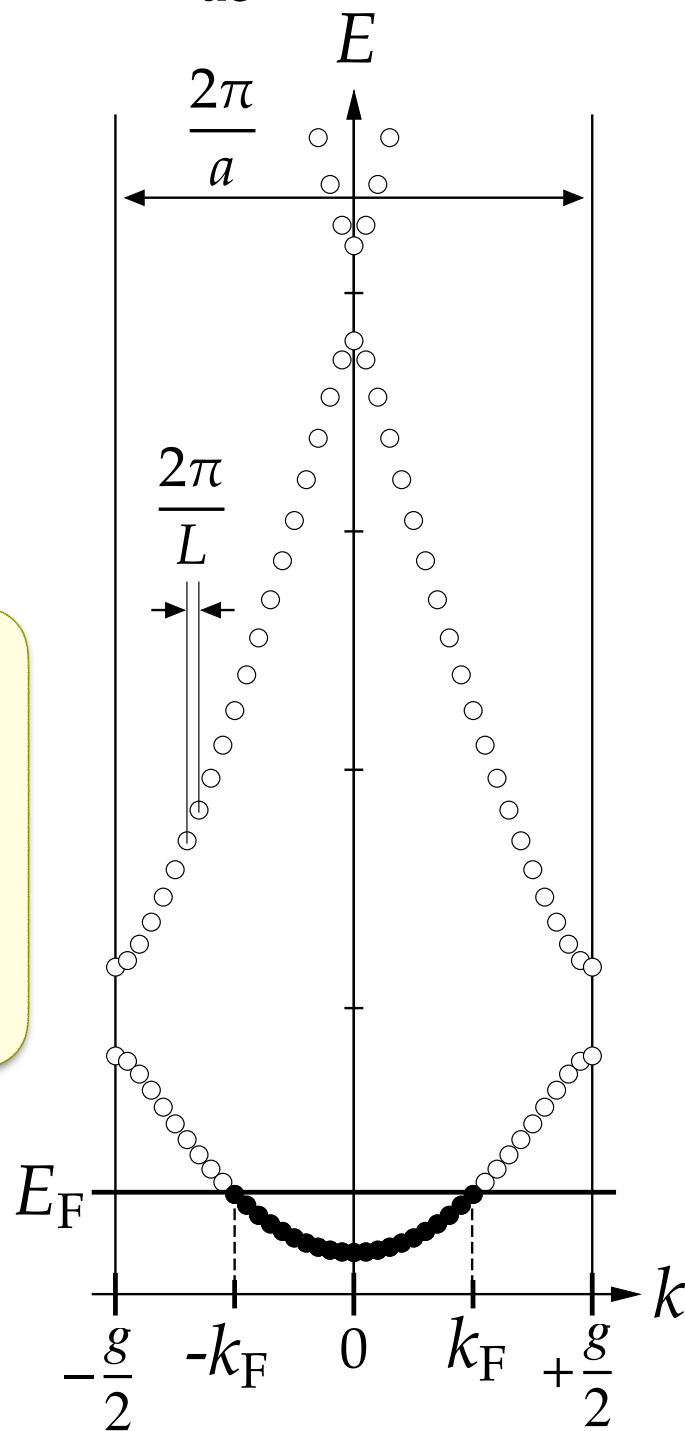
(a) $\frac{N_e}{N_{uc}} = 1$, 半占有

(b) $\frac{N_e}{N_{uc}} = 2$, 全占有

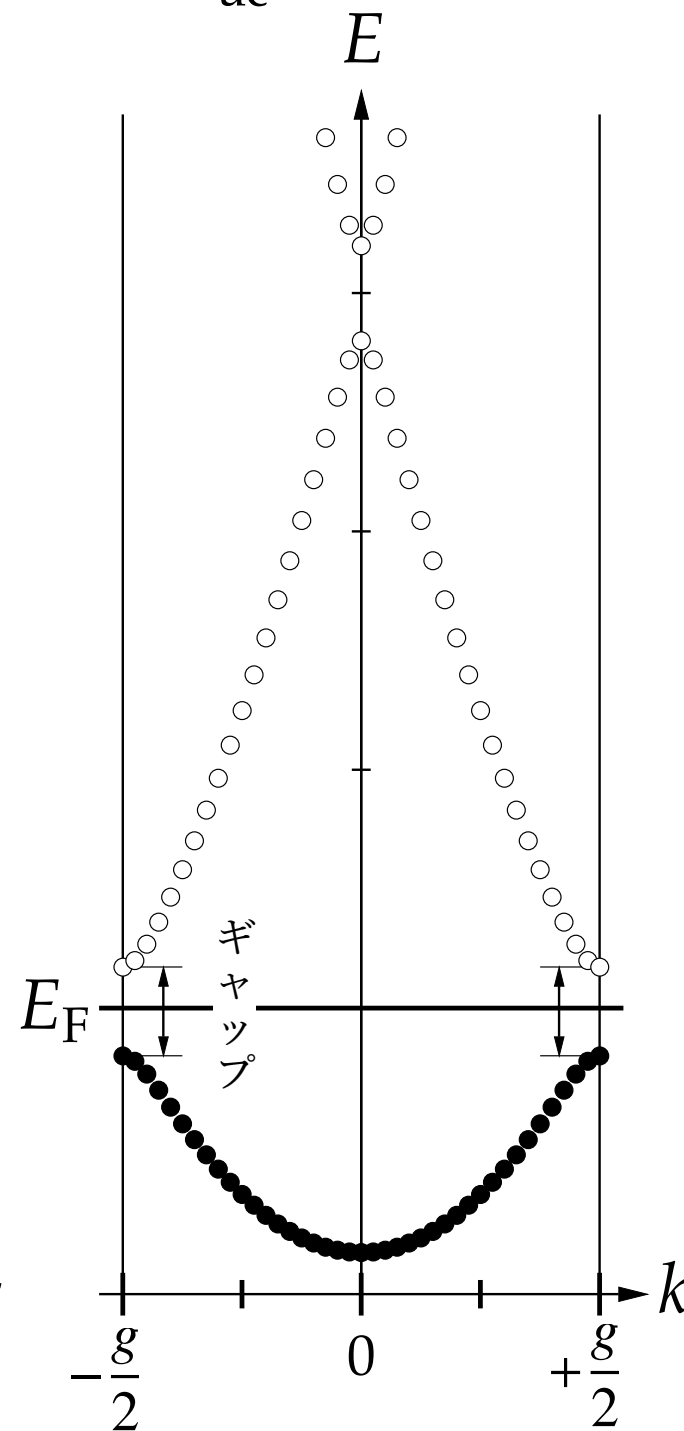
(c) $\frac{N_e}{N_{uc}} = 3$, 半占有

バンド1本の
電子収容数

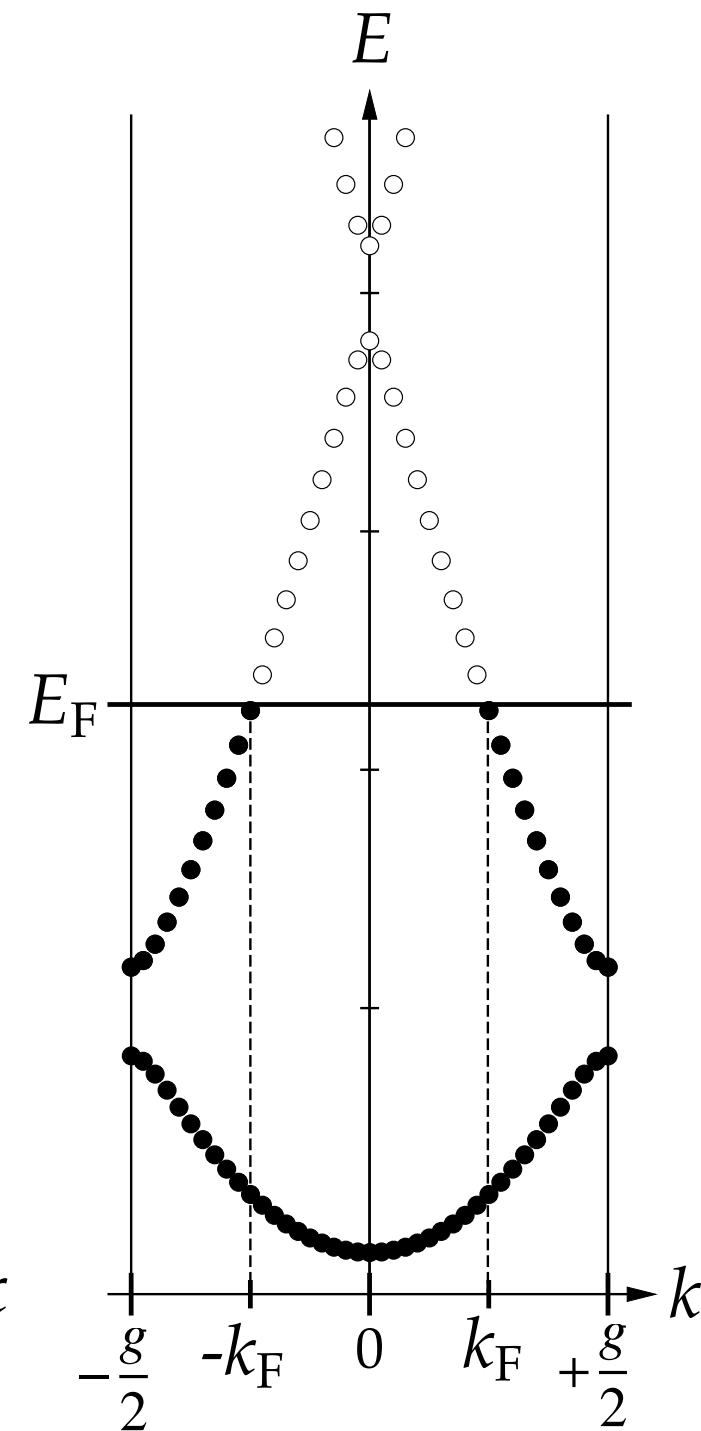
$$2N_{uc}$$



金属



絶縁体



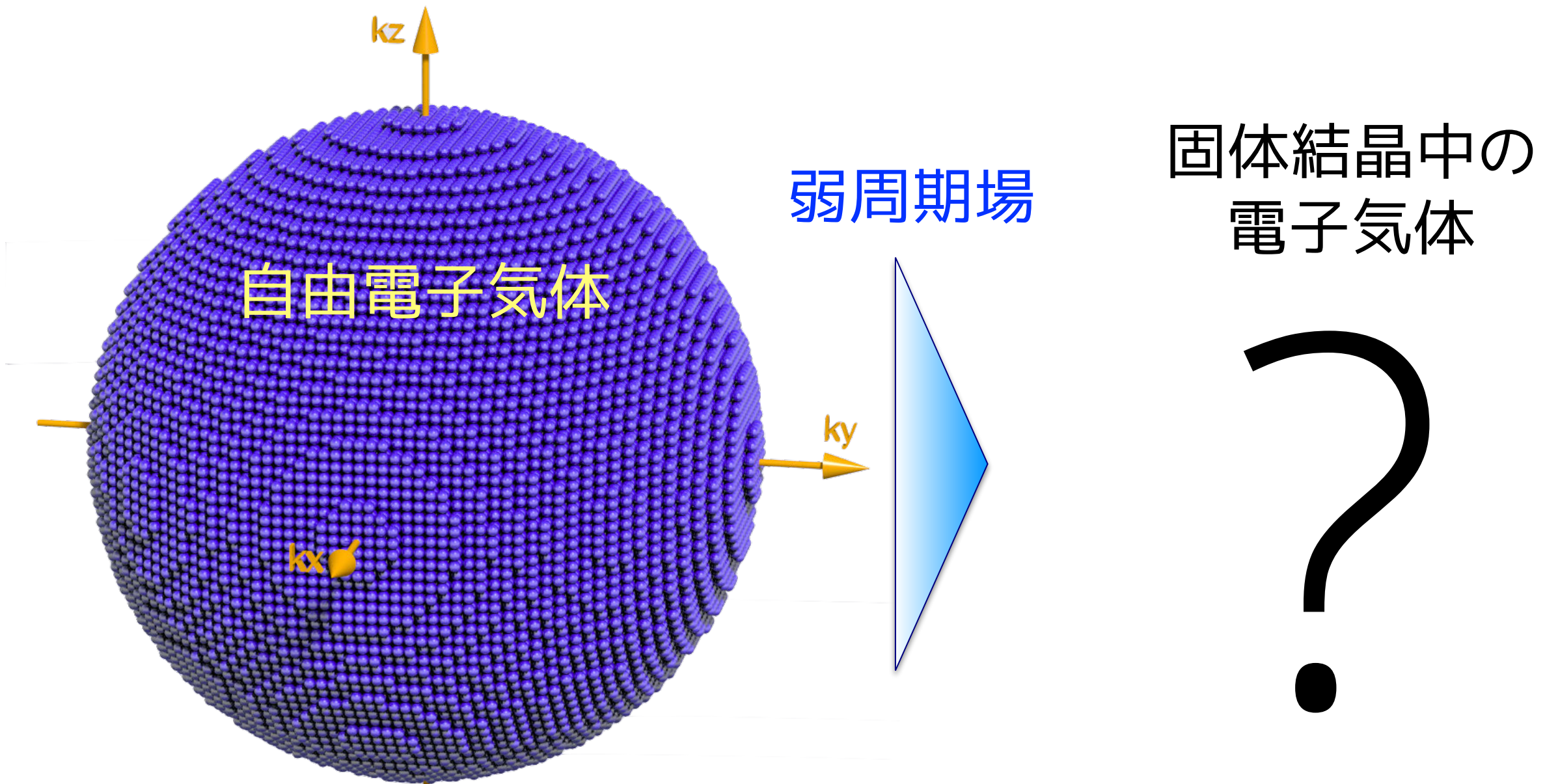
金属

まとめ

~~ バンド理論 ~~

1. ブラッグ散乱を取り込んだ **ブロッホ状態** が固有状態。
結晶運動量が保存 する。周期場は電気抵抗を生じない。
2. 電子の **波長** が、周期場と合わなければ、**素通り**。
周期場と一致すると、散乱を繰り返して、**定在波** に。
3. **エネルギー** によって、電子の波が伝播可能な **バンド** と、
伝播不可な **ギャップ** に分かれる。
4. 単位胞あたりの電子数の **偶奇** が重要。

残された謎



物性現象は
フェルミ面上で
起きている

今日の話は、次元が低すぎる。

結晶の向きによって、バンド構造が違わず。

次回

二次元が好き

第8講 電子構造の異方性

次回

三次元も気になる

第8講 電子構造の異方性