

電子物性学

第十回 バンドギャップの形成

※資料の転用・配布などの二次利用は固く禁じます

先週やったこと

ブロッホの定理

周期ポテンシャル中の電子の波動関数は

$$\phi_k(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_k(\mathbf{r})$$

となる。ここで $u_k(\mathbf{r})$ は

$$u_k(\mathbf{r}) = u_k(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n)$$

$$\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \quad (\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3 \text{ 基本並進ベクトル})$$

を満たす

今週やること

周期ポテンシャルは

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) \quad \text{を満たすので} \quad V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}_m} V_{\mathbf{G}_m} e^{i\mathbf{G}_m \cdot \mathbf{r}} \quad \text{と展開できる}$$
$$\mathbf{G}_m = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3 \quad (\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3 \text{ 逆格子の基本ベクトル})$$

プロッホ関数 $\phi_k(\mathbf{r})$ に含まれる $u_k(\mathbf{r})$ も

$$u_k(\mathbf{r}) = u_k(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) \quad \text{を満たすので} \quad u_k(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}'_m} C_{\mathbf{G}'_m} e^{i\mathbf{G}'_m \cdot \mathbf{r}} \quad \text{と展開できる}$$

この $\phi_k(\mathbf{r})$ と $V(\mathbf{r})$ が入った 1 電子のシュレーディンガーエネルギー方程式を考える

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right\} \phi_k(\mathbf{r}) = E \phi_k(\mathbf{r})$$