

## 7. 2 分散関係と波動関数の数値解

$k$ を与えて式(5)を解くと  $E$ が複数決まる (図 2a)。各  $E$ に対して上の 4 方程式の内の 3 つを解き  $B, C, D$ を  $A$ で表し関数  $u(x)$  に代入し規格化して  $A$ を決める (図 2b)。

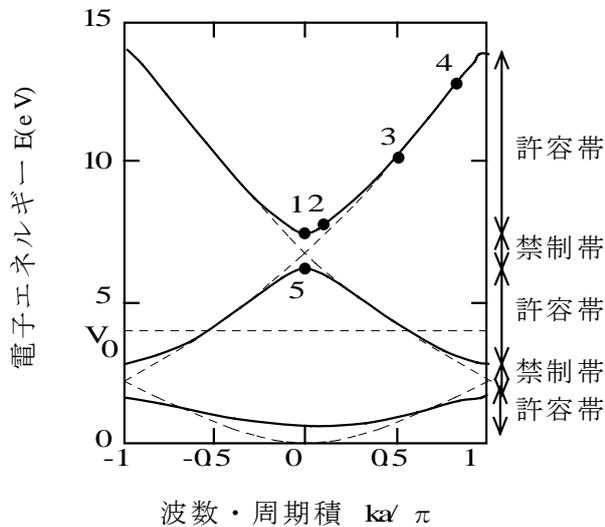


図 2a  $E$ - $k$  関係図  
( $V_0=4\text{eV}$ 、 $a=0.5\text{nm}$ 、 $b=0.1\text{nm}$ )

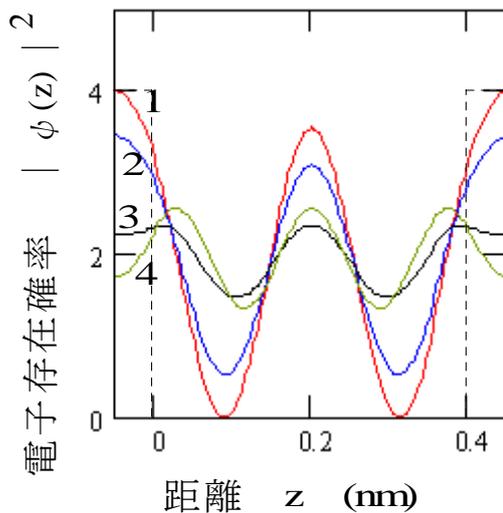


図 2b 波動関数の様子  
ラベル 1 から 4 は図 2a と対応

$ka$ に対してエネルギー $E$ をプロットした図 2a を次のように見よう。エネルギー $E$ を与えて対応する  $ka$ の値を読み取る (実際、式(5)はエネルギーを与えるると  $ka$ が陽に計算できる)。そうするとあるエネルギー範囲では値 (実数値) を読み取ることができる。しかしこのように値が読み取れないエネルギー範囲が存在する。後から述べるが読み取れない範囲では  $ka$ が虚数値になっている。実数値  $ka$ が対応するエネルギー範囲を許容帯 (以下バンド)、虚数値が対応するエネルギー範囲を禁制帯 (以下バンドギャップ) と呼ぶ。

### 7. 3 バンドギャップと定在波

バンド(図 2a)では電子の波動関数、式(3)、は  $k$  が実数であることから伝搬波因子  $\exp(ikz)$  をもつ。したがって結晶内を伝搬する波動関数をもつ。この点で真空中の電子の波動関数  $\exp(ikz)$  と似ている。一方、バンドギャップでは  $k$  は虚数になる。因子  $\exp(ikz)$  は今度は伝搬波ではなく減衰波となる。すなわち結晶中を伝搬していくことなく反射する。

図 2b の 1 周期分の電子存在確率分布を見よう (図 2b 中のラベルは図 2a 中のラベルと対応している)。ラベル 1 の曲線を見ると  $z = 0.09$  および  $0.32 \text{ nm}$  で確率密度が零になっている。電子は、例えば  $z = 0.09 \text{ nm}$  の面を通過していない。すなわち確率密度が零になる二つの面の間から外に流れ出していない。格子の 1 周期内のさらに狭い範囲内で電子は行ったり来たりしている。この現象は、振幅が等しい前進波  $\exp(ikz)$  と後進波  $\exp(-ikz)$  とが重なり合っただけで定在波  $\cos kz$  が立っているときに起きる。ラベル 1、 $ka=0$ 、あるいはバンドの底の状態は、波動関数が定在波になっている状態であり、そのとき電子は格子の 1 周期を越えて移動していない。

次にバンド中央の状態 (ラベル 3) を見てみよう。確率密度分布は、直流成分に小さな振動が重畳されており、次の式で表せそうである。

$$|\exp(ikz) + B \exp(-ikz)|^2 = 1 + B^2 + 2B \cos 2kz \quad (\text{ただし } B \text{ は実数で } 1 \text{ より小の時})$$

このとき電子は  $+z$  方向に流れる。したがって  $k$  を零から増加させる ( $E-k$  図においてバンドの底から中央に向けて状態を移す) と電子は移動するようになる (図 2b の曲線 2,3)。これは前進波に比べて後進波振幅が減少し、定在波のバランスが崩れたためと解釈できる。この検証は次の節で行う。

図 2a には破線曲線も描かれている。これは図 1 のポテンシャル振幅  $V_0$  を零にしたとき (周期ポテンシャルが無いとき) の  $E-k$  曲線である。前進波と後進波との結合によって分散曲線が変化している。この変化は  $ka=0$  および  $\pm\pi$  付近で顕著である。これらは周期ポテンシャルによる前進波と後進波との結合 (ブラッグ反射) が強く生じる点である。

## 7. 4 結晶中電子の奇異な振る舞いの起源

冒頭で述べた奇異な振る舞いの解釈が得られそうだ。簡単のために1次元モデルで考えている。そのために散乱は後方散乱のみである。電子が粒子ならば散乱源の一つに衝突しただけで散乱されるだろう。しかし波動ならばいくつもの散乱源を同時に見て、多くの散乱源からの散乱波が重なり合って散乱が生じる。

今散乱源は等間隔で規則的に並んでいる。これらからの後方散乱波が重なり合うと干渉を起こす。干渉が建設的(位相が合って振幅が足し合わされる)ならば波動は強めあうが、破壊的(位相が180度ずれていて振幅が引き算される)ならば波動は打ち消し合う。規則的に並んだ散乱体から一定間隔の位相差で散乱波が発生する。これらが均一に加算されるとすると、180度に近い位相差をもつ散乱波対が存在し、互いに打ち消し合う。

上記の結果として散乱波は打ち消し合って抑制される。結晶中の電子は散乱が抑制される。イオンが多数存在しているにもかかわらず電子は真空中と同様の伝搬をする。ところがすべての散乱波が建設的に干渉する場合がある。それは散乱が強調される場合すなわちブラッグ反射である。これが奇異な現象の起源だ。

もう一つの奇異、軽い質量の起源は何か？ブラッグ反射による建設的な干渉が生じると波動関数は定在波になって伝搬しなくなり電子は止まる。結晶中でブラッグ反射によって動きを止められている電子は、波長を変化させて建設的干渉を崩してやれば動き出す。この動きだし易さ(難さ)が実効的な質量を決める。したがって建設的干渉状態がどれほど強固かが実効的な質量を決める。このために軽い質量も起こり得る。

以上の解釈を近似解析理論で確認し定量的議論に発展させるのが次の節の主題である。