

固体物理学1

第8講

電子構造の異方性

~~ ブラッグ面 と フェルミ面 ~~

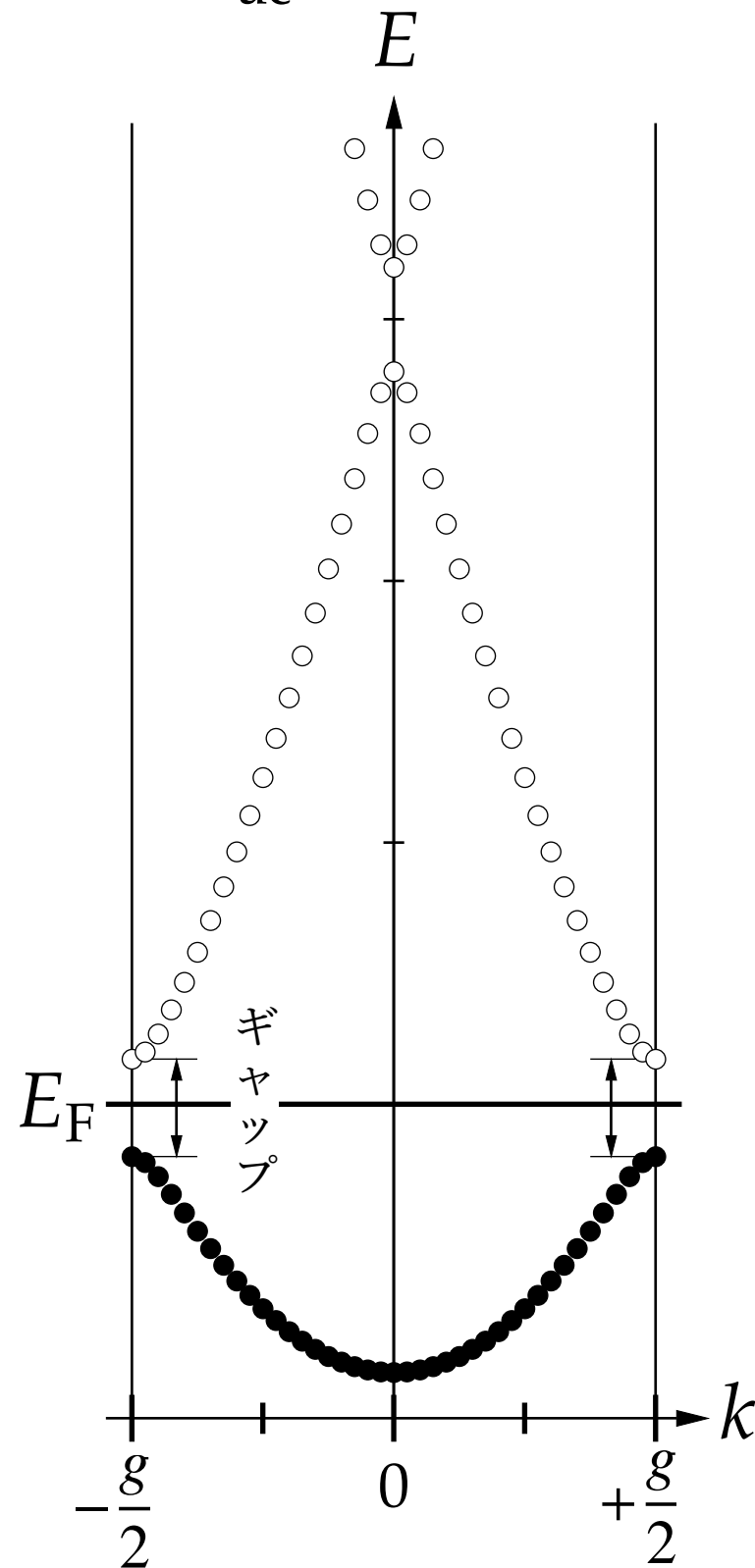
広島大学 井野明洋

居室：理D205、放射光セ408

実 験 事 実

金属と絶縁体

(b) $\frac{N_e}{N_{uc}} = 2$, 全占有



fcc、+2価 ($N_e/N_{uc} = 2$): **Ca, Sr, Ba**

fcc、+4価 ($N_e/N_{uc} = 4$): **Pb**

hcp、+2価 ($N_e/N_{uc} = 4$): **Be, Mg, Zn, Cd**

dia、+4価 ($N_e/N_{uc} = 8$): **C, Si, Ge**

絶縁体 (半導体)

金属

電子数が偶数でも、
絶縁体と金属に分かれる。

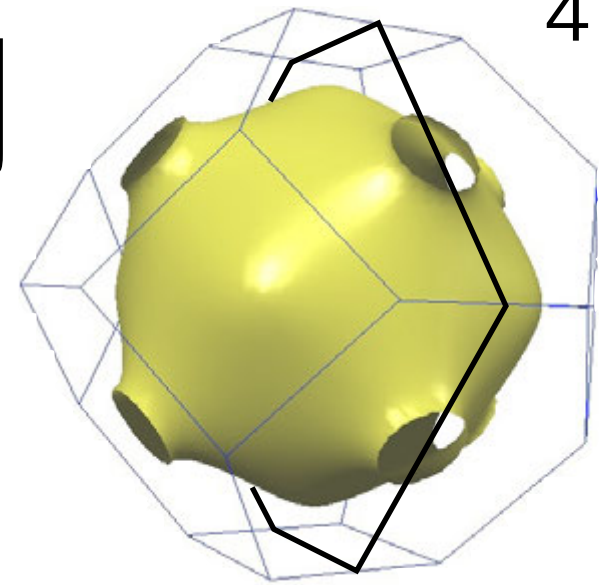
電子構造の異方性を
考える必要がある。



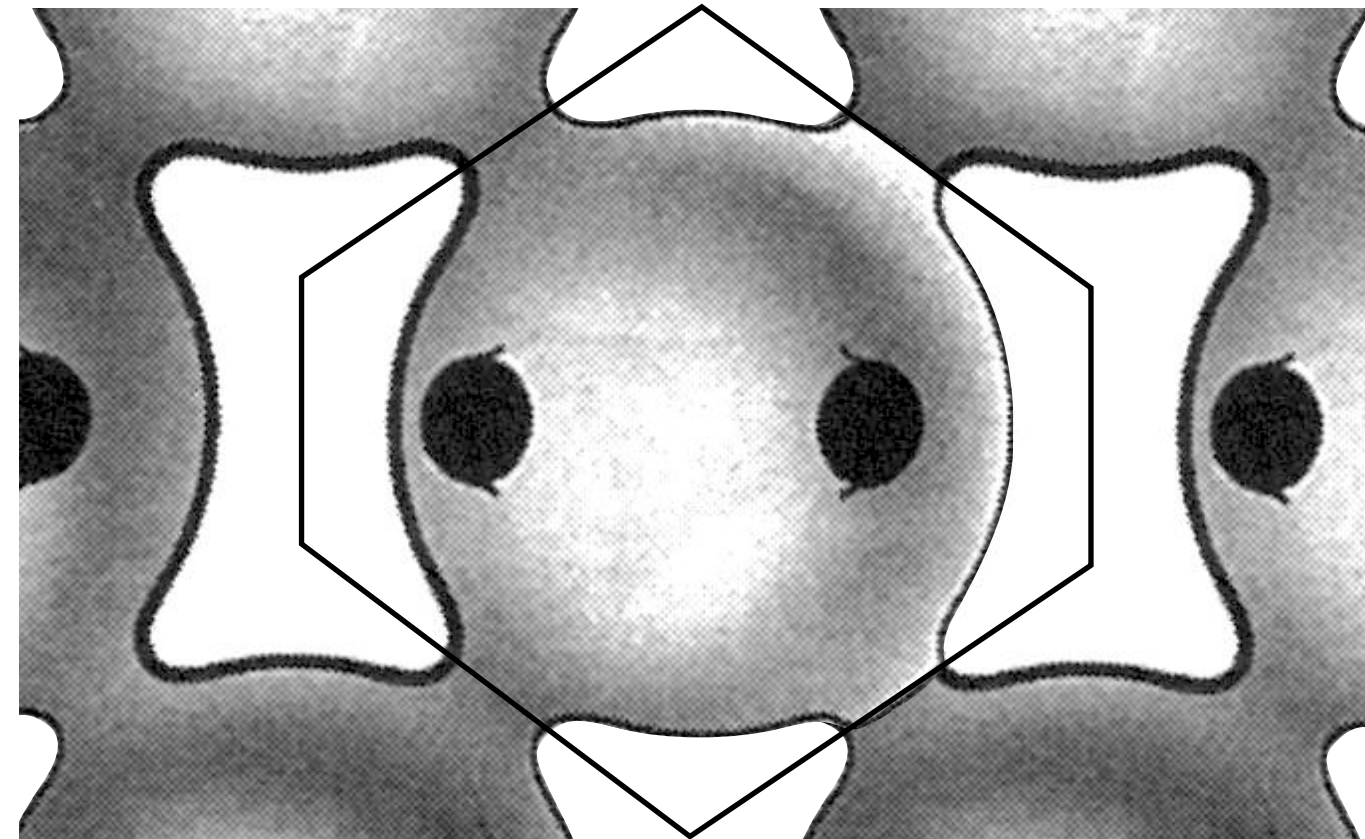
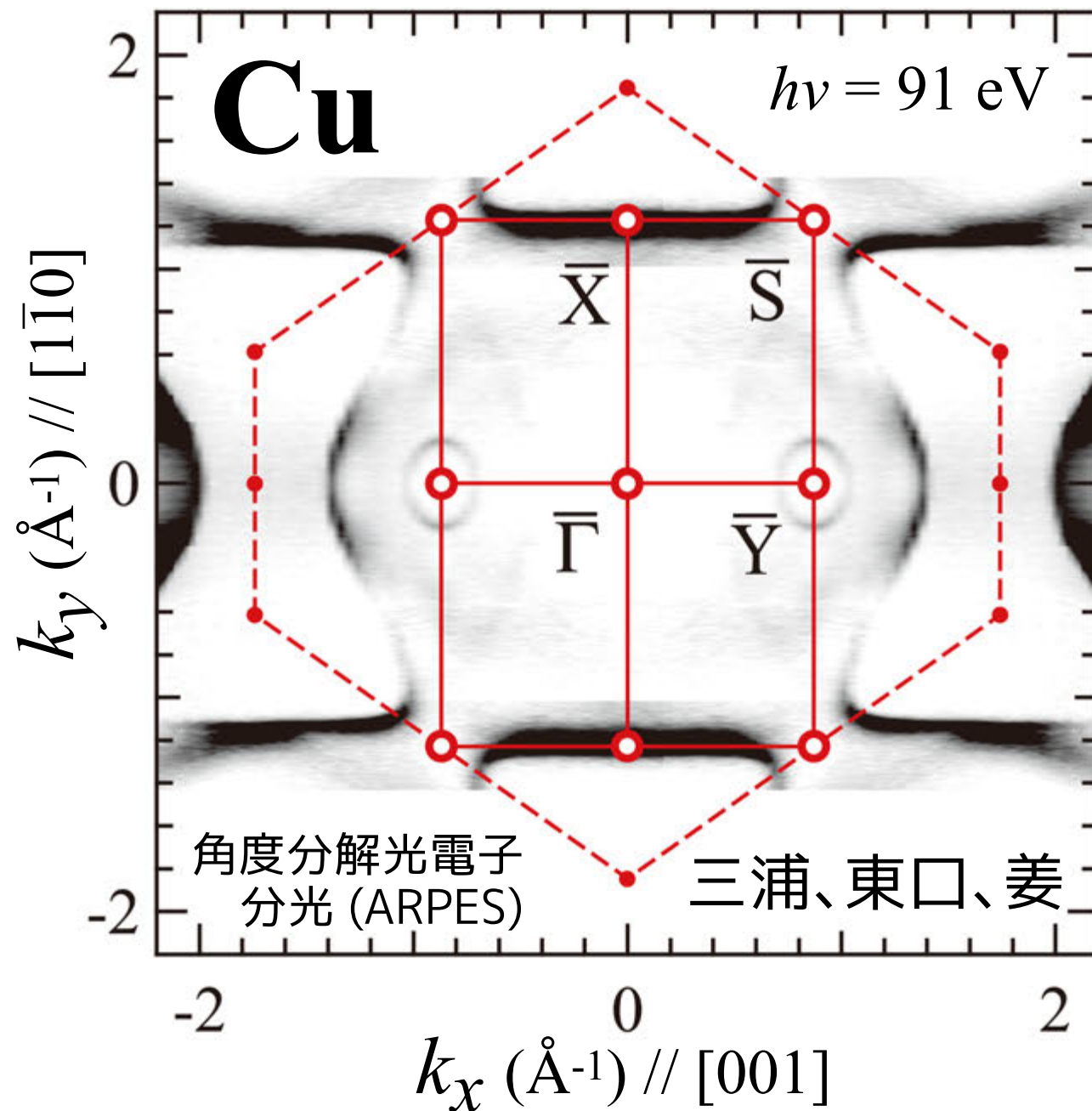
HiSOR (BL-1)

銅のフェルミ面の観測

4



通称 “犬の骨” (dog's bone)



キッテルより引用

完全な球ではない !!

提供: 島田賢也 教授

典型金属と貴金属のフェルミ三面

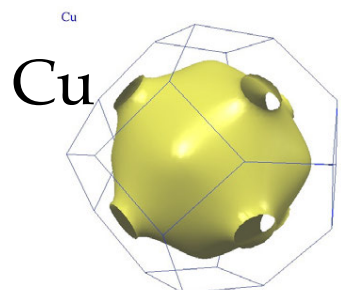
T.-S. Choy, J. Naset, S. Hershfield, C. Stanton, and J. Chen

<http://www.phys.ufl.edu/fermisurface> より引用。

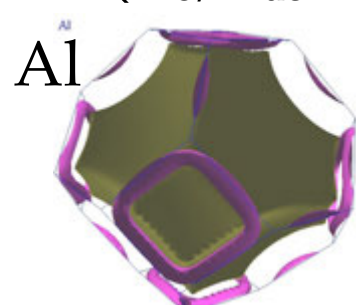
実験値を理論曲線でフィッティング

なぜこうなるのか？

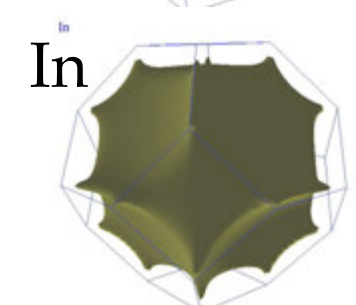
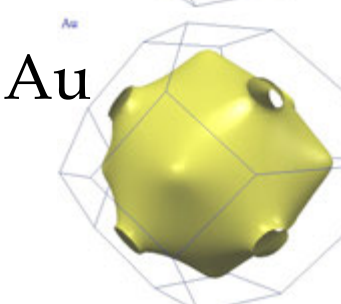
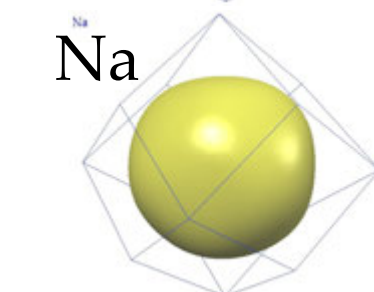
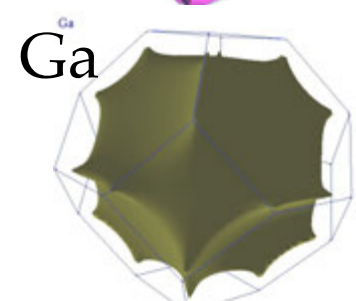
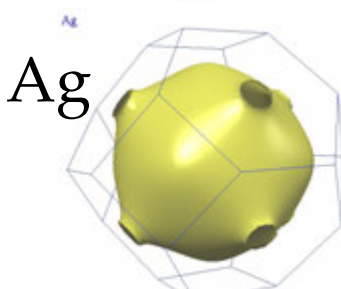
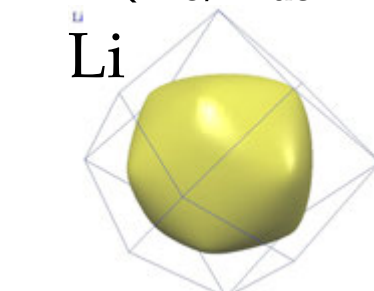
fcc ($N_e/N_{uc}=1$)



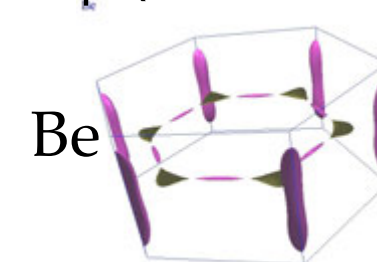
fcc ($N_e/N_{uc}=3$)



bcc ($N_e/N_{uc}=1$)



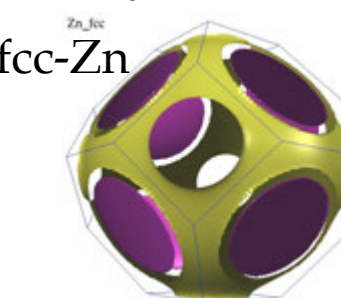
hcp ($N_e/N_{uc}=4$)



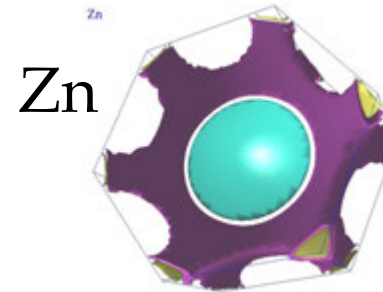
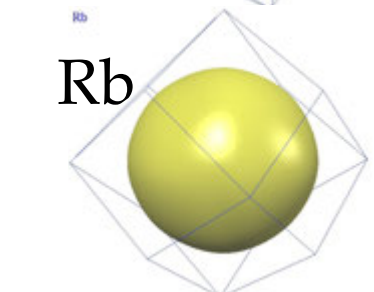
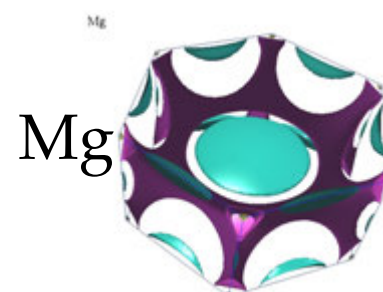
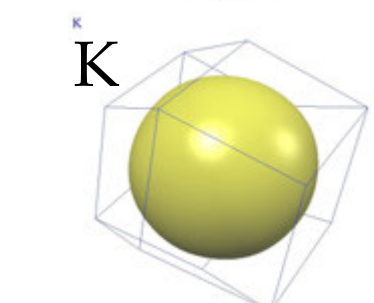
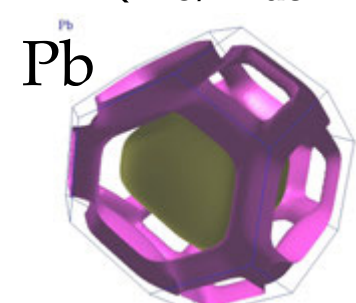
• 規則性？

• 球面の名残？

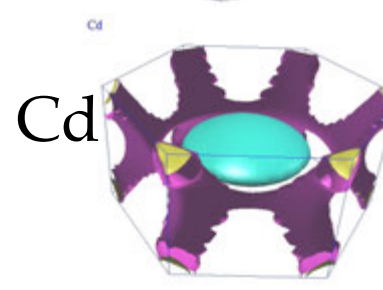
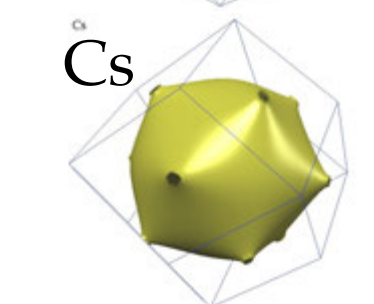
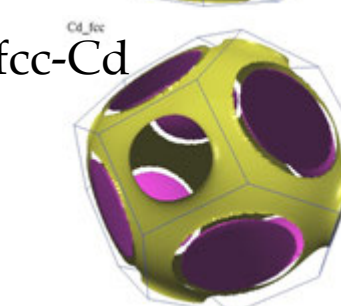
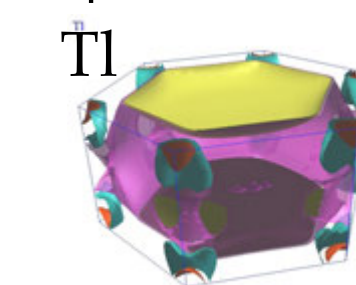
fcc ($N_e/N_{uc}=2$)



fcc ($N_e/N_{uc}=4$)



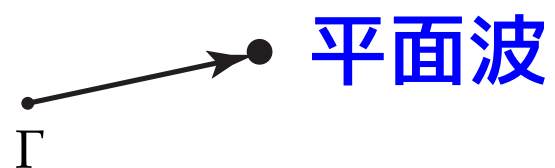
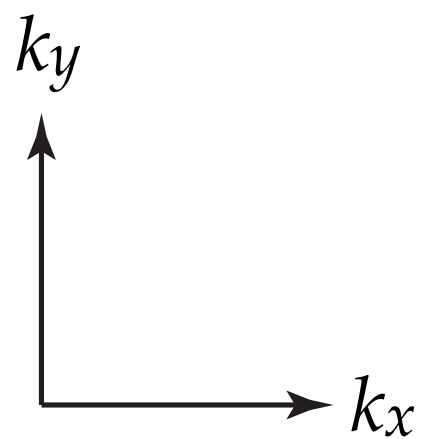
hcp ($N_e/N_{uc}=6$)



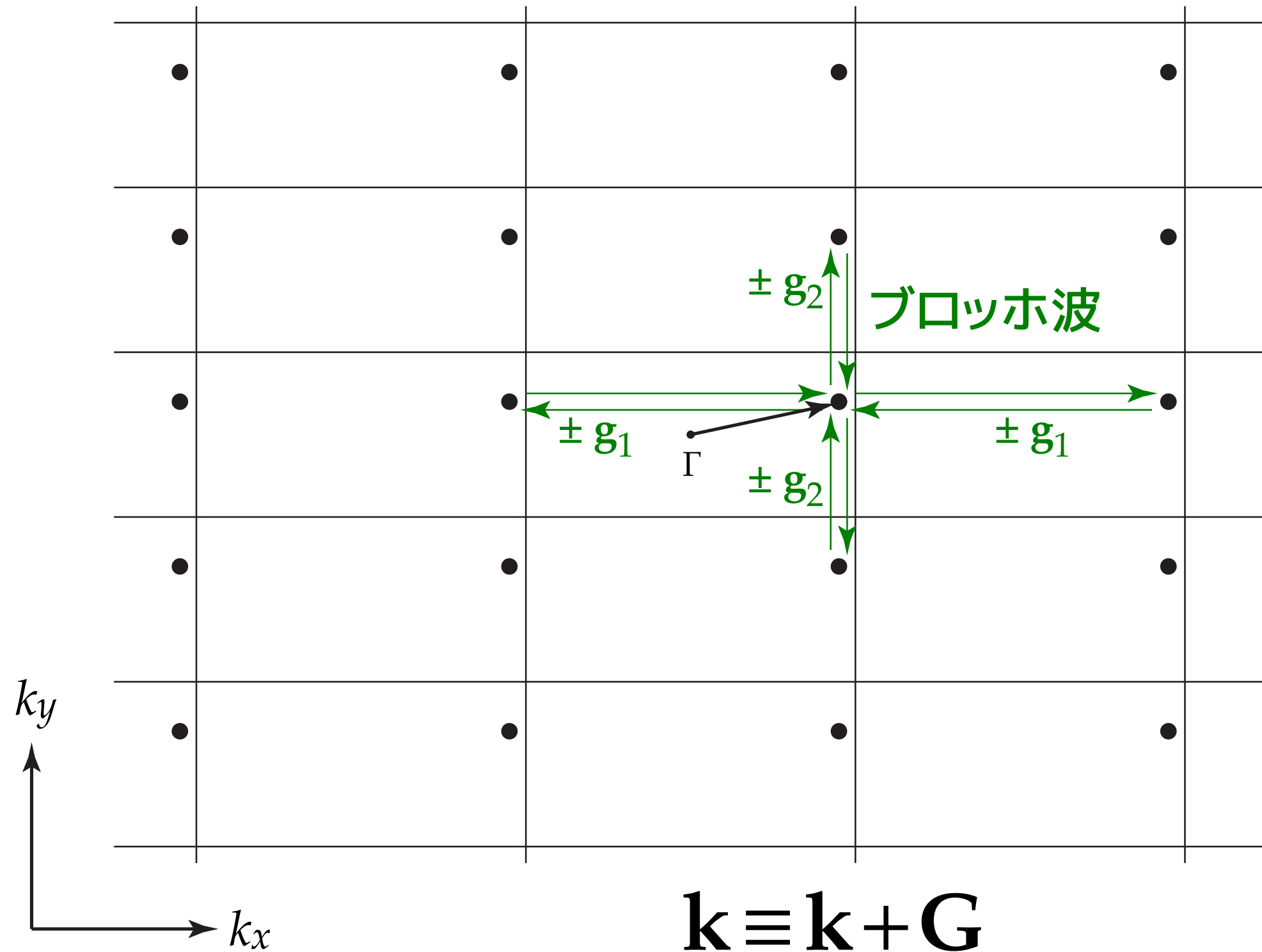
課題

フェルミ面と
バンド構造の異方性を
理解したい!!!

真空中



結晶中



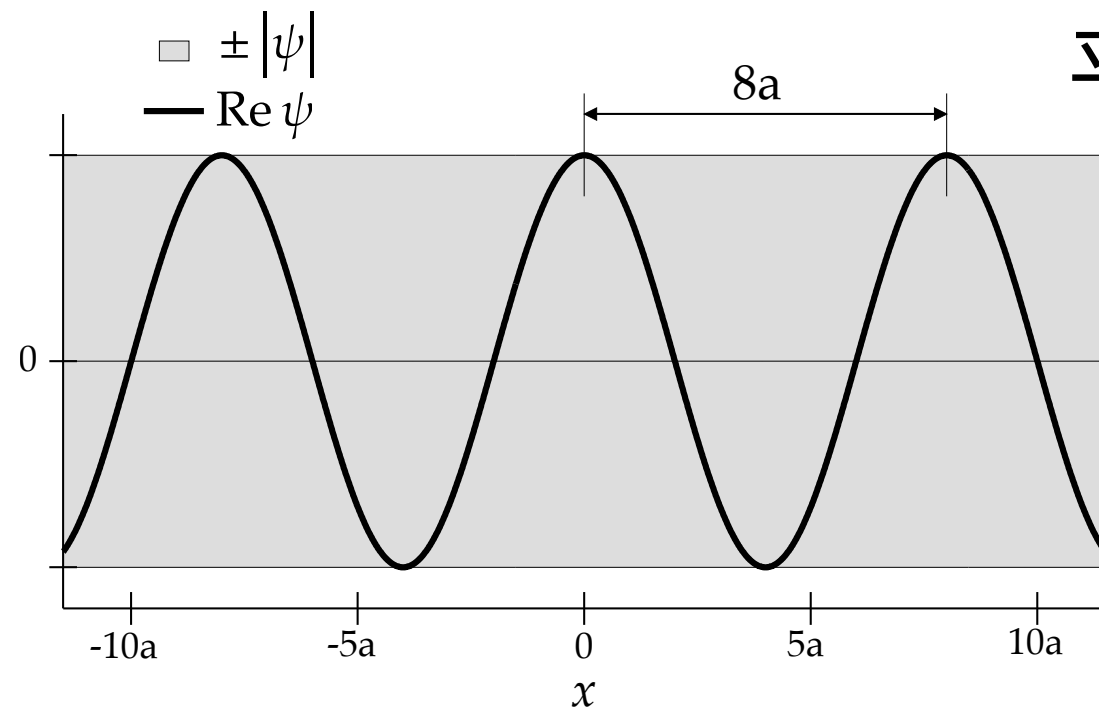
逆格子に従って周期的に折りたたまれる

方針

波数空間を 折りたたむため

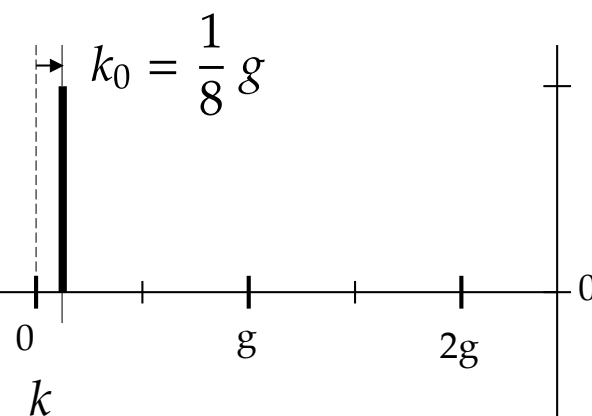
- Bragg 面 と Fermi面
- Nearly-Free-Electron 模型

平面波

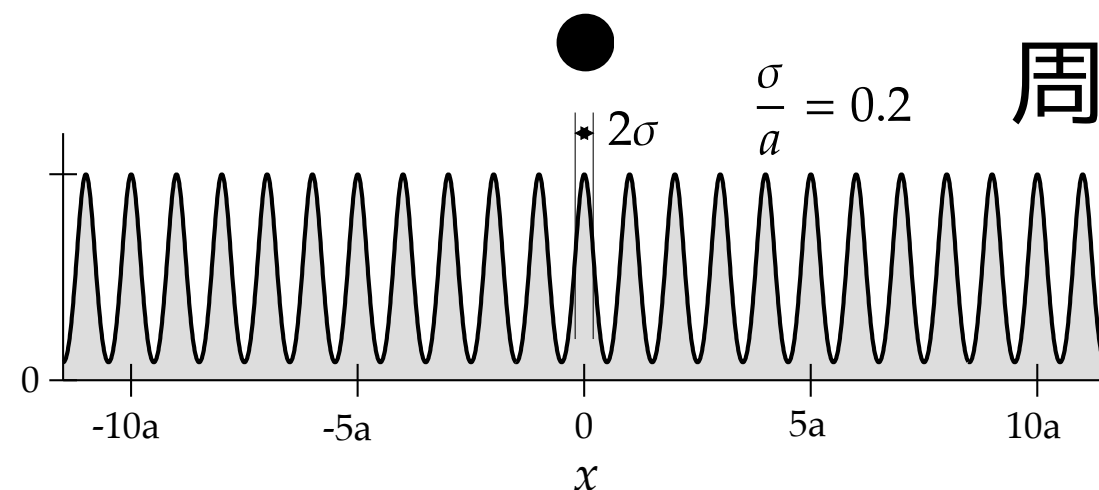


FT

真空中



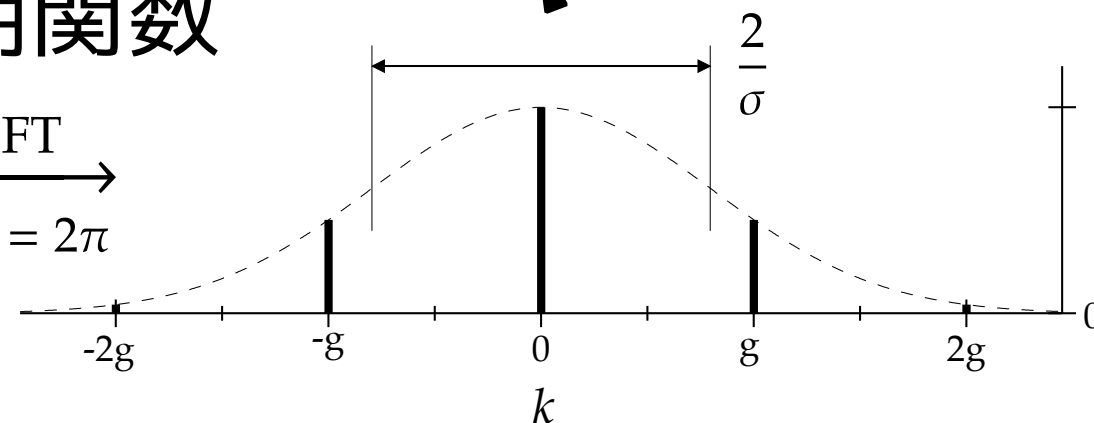
周期関数



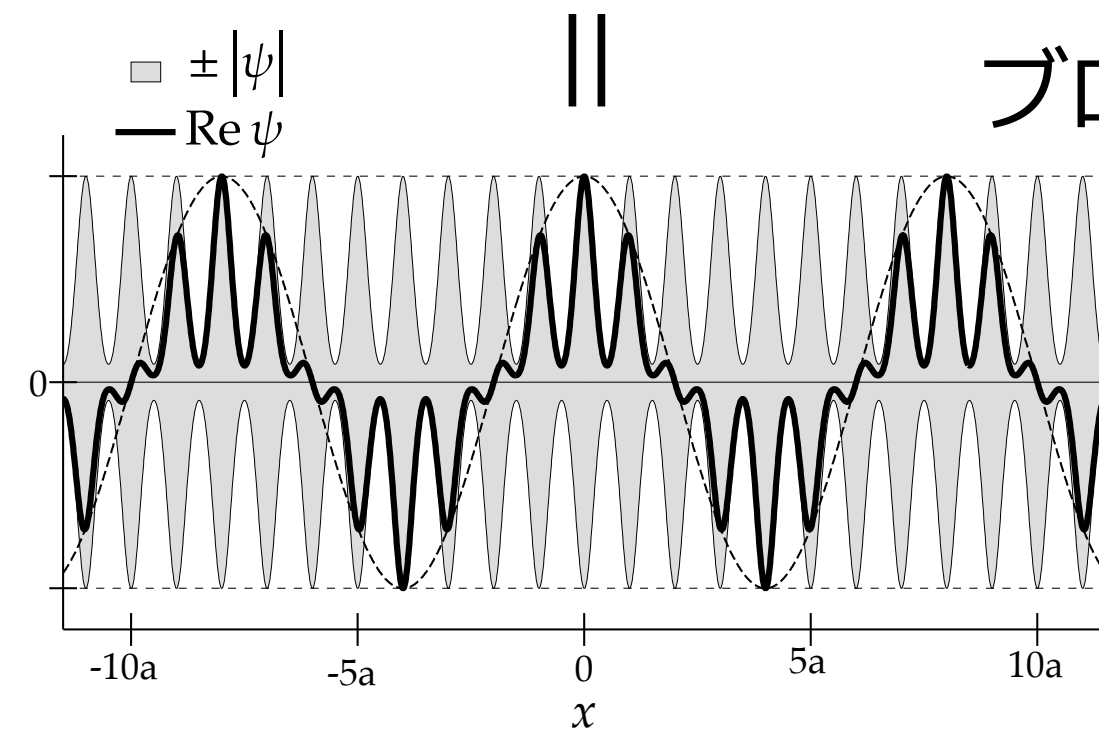
FT

 $ga = 2\pi$

*



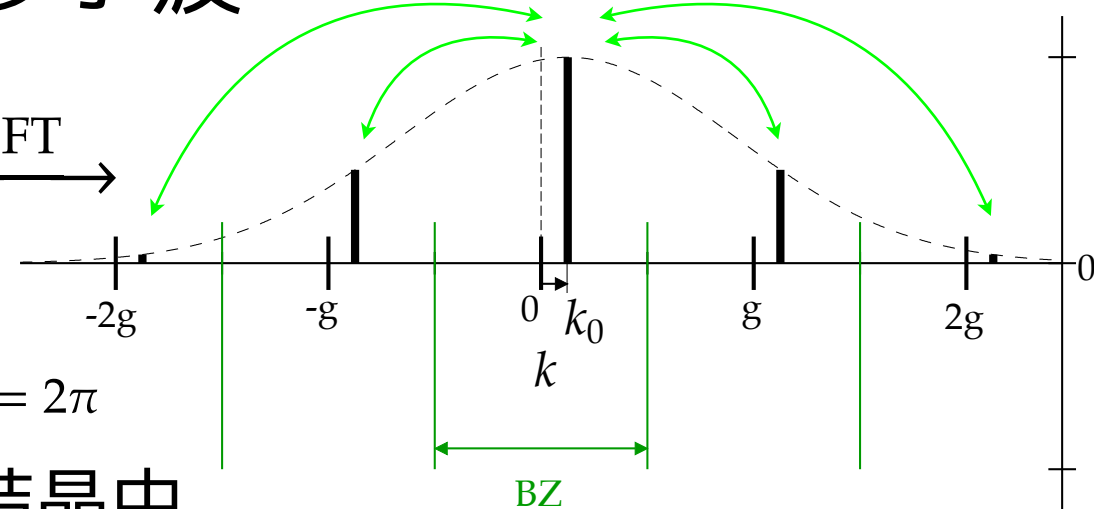
ブロッホ波



FT

 $ga = 2\pi$

結晶中

ブラッグ散乱
 $\pm g$

逆空間

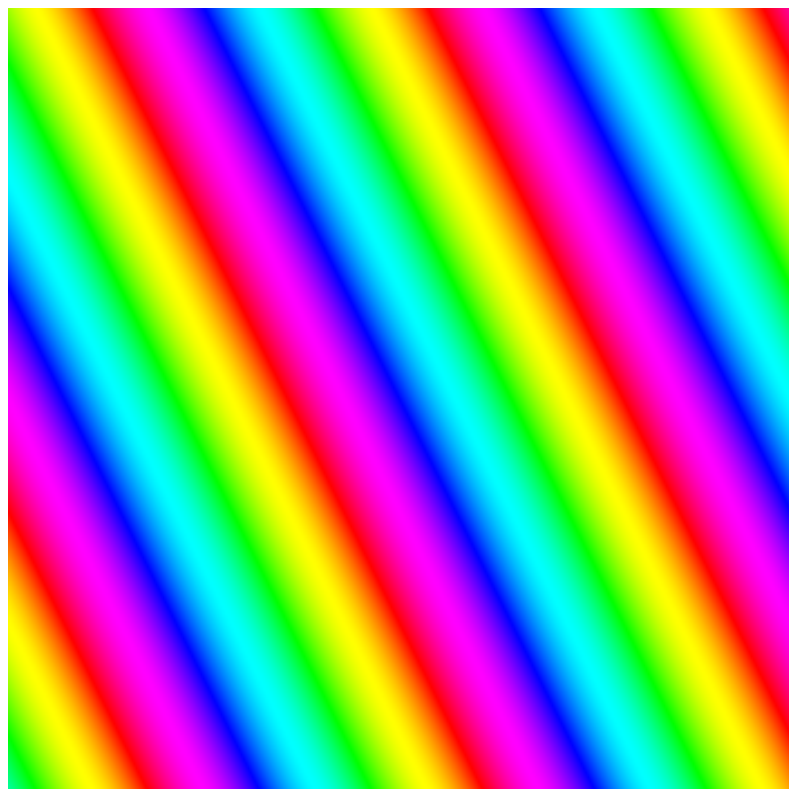
振幅変調

実空間

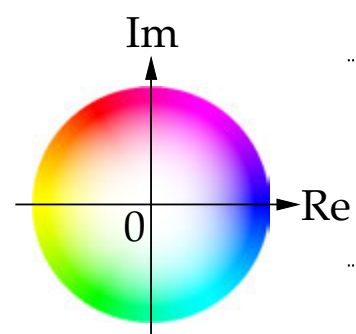
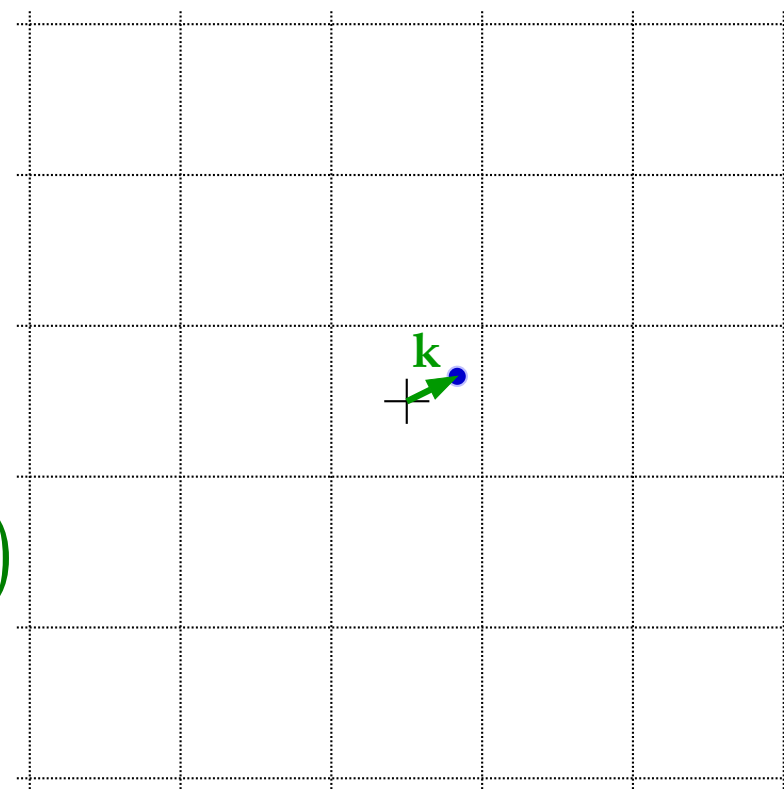
平面波

$$e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}}$$

実空間


 $\longleftrightarrow$ FT

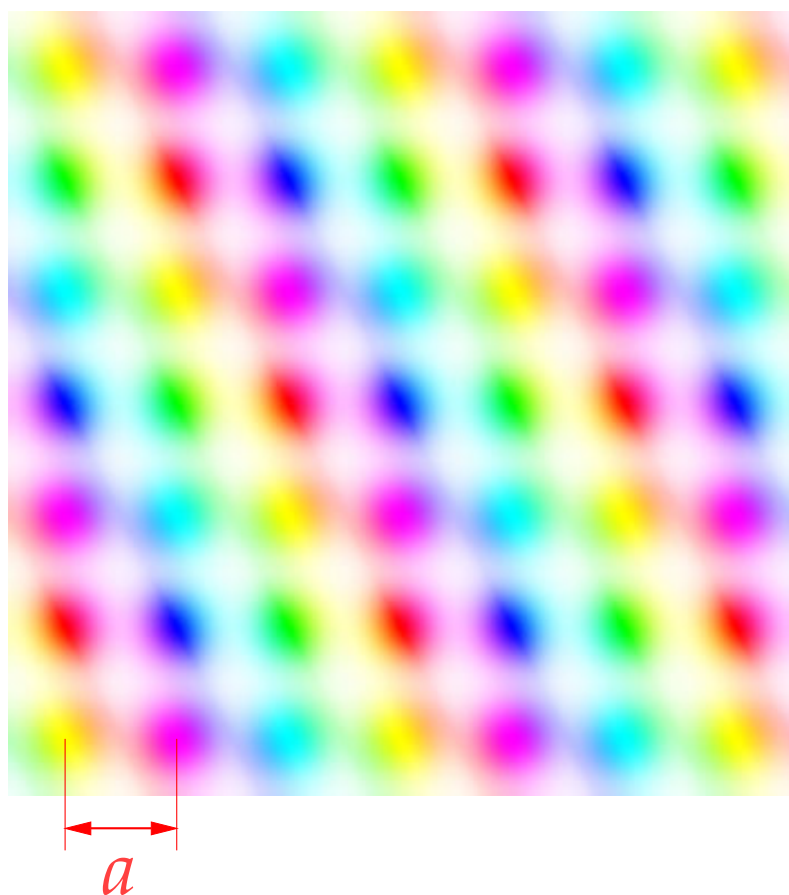
$$\mathbf{k}_0 = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{6} \right)$$



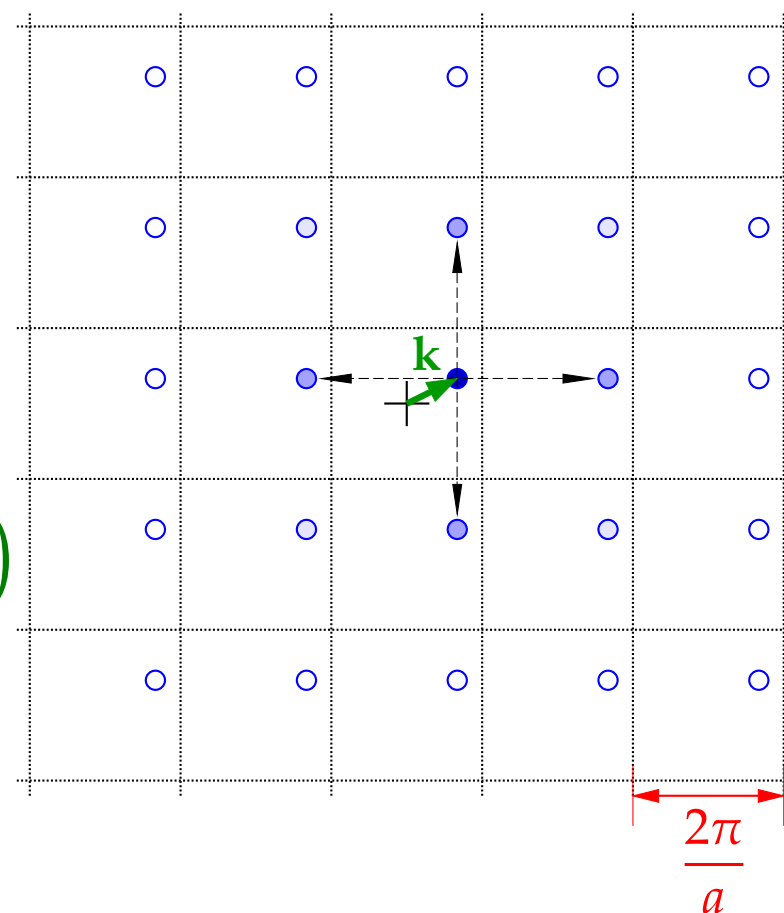
逆空間

ブロッホ波

$$u(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}}$$


 $\longleftrightarrow$ FT

$$\mathbf{k}_0 = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{6} \right)$$



ブラッグ面

対角要素の縮退条件

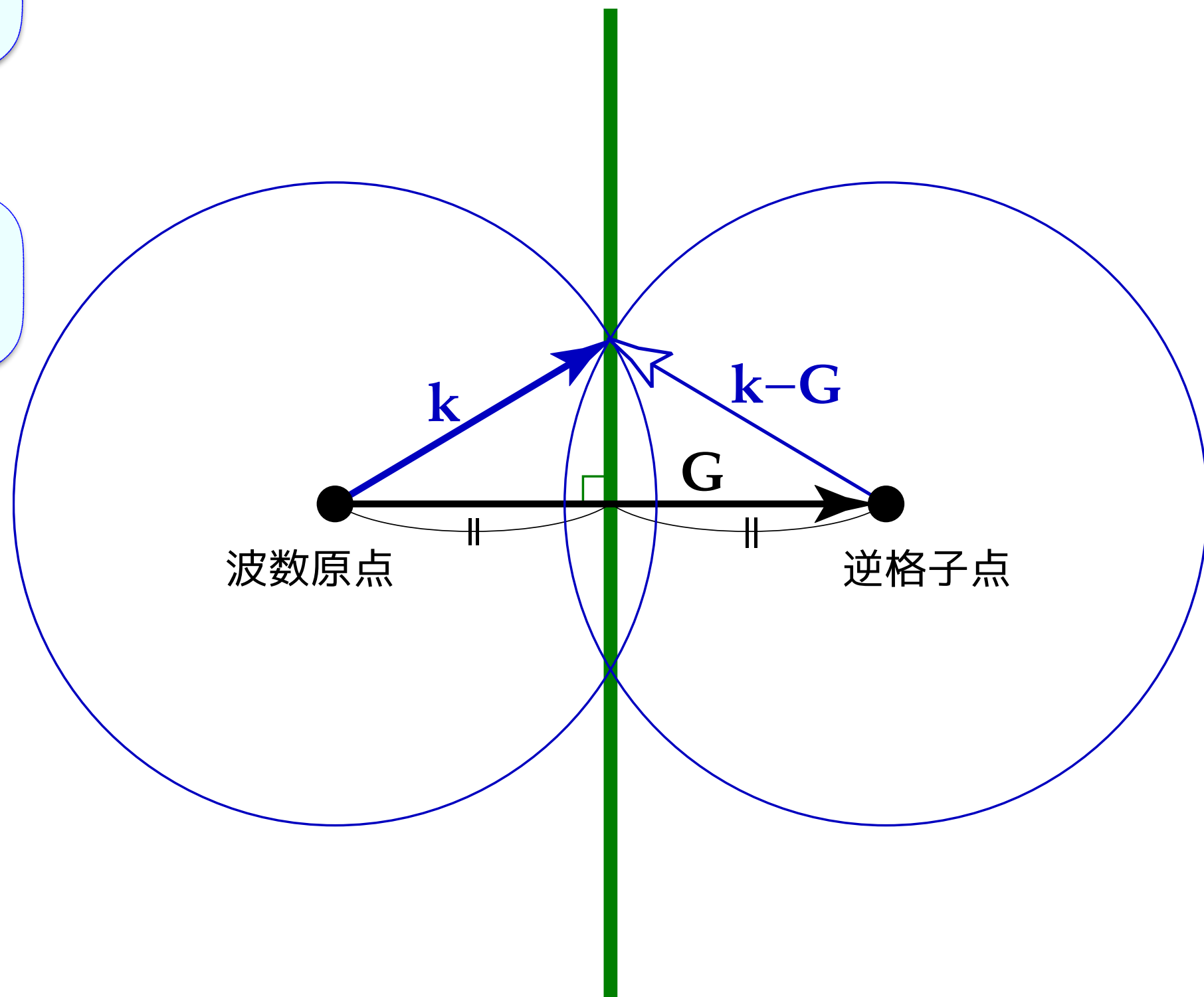
$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}$$

$$\downarrow \varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k}|^2$$

$$|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}-\mathbf{G}|$$

ツボQ2

垂直二等分面



ブラッグ面近傍の解

予習のツボ7

Q1.
$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} & V_{\mathbf{G}}^* \\ V_{\mathbf{G}} & \varepsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} \\ \Psi_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} \\ \Psi_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}$$
 の固有値 E を 求めよ。

A1.
$$E = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}}{2}\right)^2 + |V_{\mathbf{G}}|^2}$$

状態 $\mathbf{k}$ の確率
$$|\Psi_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{1 + \left|\frac{E - \varepsilon_{\mathbf{k}}}{V_{\mathbf{G}}}\right|^2}$$

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

ブラッグ面近傍の分散

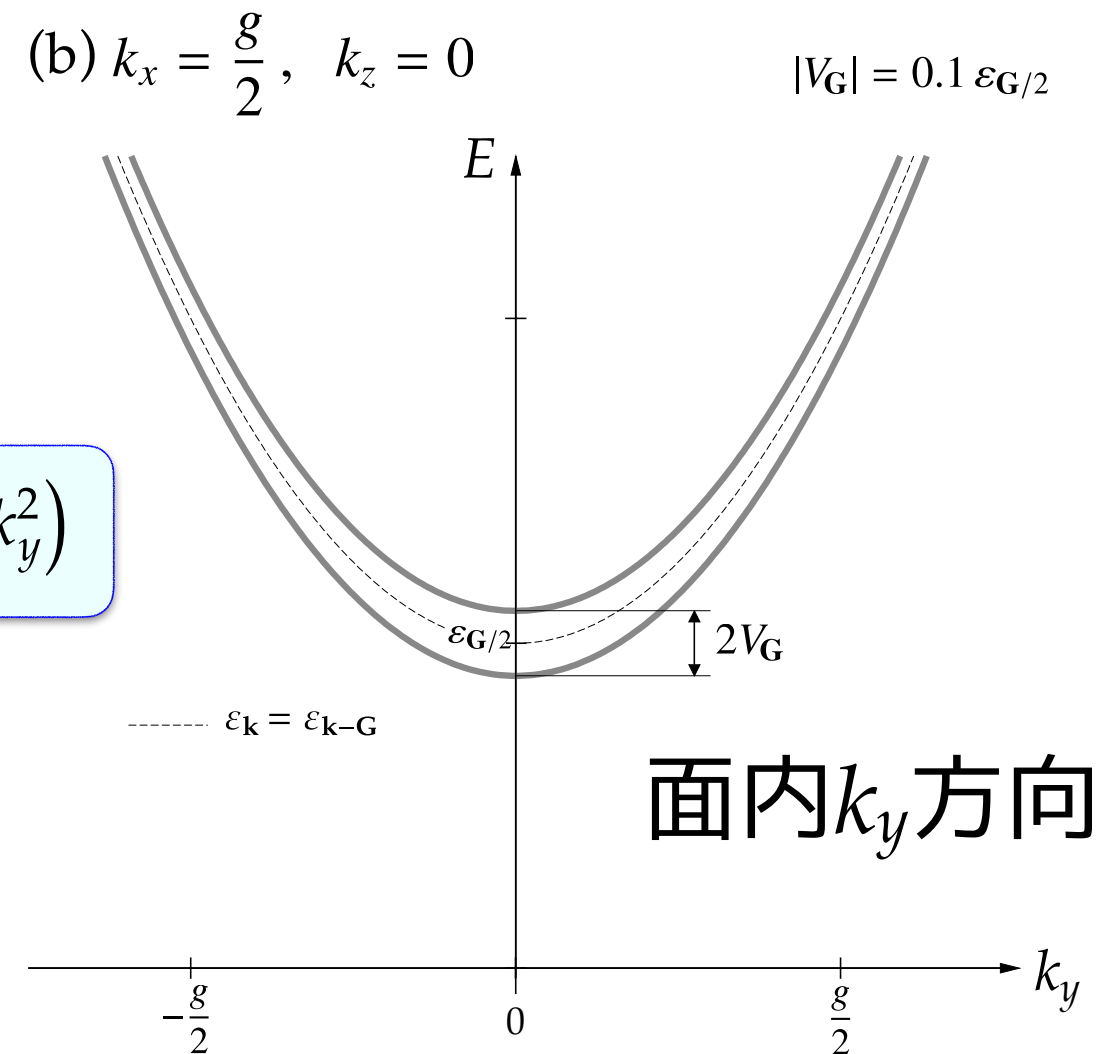
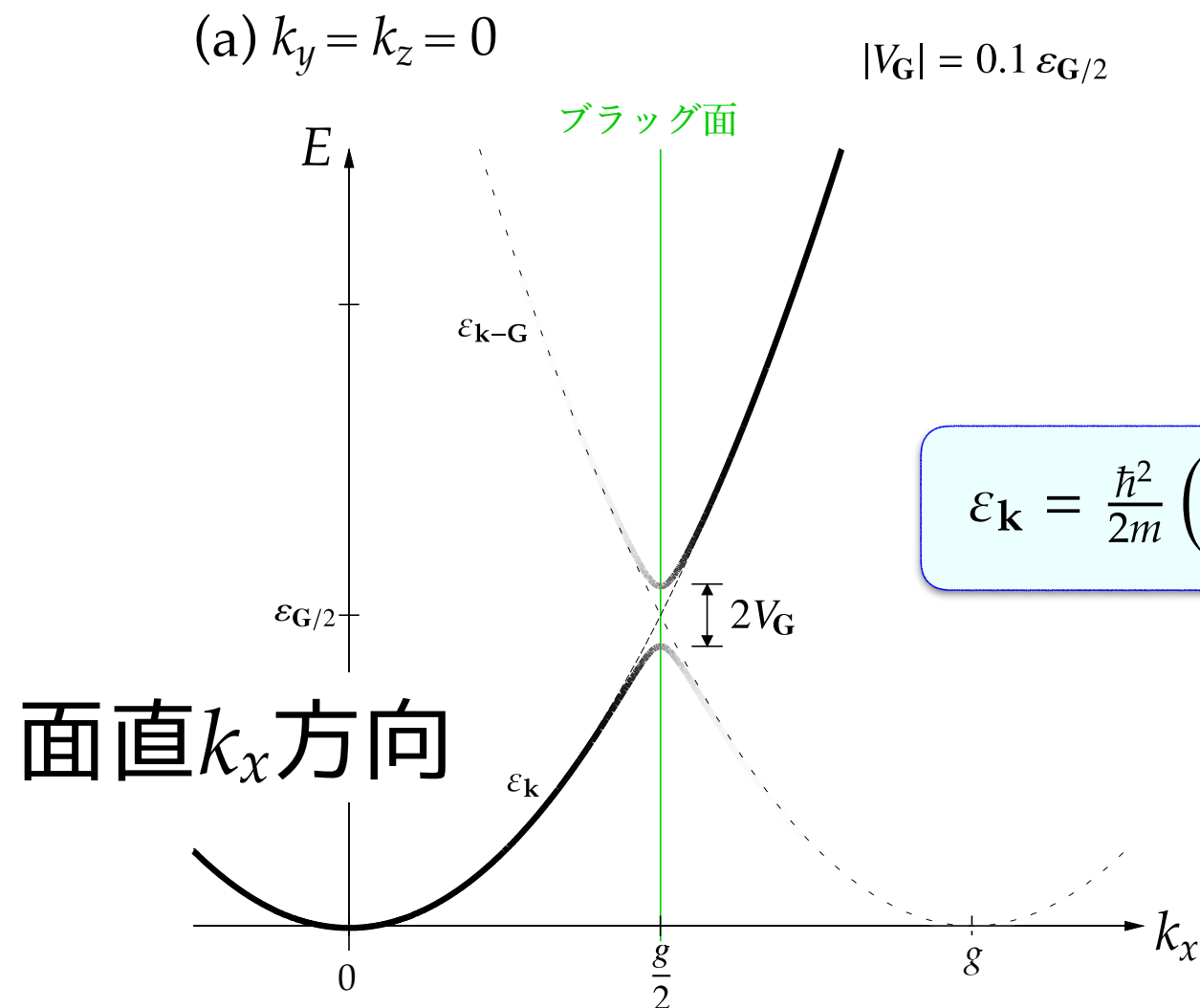
ツボQ1

$$E = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}}{2}\right)^2 + |V_{\mathbf{G}}|^2}$$

ツボQ3,Q4

$$\mathbf{G} = \frac{2\pi}{a}(1, 0, 0)$$

- 内側は下がる。
- 面上はギャップ。
- 外側は上がる。



ブラッグ面近傍の等エネルギー面

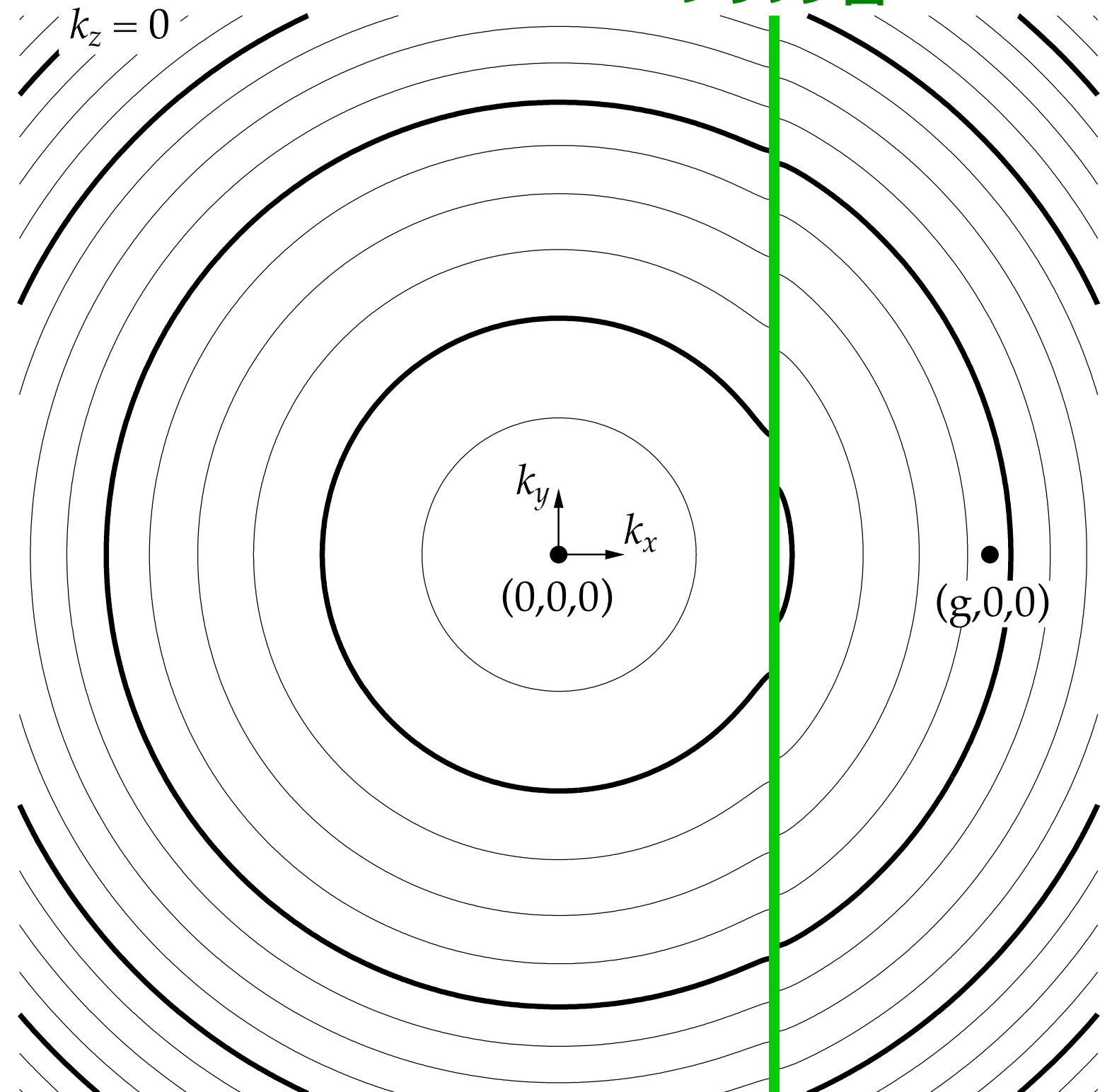
- 地図の等高線から類推しよう。
- フェルミ面も等エネルギー面。

- 内側は下がる。
- 面上はギャップ。
- 外側は上がる。

V_G が大きくなると
等エネルギー面が
吸い込まれる!!

波数空間 (k_x, k_y)

ブラッグ面



ブラッグ面のまとめ

$$|\mathbf{k}| = |\mathbf{k} - \mathbf{G}|$$

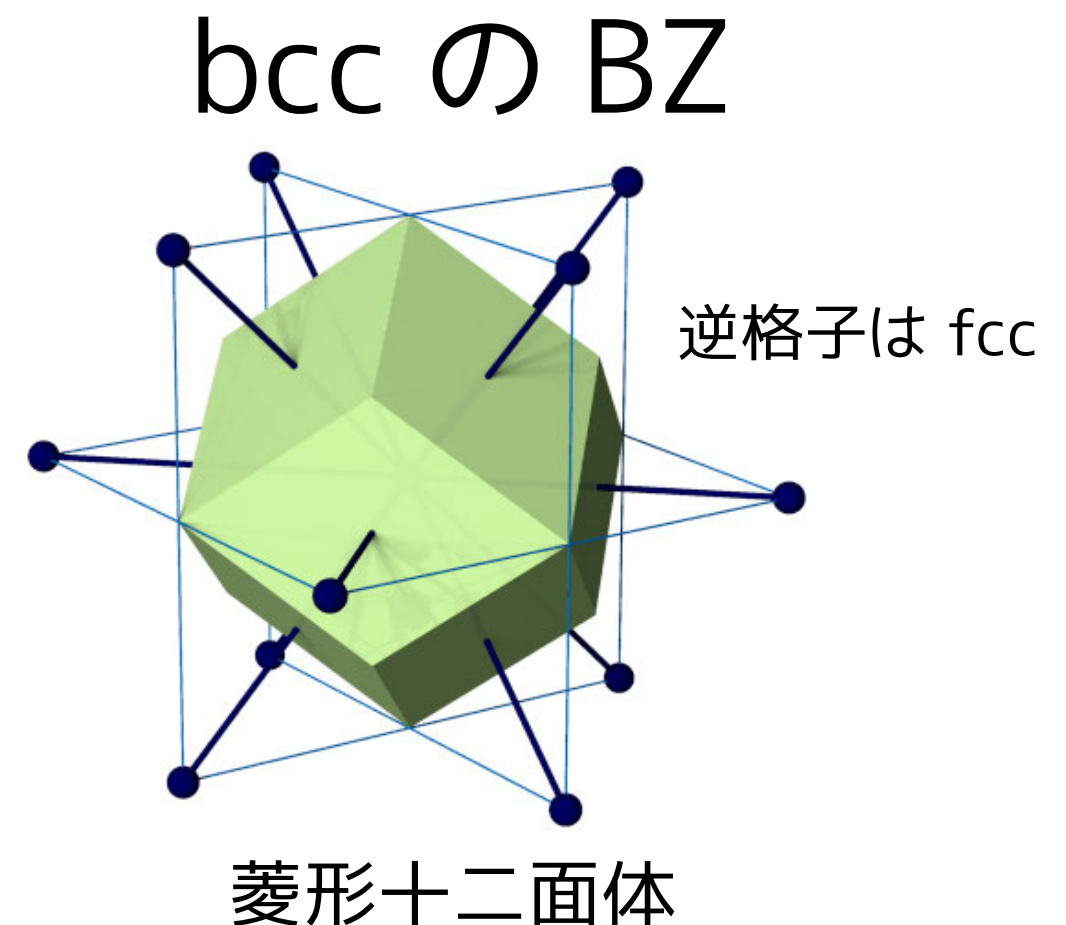
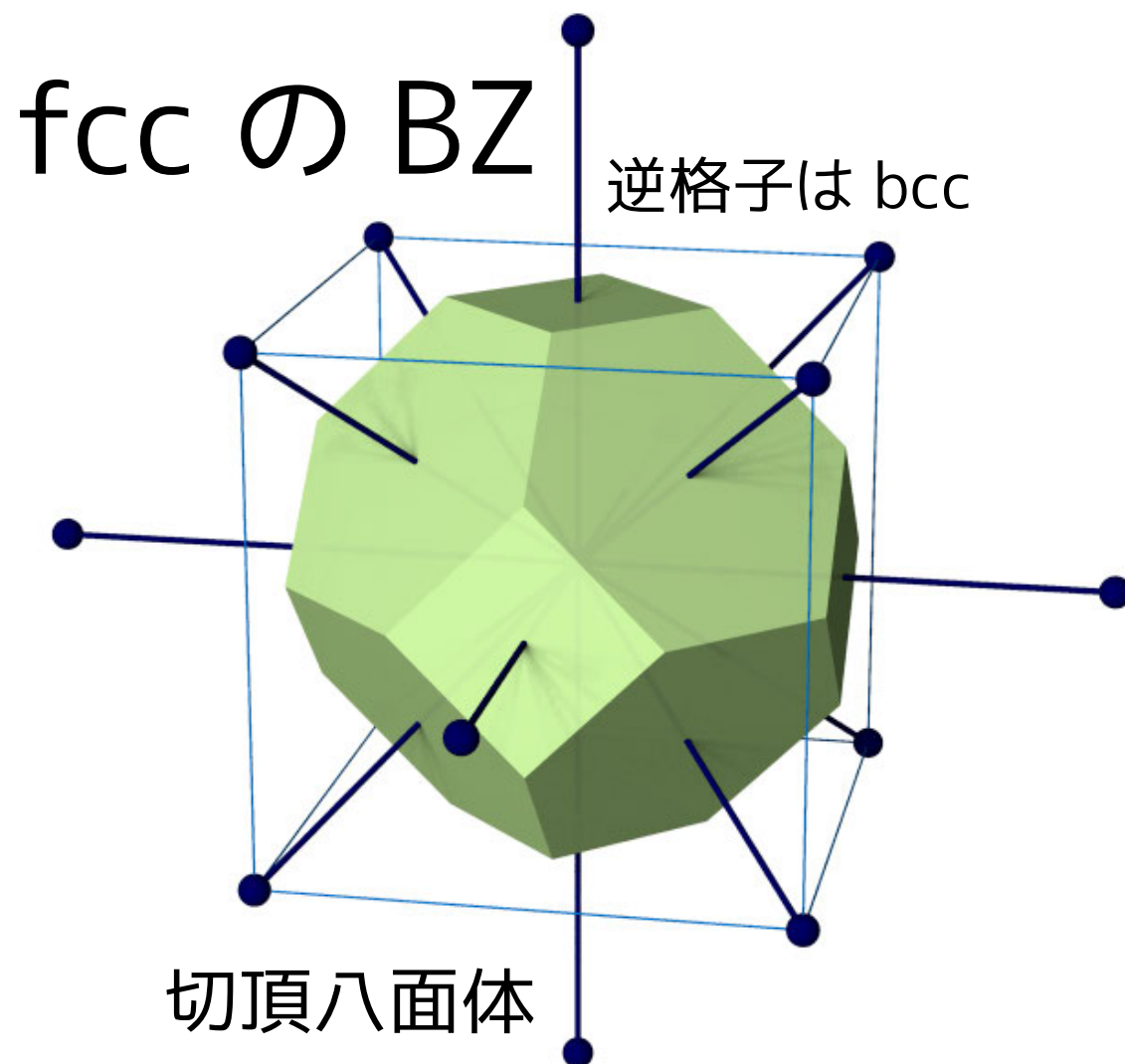
- ブラッグ散乱が起きる波数面。
- 具体的には、運動エネルギーが **縮退** する波数面。
- 図形的には、逆格子ベクトル $\mathbf{G}$ の垂直二等分面。
- 内側のエネルギーが、 $|V_G|$ ほど下がり、
外側のエネルギーが、 $|V_G|$ ほど上がる。
- V_G が増大すると、フェルミ面 や 等エネルギー面 が
吸い込まれる。

第 1 ブリルアン・ゾーン

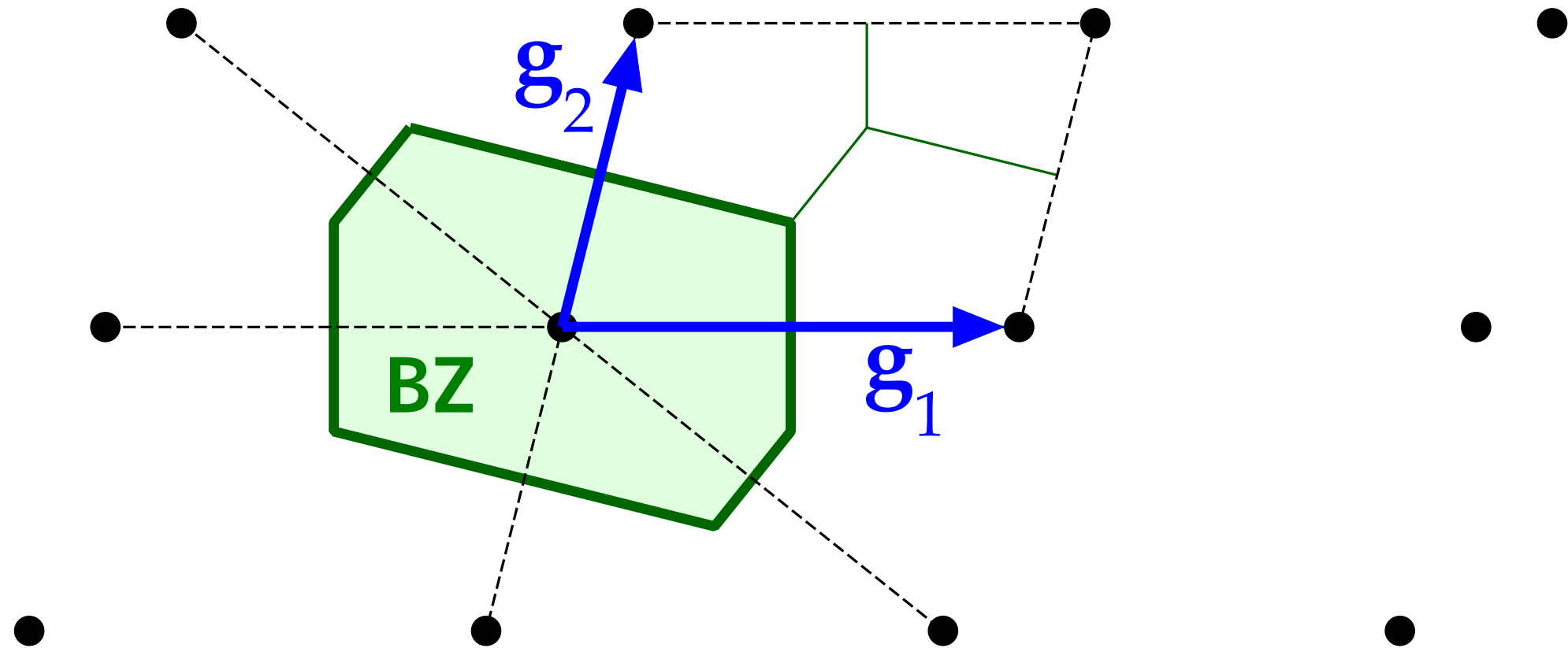
Brillouin Zone (BZ)

- 最も近い逆格子点が、原点となる領域。
- ブラッグ面に囲まれた内側の波数領域。

$$|\mathbf{k}| \leq \min_{\mathbf{G} \neq 0} |\mathbf{k} - \mathbf{G}|$$



ブリルアン・ゾーン（二次元）



$$S_{\text{BZ}} = \left| \begin{array}{c} \mathbf{g}_1 \\ \mathbf{g}_2 \end{array} \right| = \frac{(2\pi)^2}{S_{\text{uc}}}$$

逆空間の単位胞として

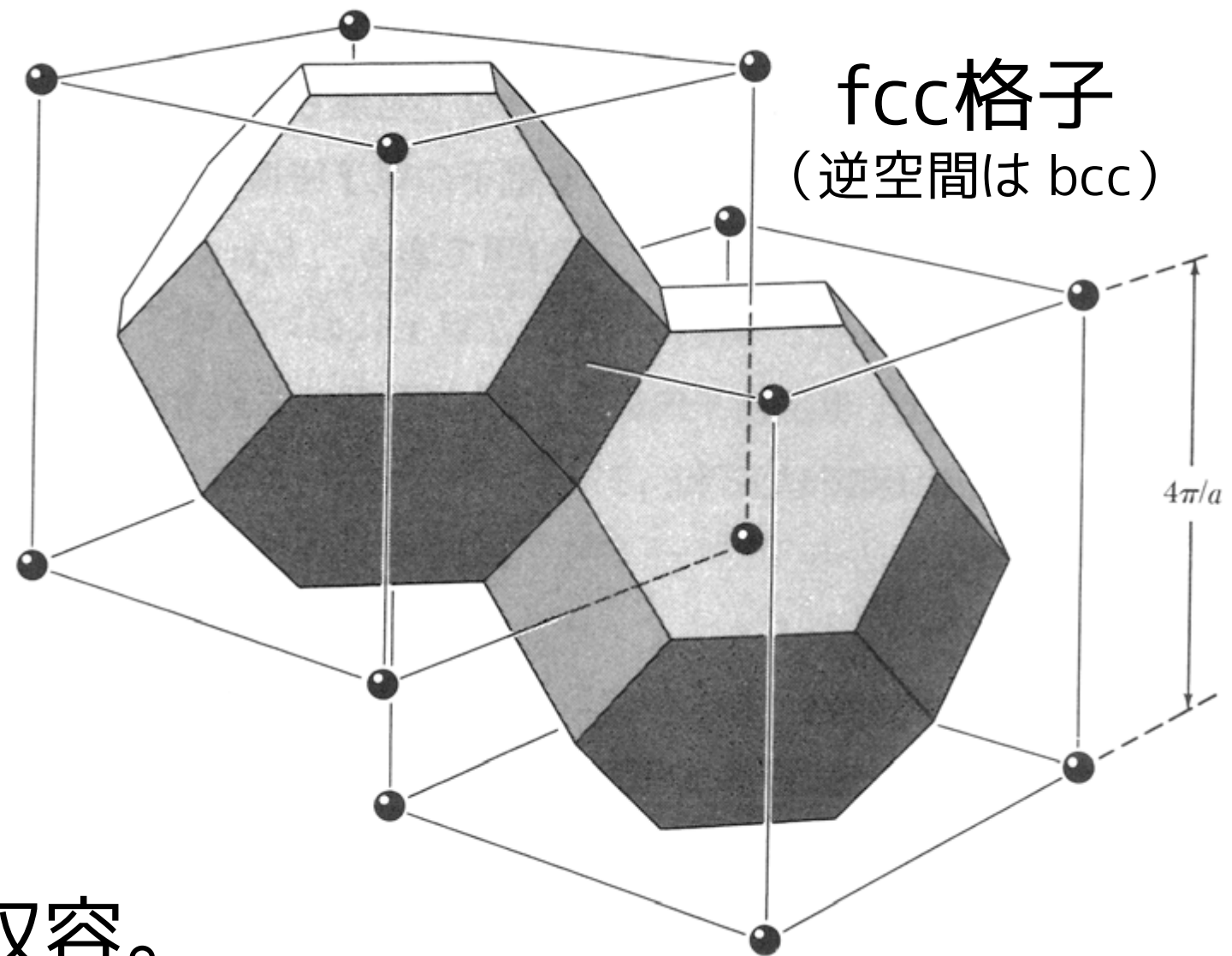
- BZ内では、結晶波数が一意的。

- 第1 BZは、結晶波数の
繰り返し単位 に最適。

- BZの体積: $V_{\text{BZ}} = \frac{(2\pi)^3}{V_{\text{uc}}}$

- BZ内の波数点は、 N_{uc} 個

- 1つのバンドは、
BZ内で $2N_{\text{uc}}$ 個の電子を収容。

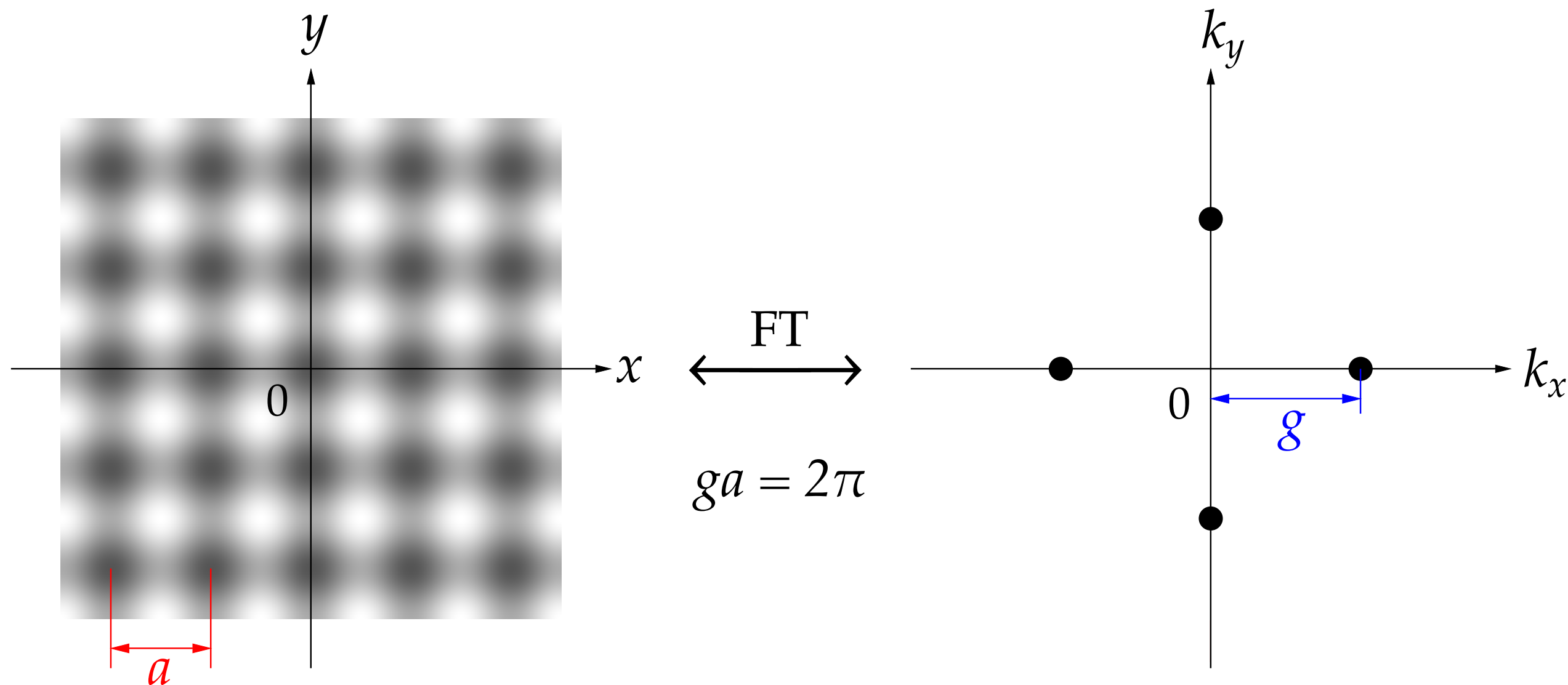


波数体積比の法則 $\frac{V_{\text{FS}}}{V_{\text{BZ}}} = \frac{N_{\text{e}}}{2 N_{\text{uc}}}$

単純な周期場（二次元正方格子）

ツボQ5

$$\begin{aligned}
 V(\mathbf{r}) &= -2V \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) - 2V \cos\left(\frac{2\pi y}{a}\right) \\
 &= -Ve^{igx} - Ve^{-igx} - Ve^{igy} - Ve^{-igy}
 \end{aligned}
 \quad \begin{array}{l} \curvearrowright \\ g = \frac{2\pi}{a} \end{array}$$



空格子バンド ($V=0$)

$$E_{g/2} = \frac{\hbar^2 (g/2)^2}{2m}$$

$E_k < 8E_{g/2}$ まで求める。

$$\frac{E_\Gamma}{E_{g/2}} = 0, 4, 8, \dots$$

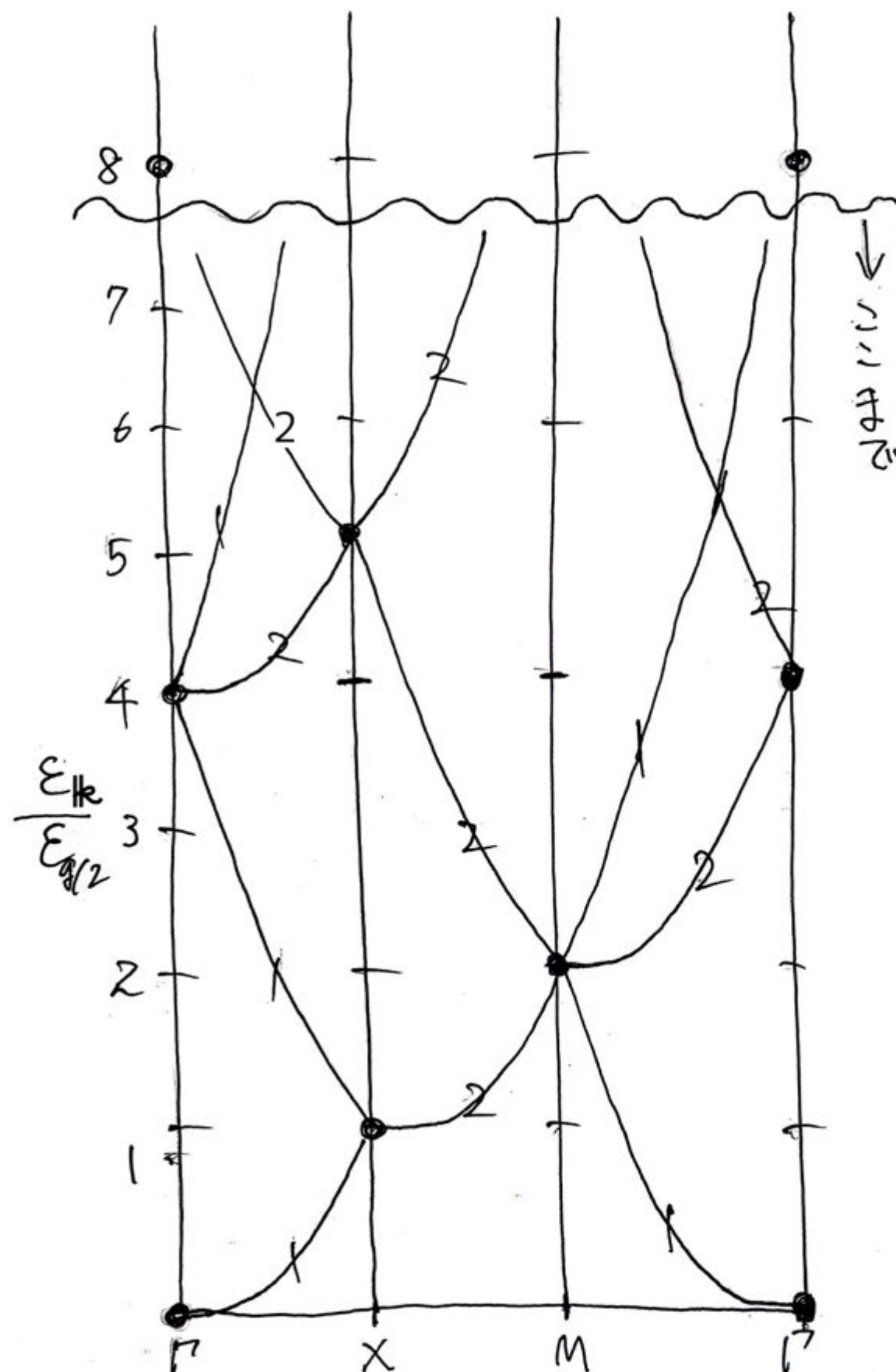
(1) (4) (4)

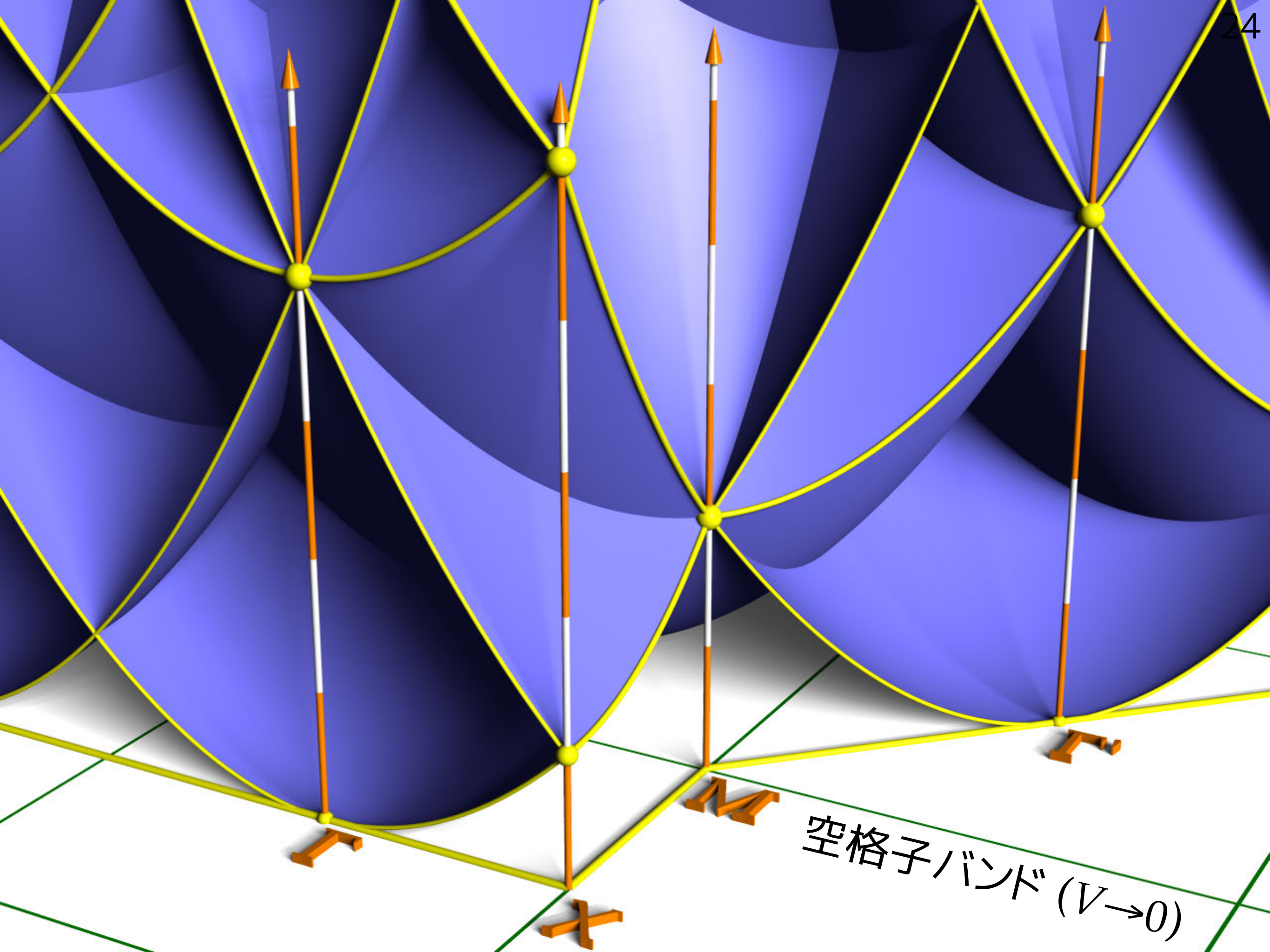
$$\frac{E_X}{E_{g/2}} = 1, 5, 9, \dots$$

(2) (4) (2)

$$\frac{E_M}{E_{g/2}} = 2, 10, \dots$$

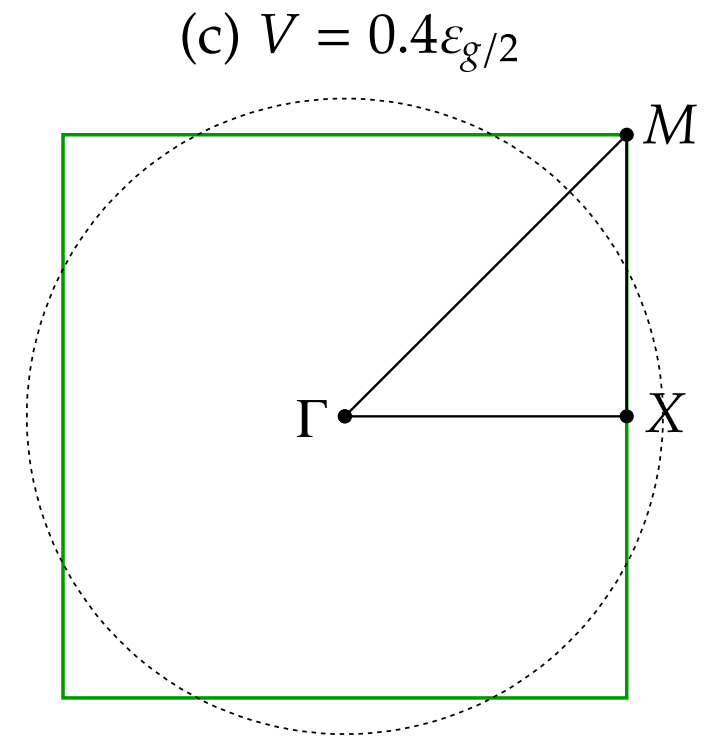
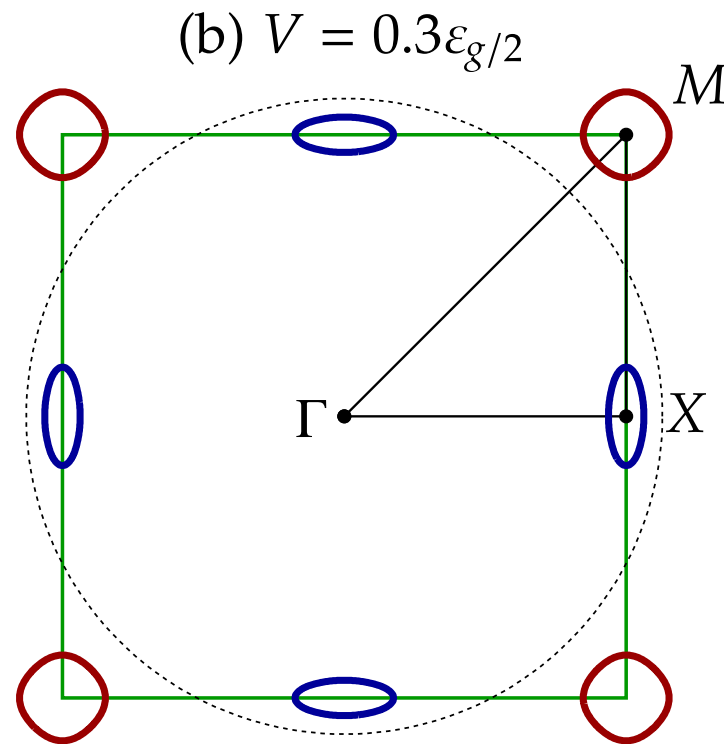
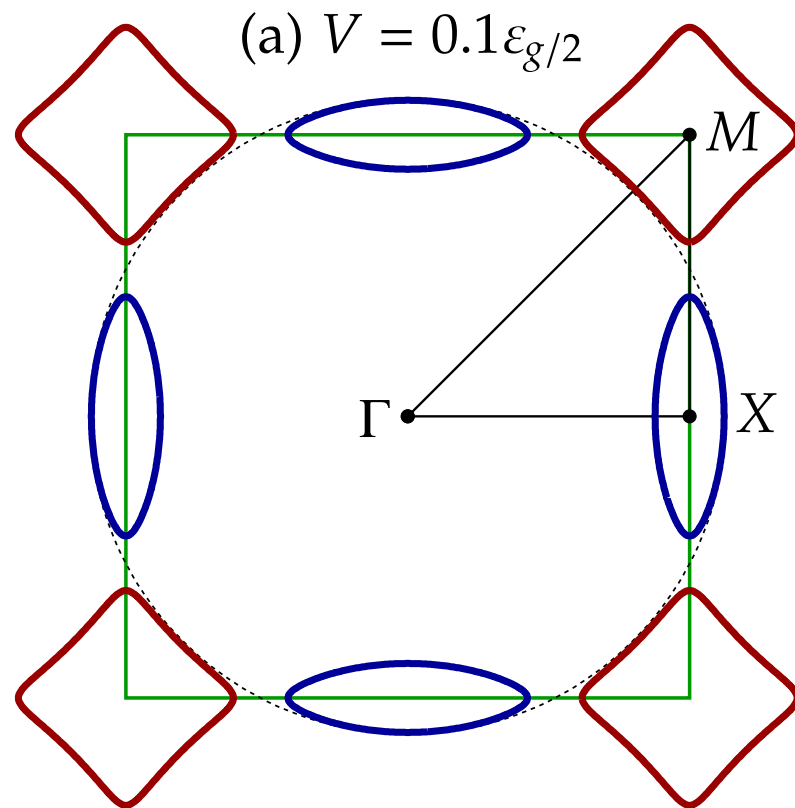
(4) (8)



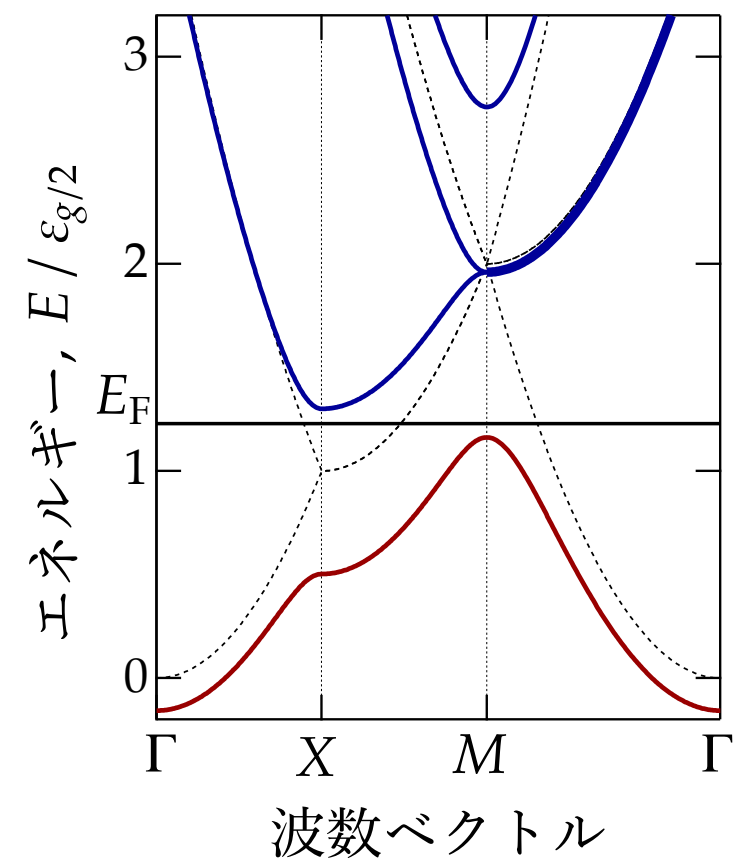
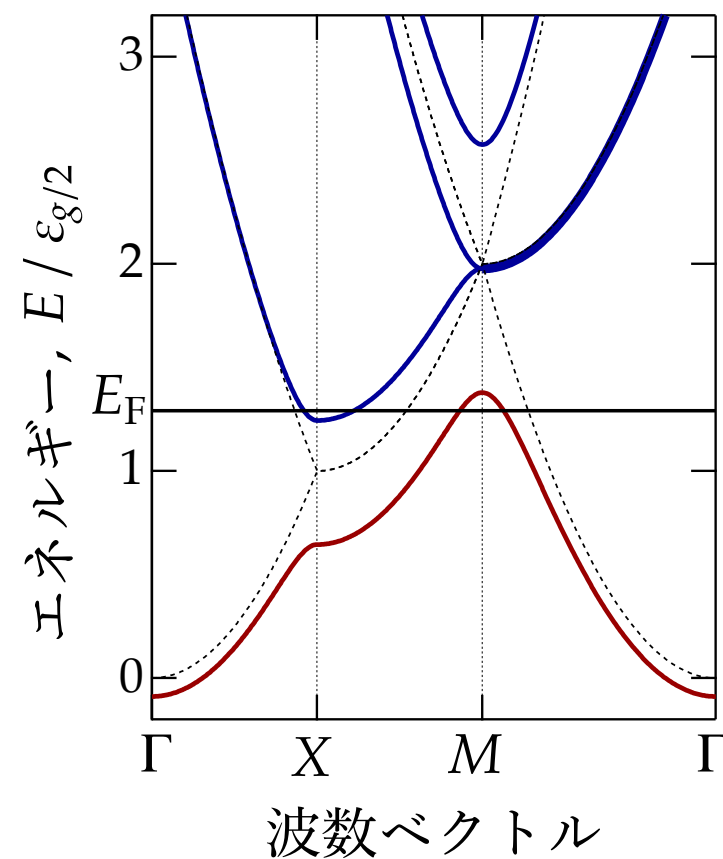
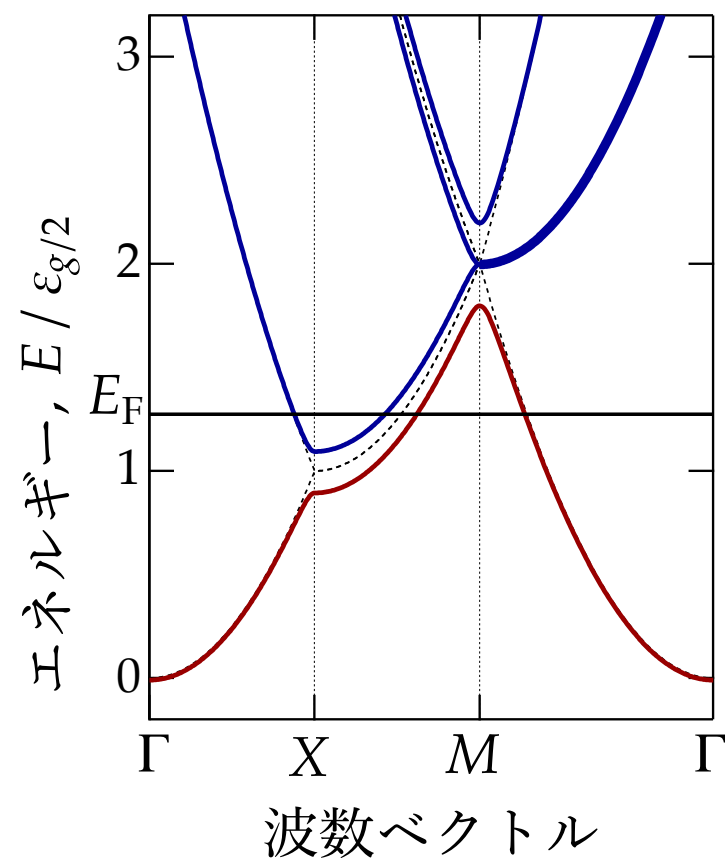


空格子バンド ($V \rightarrow 0$)

周期場の効果 (二次元正方格子)

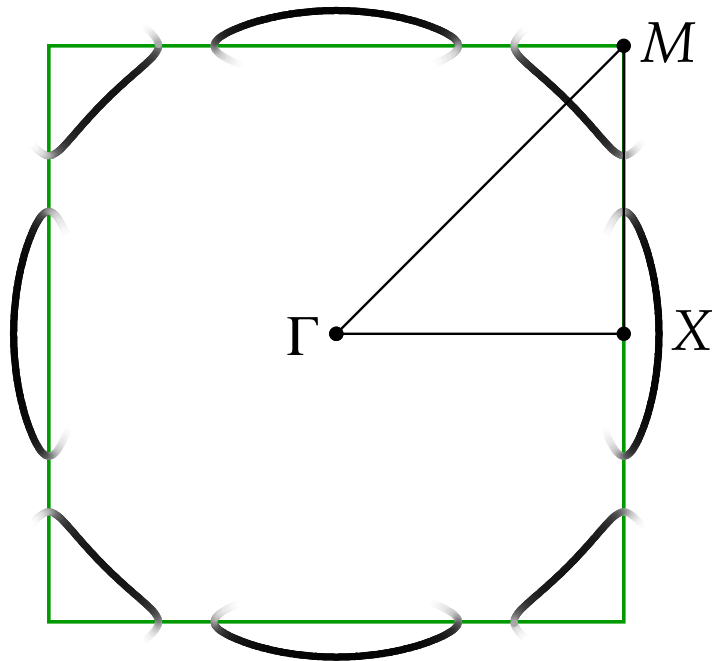


----- 空格子近似 ($V \rightarrow 0$)



3つの表示形式

拡張ゾーン形式

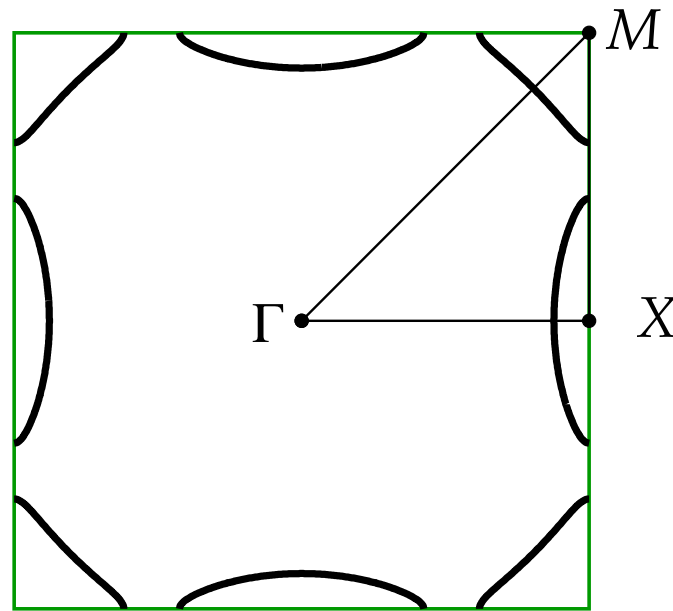


$$E = \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k}|^2$$

区別

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

還元ゾーン形式

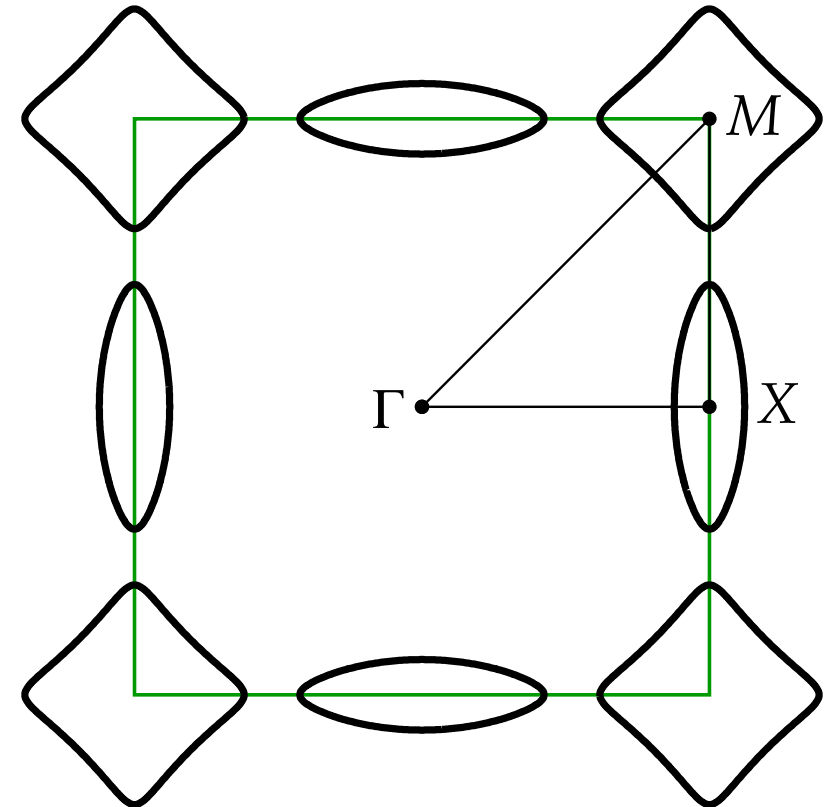


$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{G}} |\mathbf{k} - \mathbf{G}|^2$$

同一視

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

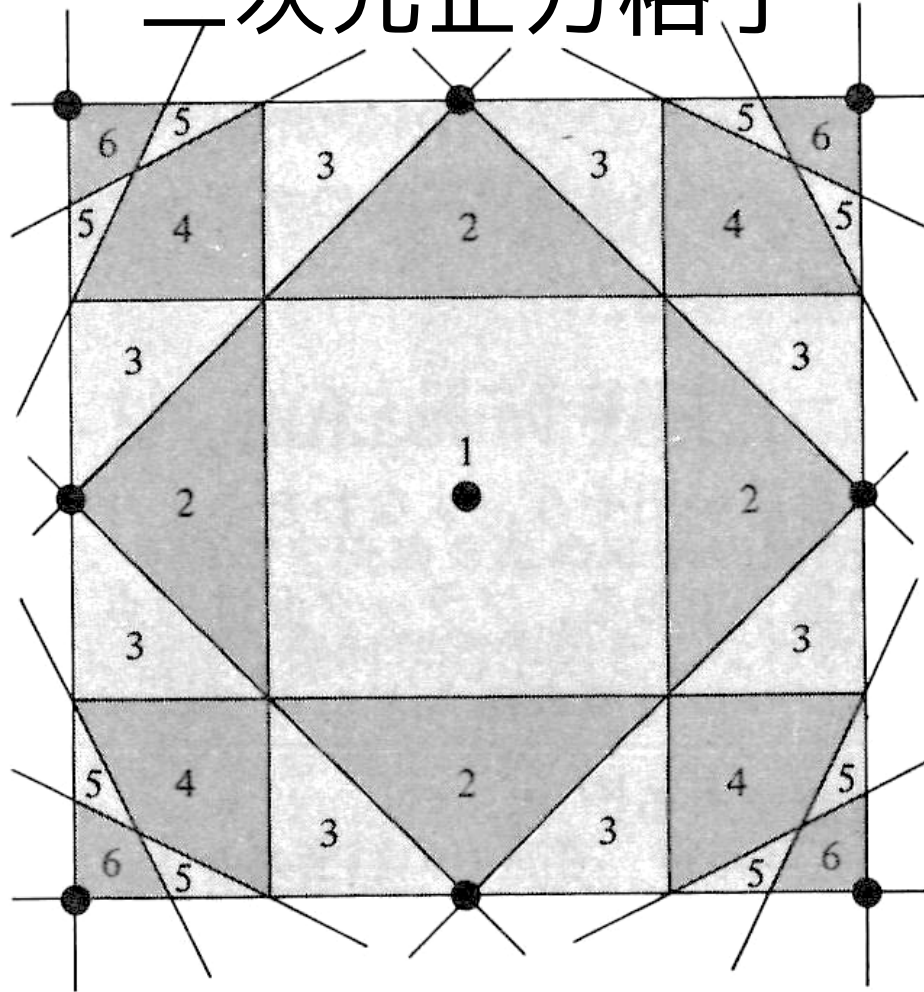
周期ゾーン形式



第 n ブリルアン・ゾーン

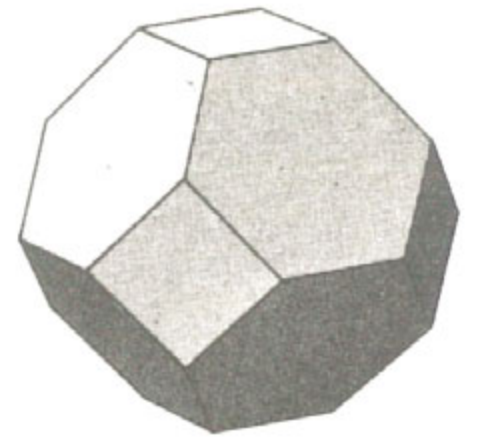
フェルミ面は、ブラッグ面で切り離される。

二次元正方格子

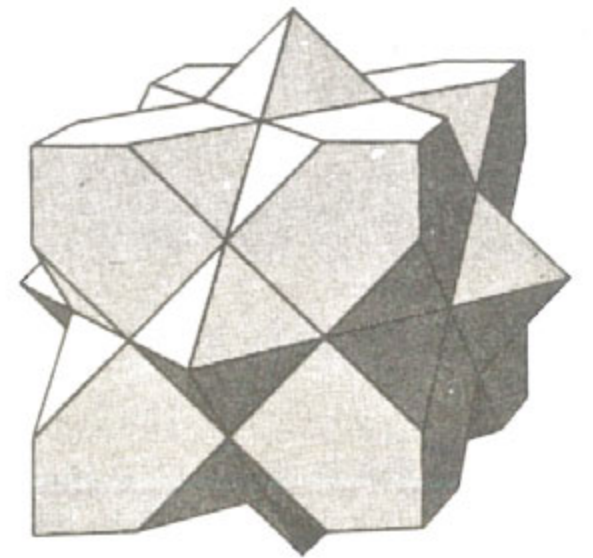


fcc格子
(逆空間は bcc)

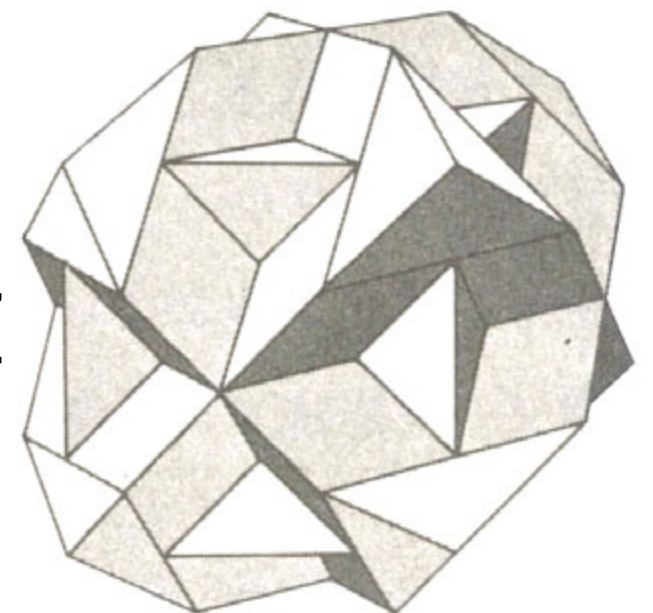
第1BZ



第2BZ



第3BZ



原点との間に、
ブラッグ面が $n-1$ 枚ある領域を、
『第 n ブリルアン・ゾーン』と呼ぶ。

fcc格子のフェルミ面

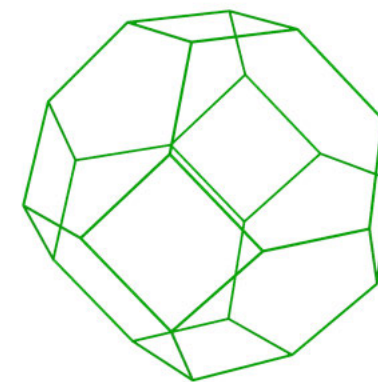
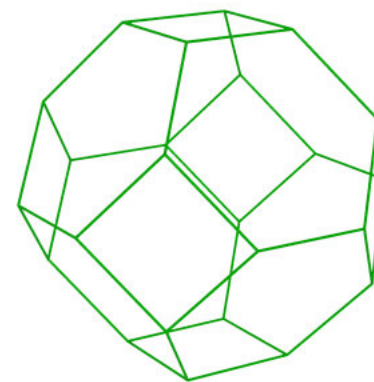
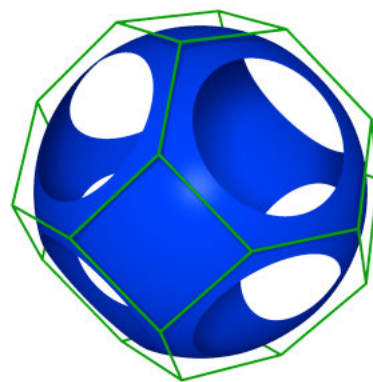
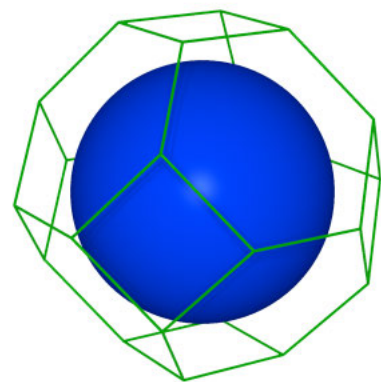
$$N_e/N_{uc}=1$$

$$N_e/N_{uc}=2$$

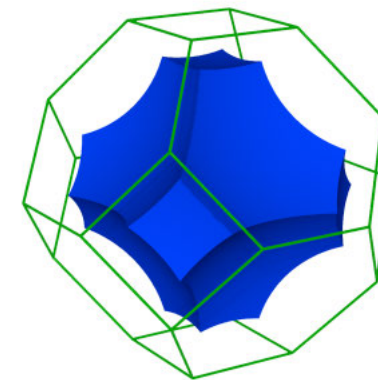
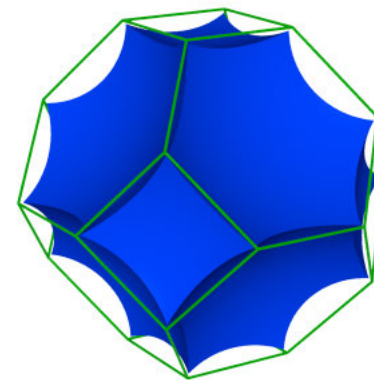
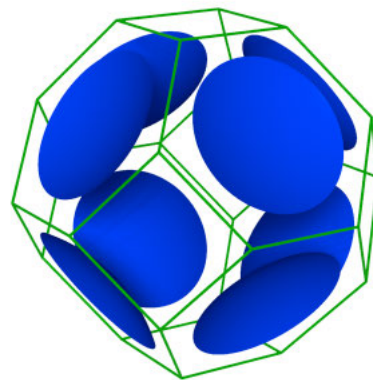
$$N_e/N_{uc}=3$$

$$N_e/N_{uc}=4$$

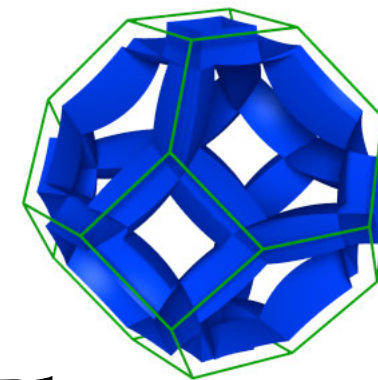
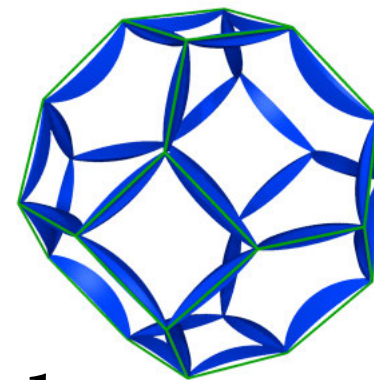
第1BZ



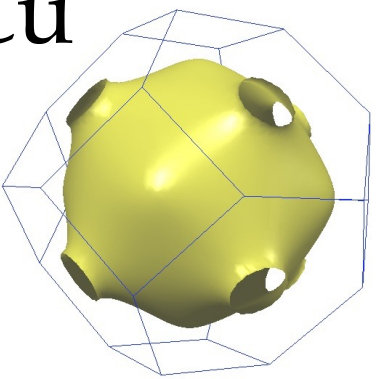
第2BZ



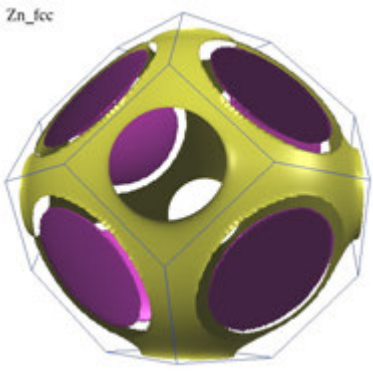
第3BZ



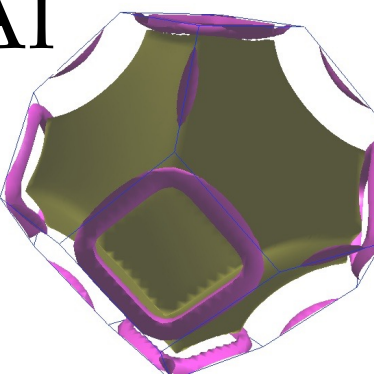
Cu



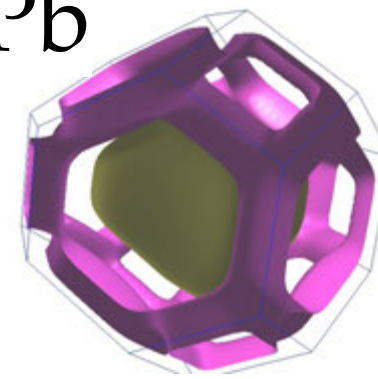
Zn_fcc



Al



Pb



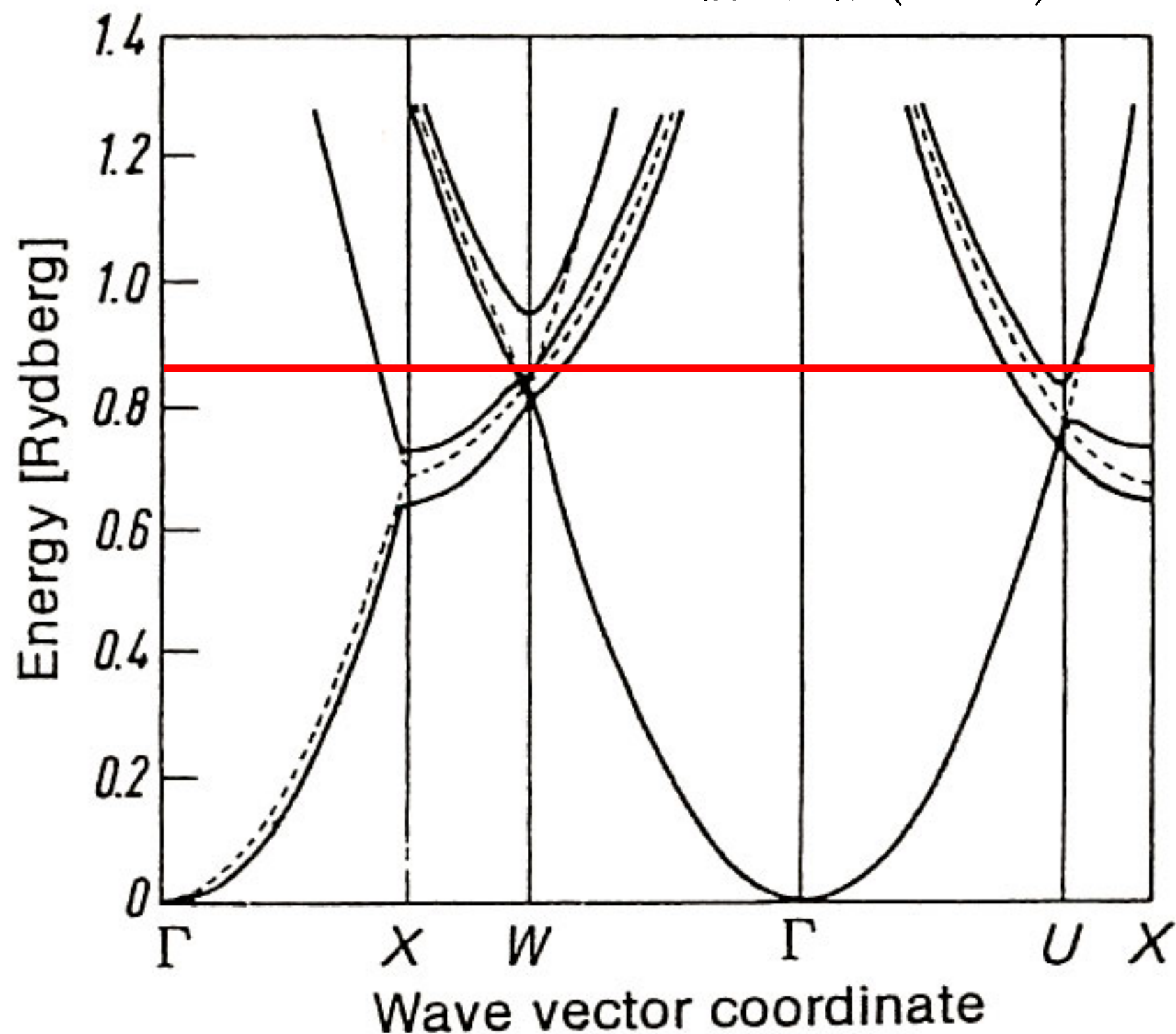
空格子近似

周期場

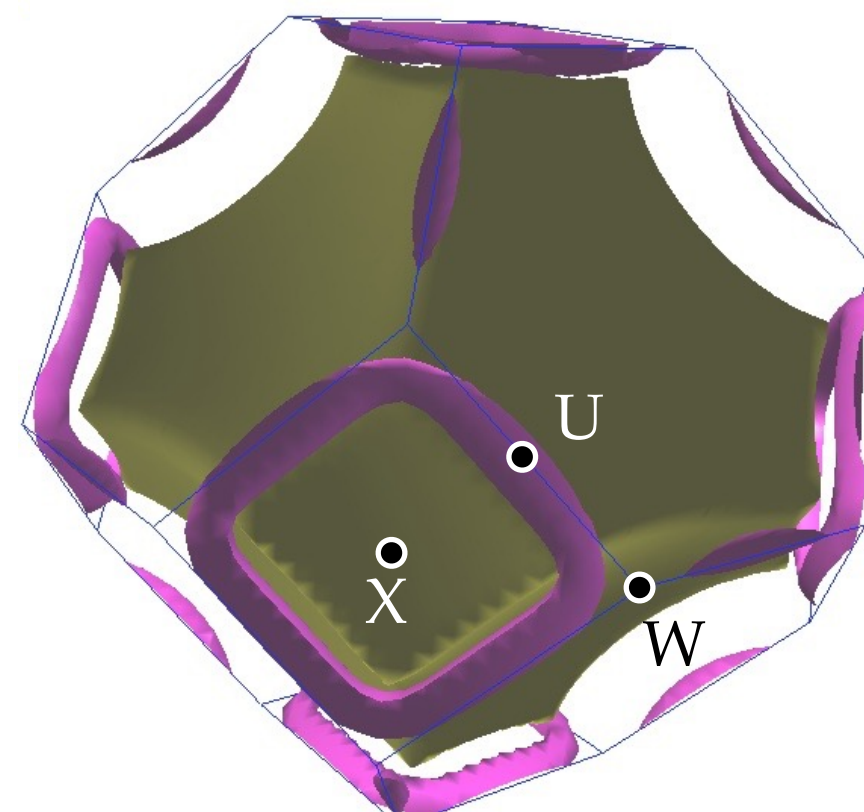
Al の電子構造

1 Ryd = 13.6 eV

----- 空格子近似 ($V \rightarrow 0$)



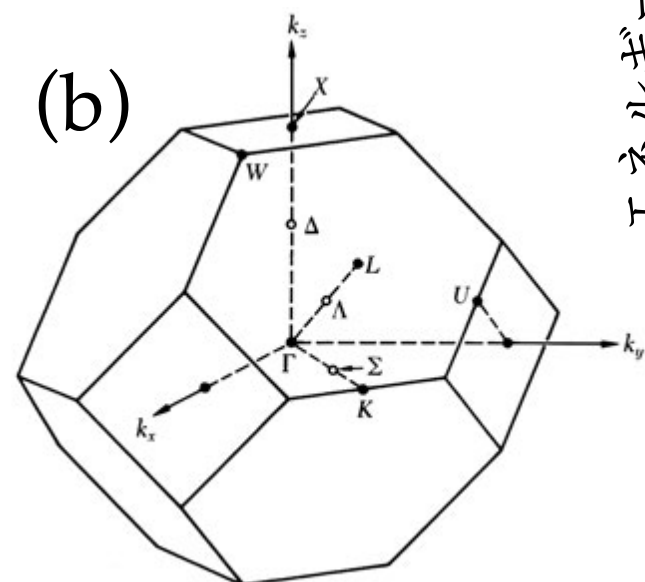
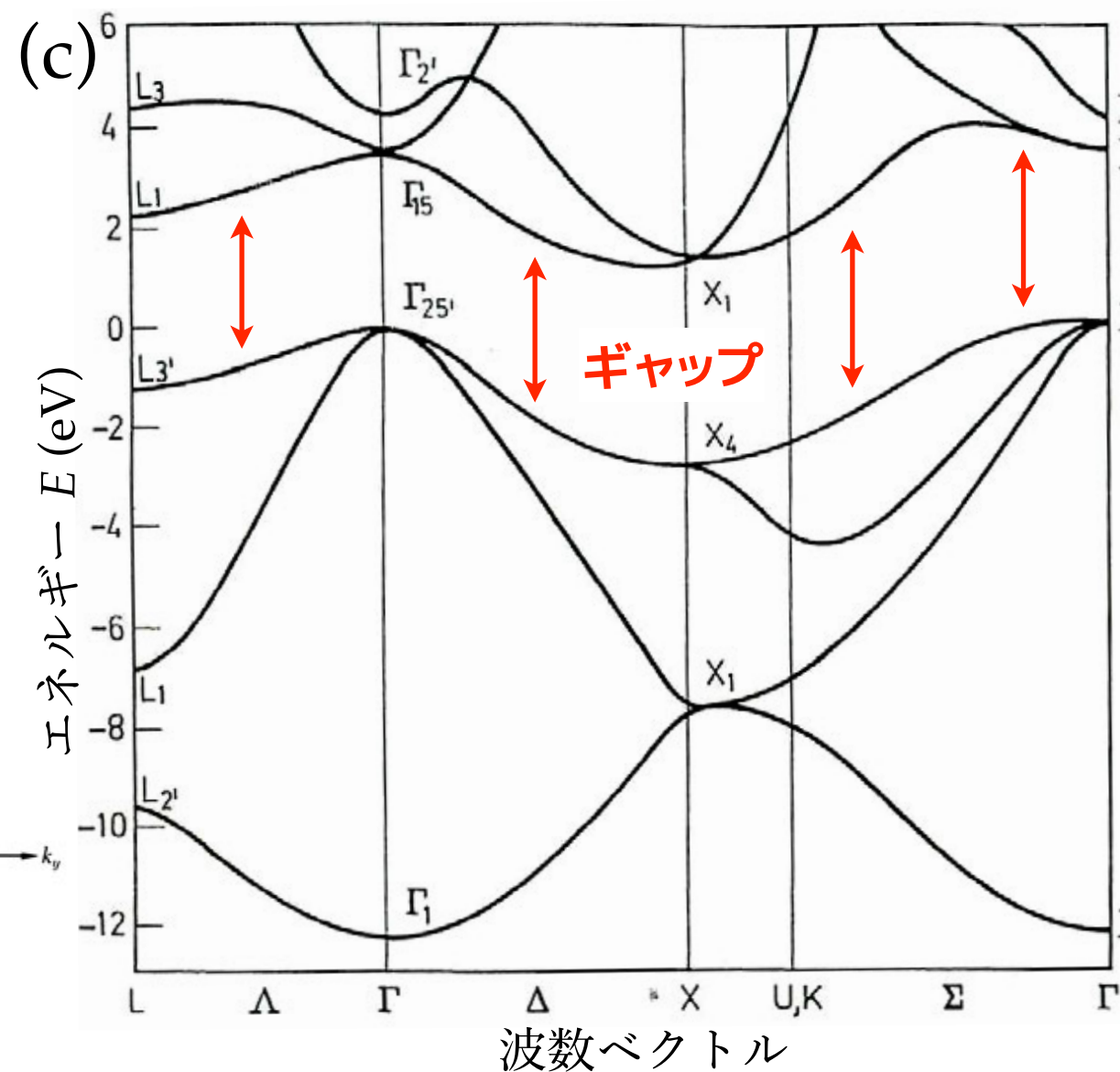
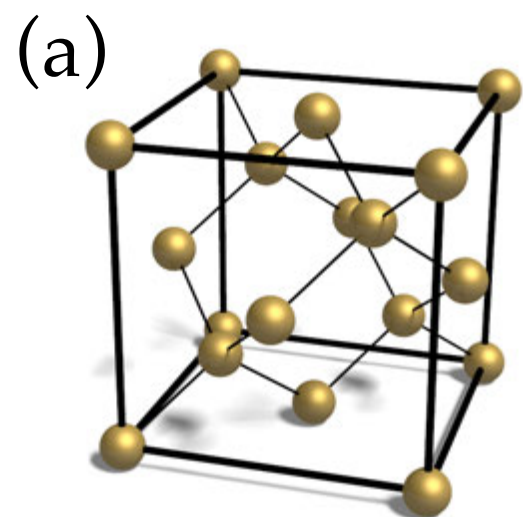
$$N_e/N_{uc} = 3$$



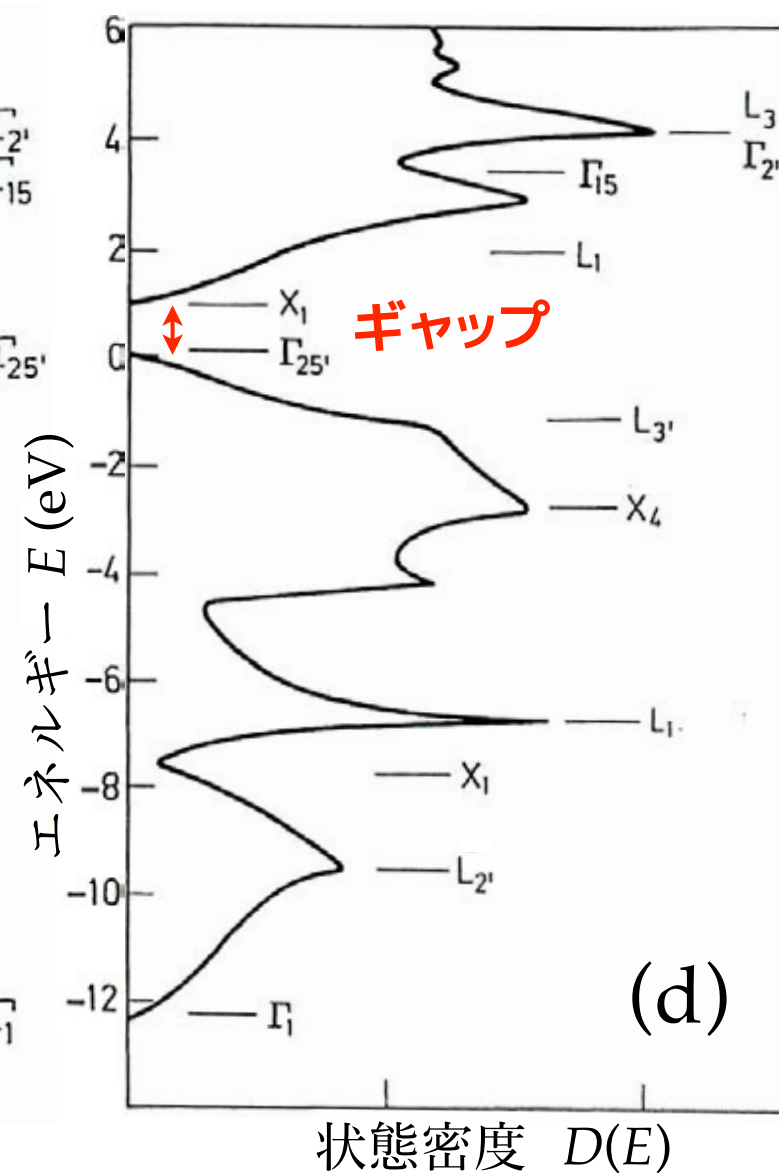
fcc

Si の電子構造

$$N_e/N_{uc} = 8$$



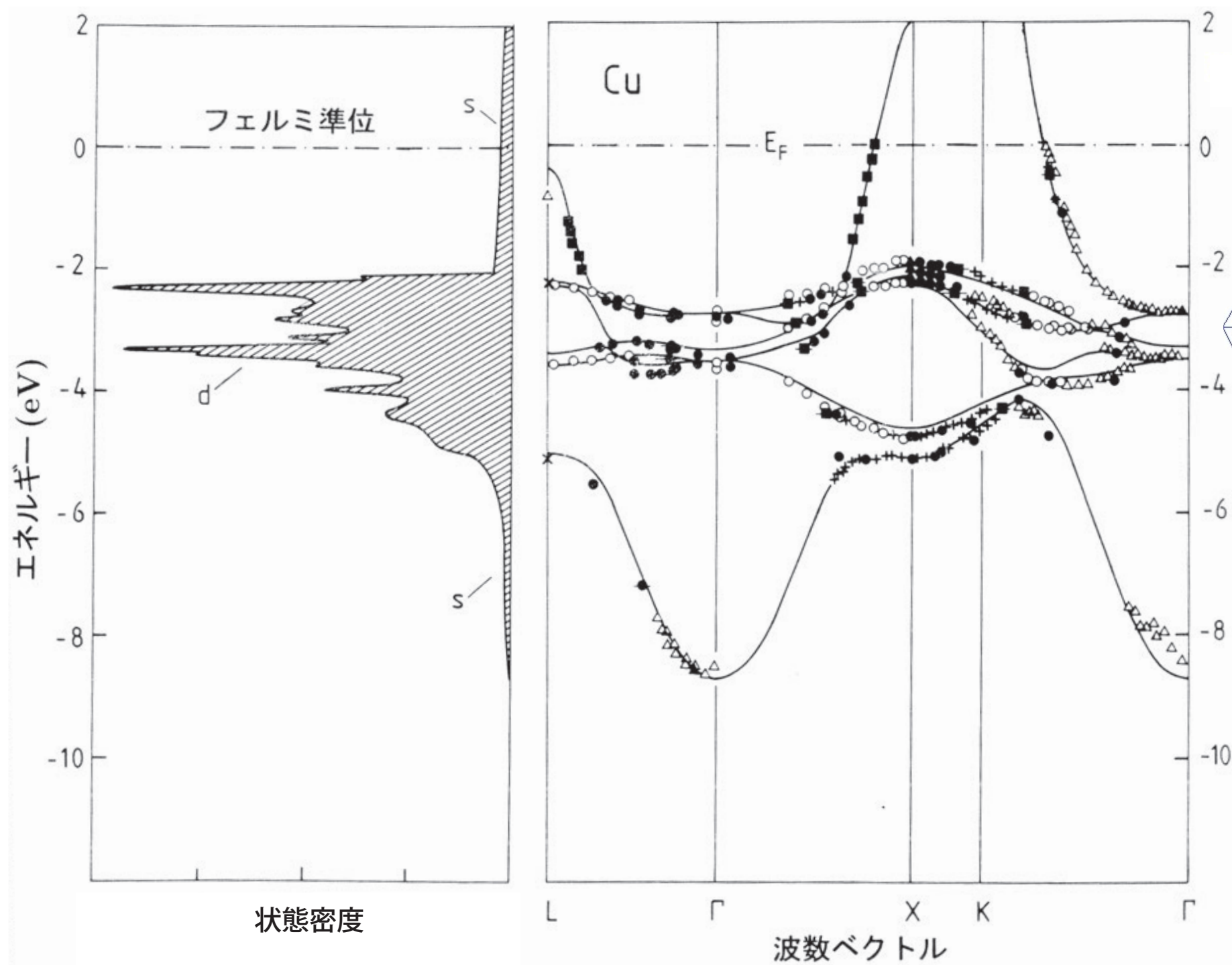
フェルミ面が、ブラッグ面に
吸い込まれて消える。



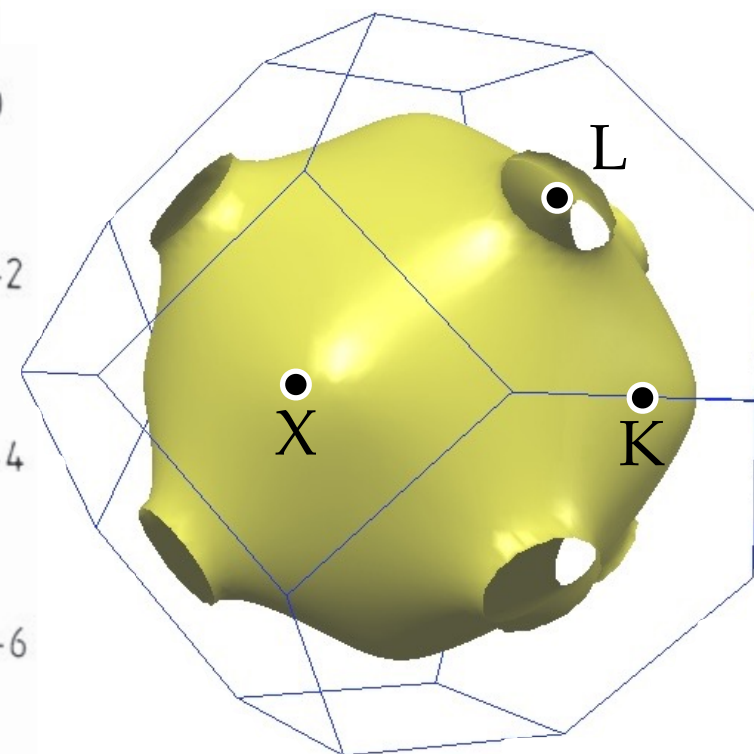
バンド・ギャップ ~ 1.1 eV

絶縁体 (半導体)

Cu の 電子構造



$$N_e/N_{uc} = 1$$



fcc

銅のバンド分散の観測

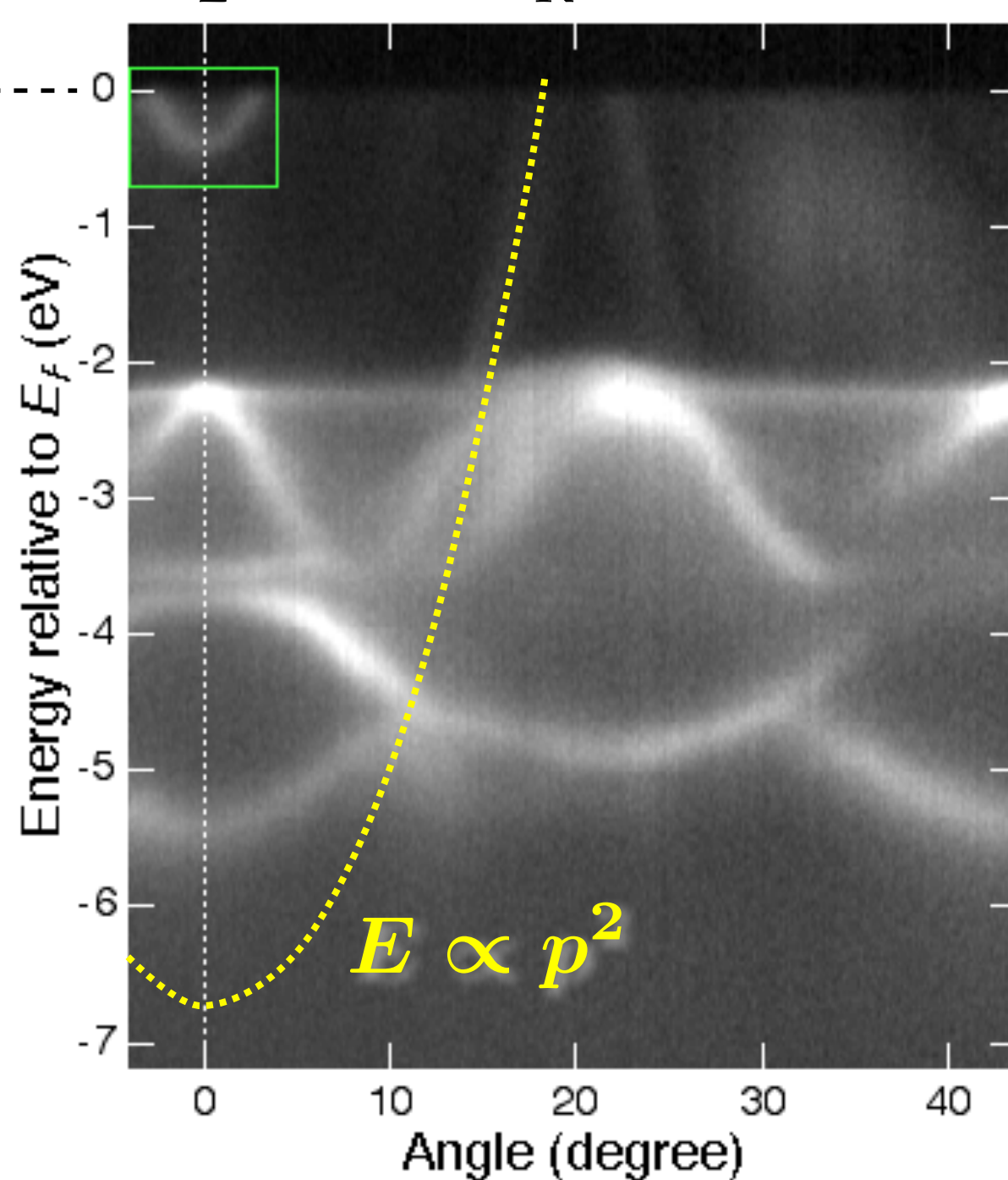


運動量 p

$\Gamma \longrightarrow L$
 $L \longrightarrow K$

Cu (111) 面の価電子帯

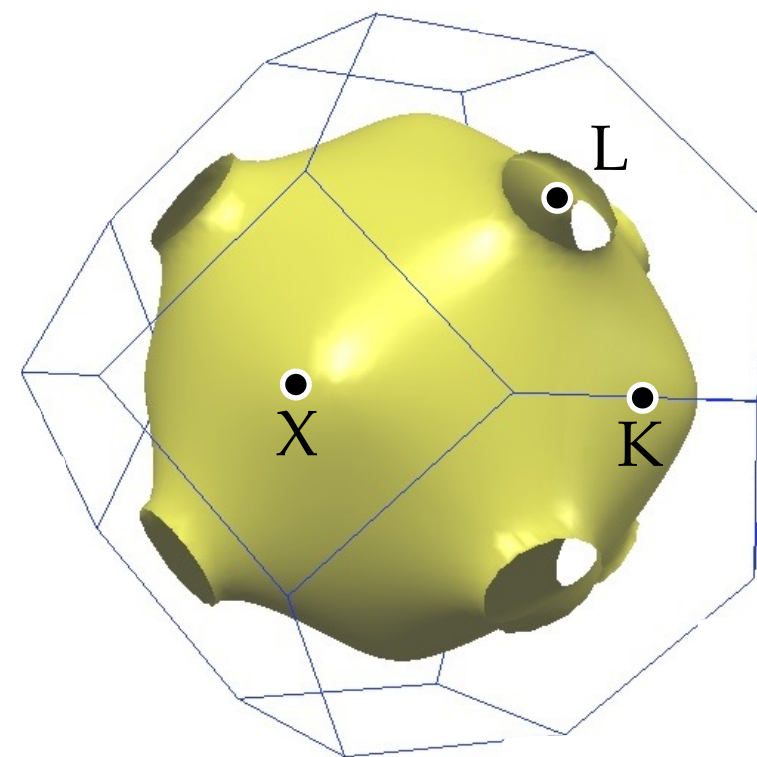
エネルギー E



フェルミ
準位 E_F

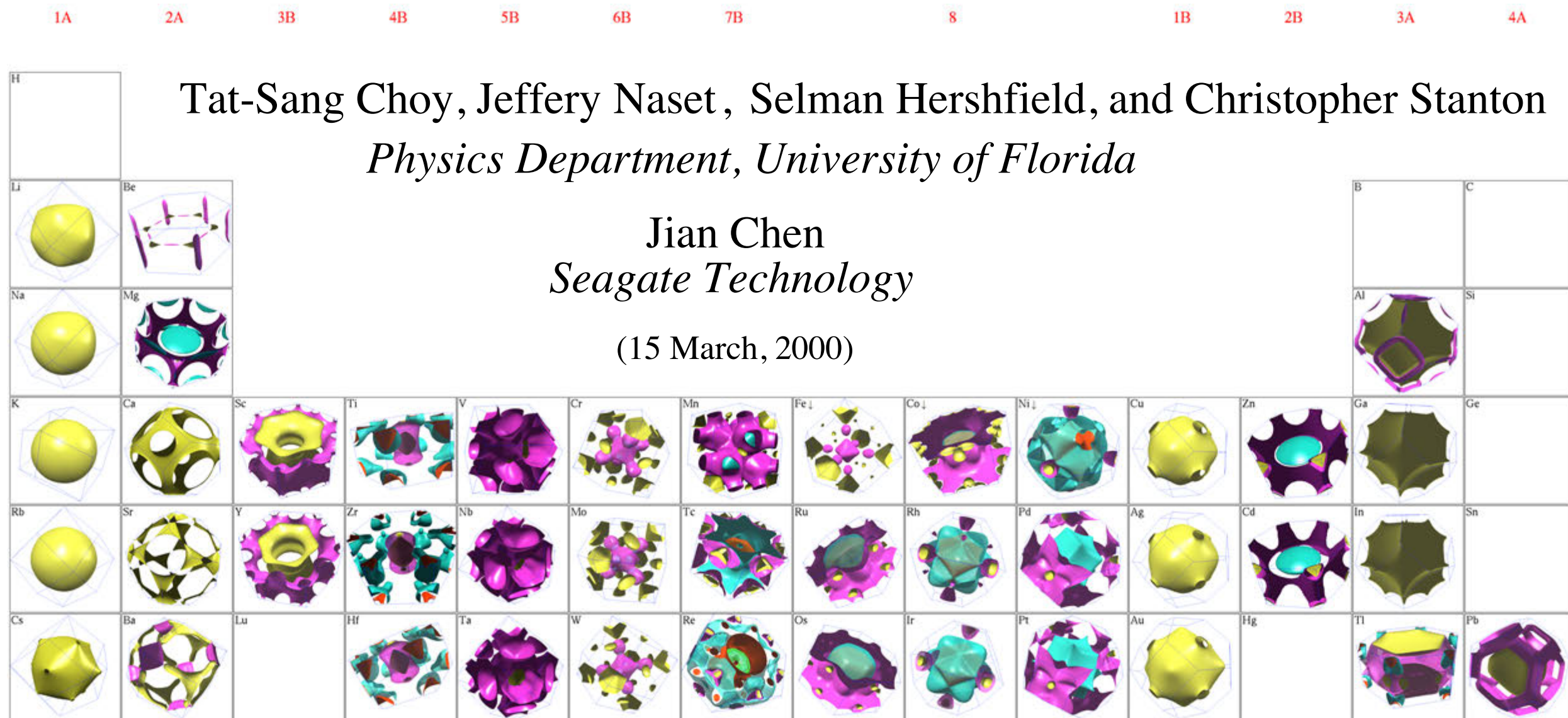
s 軌道

d 軌道



典型金属と遷移金属

<http://www.phys.ufl.edu/fermisurface>



Tat-Sang Choy, Jeffery Naset, Selman Hershfield, and Christopher Stanton
Physics Department, University of Florida

Jian Chen
Seagate Technology

(15 March, 2000)

← d 電子による複雑なフェルミ面 →

典型金属

← 遷移金属 →

典型金属

まとめ

~~ 電子構造の異方性 ~~

1. フェルミ面の概形は、**結晶構造** と **電子数** で決まる。
2. 結晶波数の周期性に従って、
自由電子バンドを折り畳め (空格子近似)。
3. 周期場が強くなると、フェルミ面がブラッグ面に吸い込まれ、
フェルミ面が消えたら、絶縁体になる。
4. n_{uc} が、奇数なら **金属**、偶数なら **半金属** または **絶縁体**。

残された謎

周期場によって、電気抵抗は生じないが、
分散関係が変更される。

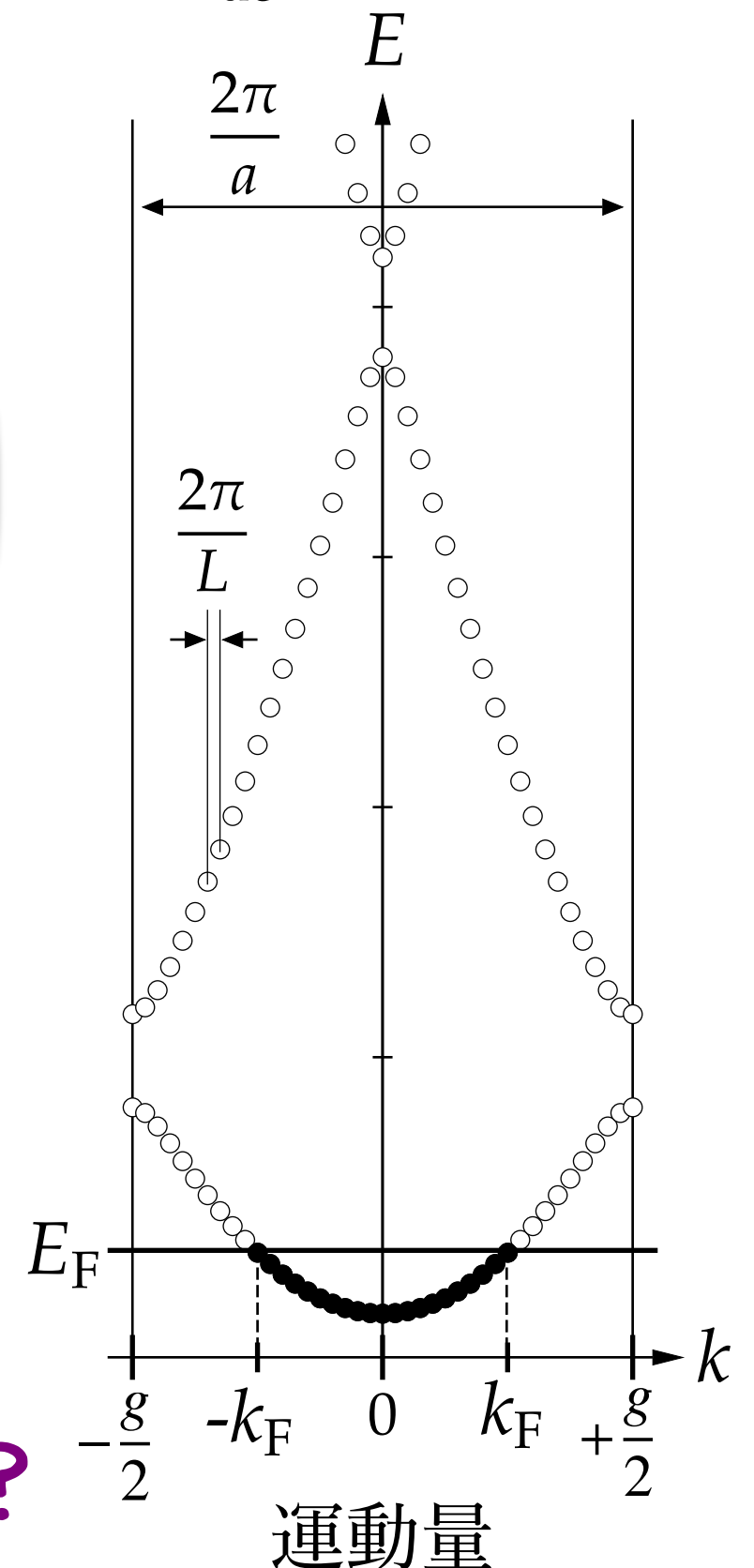
$E \propto \mathbf{p}^2$ が成り立たない世界

電子に運動量を与えると、
BZの境界で、**定在波に**、
境界を超えると、運動量が **逆向きに!!!**

→ 古典力学の破綻

ドルーデの式は、どうなっちゃうの？

(a) $\frac{N_e}{N_{uc}} = 1$, 半占有



次回

運動量とは何なのか

第8講 波束としての電子

次回

速度の定義をやり直せ

第8講 波束としての電子

次回

常識を疑え

第8講 波束としての電子