

第二部 量子ナノエレクトロニクスの基礎

固体中の電子は原子核や他の電子と相互作用する。これらの相互作用は1電子有効ポテンシャルで近似的に記述できる(独立電子近似)。この1電子有効ポテンシャルは結晶の原子配列と同じ周期性をもつ。

周期ポテンシャルの中で電子は奇異な振る舞いをする。ある範囲のエネルギーをもつ電子は結晶中に進入できない。一方、これとは別の範囲のエネルギーでは進入できるばかりか、全く散乱されずに運動する。散乱されない点で、結晶中の電子の振る舞いは真空中のそれに似る。散乱源になりえるイオンが多数存在するのに真空中と同じように振舞うのは奇異である。さらに結晶中では電子の質量がとても小さくなることもある(多くの化合物半導体中で電子の質量は真空中の $1/10 \sim 1/25$ になる)。結晶内で電子に何が起きているのだろうか?探ってみよう。

6. 周期ポテンシャルとブロッホ関数

結晶内における電子の振る舞いの特異性は、ポテンシャルの周期的変化が1方向だけの場合でも現れる。本質を失わない単純化として1次元周期ポテンシャル空間を考える。

一次元シュレーディンガー方程式の固有関数を考察する。まずは自由空間の固有関数を。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} = E\psi(z) \quad (1)$$

E は固有値、 $\psi(z)$ は固有関数である。 m は電子質量、 $\hbar$ はプランク定数を 2π で割った値。固有値方程式(1)の固有関数は次のように簡単に導かれる。

$$\psi(z; k) = \exp(ikz), \quad \exp(-ikz) \quad \text{ただし} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (2)$$

この固有関数を別の方法で導き出すことができる。この方法は上の方法と比べて面倒であるが周期ポテンシャル中の固有関数の一般的性質を導き出すのに有用である。以下でそれをやってみる。

式(1)の固有解 $\psi(z)$ が得られているとする。そのとき u を任意の距離として $\psi(z+u)$ も式(1)の固有値 E に属する解である。なぜなら次式が成り立つからである。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(z+u)}{dz^2} = E\psi(z+u) \quad (3)$$

変数変換 $v = z + u$ を施す。式(3)は次の式になる。 $\frac{dv}{dz} = 1$ であることに注意。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(v)}{dv^2} = E\psi(v) \quad (4)$$

これは式(1)と同形である。ただ変数名が変わっただけである。よって成り立つ。

以上により $\psi(z)$ と $\psi(z+u)$ とは共に同じ固有値 E に属する固有関数である。同じ固有値に属する固有関数は、縮退していて独立な場合と、従属な場合とがあるが、ここでは従属な場合を考える。従属な固有関数は互いに定数倍の関係になっている。すなわち

$$\psi(z+u) = C\psi(z) \quad (5)$$

ここに C は u にも z にも依存しない定数である。ところで二つの固有関数は共に規格化されている。すなわち、規格化区間長を L として、次が成り立つ。

$$\int_L |\psi(z+u)|^2 dz = 1 \quad \text{かつ} \quad \int_L |\psi(z)|^2 dz = 1 \quad (6)$$

第一の式の左辺に式 (5) を代入し、第二の式を用いると

$$\int_L |\psi(z+u)|^2 dz = \int_L |C\psi(z)|^2 dz = |C|^2 \int_L |\psi(z)|^2 dz = |C|^2$$

となる。これが右辺の 1 に等しくなければならないから、結局、定数 C は $|C|^2 = 1$ を満たさなければならない。すなわち $C = \exp(i\theta)$ 。さらに θ は u に比例しなければならない。すなわち $\theta = ku$ (k は定数) である。それは、次の例から明らかである。

$$\psi(z+2u) = \exp(i\theta)\psi(z+u) = \{\exp(i\theta)\}^2 \psi(z) = \exp(i2\theta)\psi(z)$$

結局、
$$\psi(z+u) = \exp(iku)\psi(z) \quad (7)$$

なる関係が成り立たなければならない。

ここまでで固有関数の一般的な性質を導き出した。さらに具体的に、式 (7) の関係は

$$\psi(z) = \exp(ikz) \quad (8)$$

のとき成り立つ。これを式 (1) に代入することで、比例定数 k の値は式 (2) のように決まる。ここで重要な点は、自由空間のエネルギー固有関数は伝搬波であり、伝搬定数 k によって分類できることである。

周期ポテンシャルをもつシュレーディンガー方程式に、式 (7) を導いた手順を適用しよう。そして今度は周期ポテンシャル中の固有関数が満たすべき条件を導き出す。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + V(z)\psi(z) = E\psi(z) \quad (9)$$

ここに $V(z+a) = V(z)$ ただし a は格子周期 (10)

式 (9) の固有解 $\psi(z)$ が得られているとする。そのとき n を任意の整数として $\psi(z+na)$ も式 (1) の固有値 E に属する解である。それを示すには次の式が成り立つことを示せばよい。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(z+na)}{dz^2} + V(z)\psi(z+na) = E\psi(z+na) \quad (11)$$

変数変換 $v = z + na$ を施す。 $\frac{dv}{dz} = 1$ 、 $V(v-na) = V(v)$ であることにより、式 (11) は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(v)}{dv^2} + V(v)\psi(v) = E\psi(v) \quad (12)$$

になる。これは式 (9) と同形である。変数名が変わっただけである。よって成り立つ。

以上により $\psi(z)$ と $\psi(z+na)$ とは共に同じ固有値 E に属する固有関数である。同じ固有値に属する固有関数は、縮退していて独立な場合と、従属な場合とがあるが、ここでは従

属な場合を考える。従属な固有関数は互いに定数倍の関係になっている。すなわち

$$\psi(z + na) = C\psi(z) \quad (13)$$

ここに C は n にも z にも依存しない定数である。ところで二つの固有関数は共に規格化されている。すなわち規格化区間長を L として、次が成り立つ。

$$\int_L |\psi(z + na)|^2 dz = 1 \quad \text{かつ} \quad \int_L |\psi(z)|^2 dz = 1 \quad (14)$$

$$\int_L |\psi(z + na)|^2 dz = \int_L |C\psi(z)|^2 dz = |C|^2 \int_L |\psi(z)|^2 dz = |C|^2$$

となる。これが右辺の 1 に等しくなければならないから、結局、定数 C は $|C|^2 = 1$ を満たさなければならない、 $C = \exp(i\theta)$ 。さらに θ は n に比例することが要求される。すなわち $\theta = nh = nka$ (h は実定数、 $k = h/a$) である。それは、次から明らかである。

$$\psi(z + na) = \{\exp(ih)\}^n \psi(z) = \exp(inh) \psi(z)$$

$$\text{結局、} \quad \psi(z + na; k) = \exp(ikna) \psi(z; k) \quad (15)$$

なる関係が成り立たなければならない。

ここまでで周期ポテンシャルに対する固有関数が備えるべき一般的な性質を導き出した。すなわち周期 a の一次元周期ポテンシャル中のエネルギー固有関数は、任意の整数値 n に対して式 (15) を満たし、定数 k で分類することができる。

具体的に、固有関数を

$$\psi(z) = u_k(z) \exp(ikz) \quad \text{すなわち} \quad u_k(z) = \psi(z) \exp(-ikz) \quad (16)$$

の形で表し、式 (15) を適用すると (ここで式 (15) に含まれる k と同じ k を選んで用いたことに注意)

$$\begin{aligned} u_k(z + a) &= \psi(z + a) \exp(-ikz) \exp(-ika) \\ &= \exp(ika) \psi(z) \exp(-ikz) \exp(-ika) = \psi(z) \exp(-ikz) = u_k(z) \end{aligned} \quad (17)$$

となり、 $u_k(z)$ は a を周期とする周期関数である。

結局、周期ポテンシャル中の固有関数が満たすべき条件は式 (15) であり、これはポテンシャルと同じ周期をもつ周期関数と伝搬因子との積の形をもつ関数、式 (16) によって満たされる。これがブロッホの定理である。 k とエネルギー E との関係は具体的に $V(z)$ を与えて決めることができる。

$\psi(z)$ はいたるところで滑らかに連続である (量子力学の要請)。よって $u_k(z)$ もいたるところ滑らかに連続である。

7. クローニッヒ・ペニー・モデル（厳密数値解）

7. 1 ブロッホ関数定式化

図1の矩形周期ポテンシャル分布（クローニッヒ・ペニー・モデル）に対する E 、 k および $u(z)$ を求める。

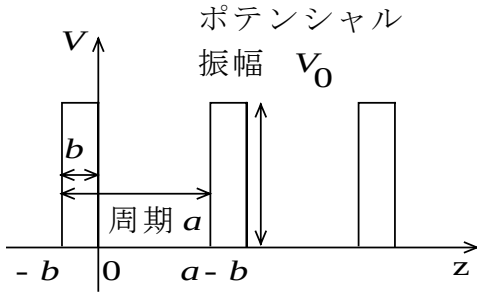


図1 周期ポテンシャル
(クローニッヒ・ペニーモデル)

式(1)のブロッホ関数解を求めると関数 $u(z)$ は次になる。

$$\begin{aligned} u(z) &= \{A \exp(i\alpha z) + B \exp(-i\alpha z)\} \exp(-ikz) \quad 0 \leq z \leq a-b \\ &= \{C \exp(i\beta z) + D \exp(-i\beta z)\} \exp(-ikz) \quad -b \leq z \leq 0 \end{aligned} \quad (4)$$

ここに $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ 、 $\beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)$ である。 $z=0$ の両側および $z=-b$ と $a-b$ において、6 に述べたように $u(z)$ は滑らかに連続でなければならない。これより次の4つの方程式が成り立つ。

$$u(0+) = u(0-) \quad \left. \frac{du}{dz} \right|_{0+} = \left. \frac{du}{dz} \right|_{0-} \quad u(a-b) = u(-b) \quad \left. \frac{du}{dz} \right|_{a-b} = \left. \frac{du}{dz} \right|_{-b}$$

ただし ε は正の実数であるとして、 $0+$ は $z = \varepsilon$ ($\varepsilon \rightarrow 0$) の意味、また $0-$ は $z = -\varepsilon$ ($\varepsilon \rightarrow 0$) の意味である。この条件を満たし $A = B = C = D = 0$ 以外の解が存在する条件より次の分散 ($E-k$) 関係式を得る。

$$\cos(ka) = \cos(\alpha(a-b)) \cos(\beta b) - \frac{2E - V_0}{2\sqrt{E(E - V_0)}} \sin(\alpha(a-b)) \sin(\beta b) \quad (5)$$