

第 6 回

応用物理学実験

題目	光吸収
----	-----

氏 名 : 西原 翔

学 籍 番 号 : 1522068

学部学科学年 : 理学部第一部応用物理学科 3 年

共同実験者:1522064 中井空弥
1522091 宮田崇杜
1522095 村山涼矢
1522B02 中村洸太

提出年月日:2024 年 10 月 03 日
実験実施日:2024 年 09 月 20 日
2024 年 09 月 27 日

東京理科大学理学部第 1 部
応用物理学教室

1 目的

新しい試料を作ったときにまず何を測定するのか。それはまずサンプルを「見る」ことから始めるものである。つまり、物質の光学応答の測定こそが物質を調べる基本なのである。

この実験では分光光度計を使い金属 (Au, Ag) の光学応答を波長ごとに調べることで、金属の特徴である金属光沢という光学的性質をスペクトル測定をした。また、分光は試料の電子構造を知る上で大きな役割を果たしている。半導体はエネルギーギャップがあるという特徴的な電子構造を持っている。このエネルギーギャップに由来する光学特性を確認するため、半導体である SrTi₃, CdS, GaAs の光学応答を調べた。

また、光学現象を解析する上で第一原理計算によるバンド図の計算や誘電関数の計算を行い、第一原理計算でしめす振る舞いの特徴を調べた。

2 原理

光学応答を表すパラメータ

光学応答を表すパラメータは等価なものとして、(複素) 誘電率、(複素) 屈折率、反射率・透過率、の3つがある。

誘電率は光学現象を微視的な観点から説明する際に用いられるものである。光は電磁場であることが知られているが、磁場による相互作用は電場に比べて弱い。なの基本的には光は磁気相互作用のない電場であると考え、そのような電場を光電場と呼ぶ。光電場 E が媒質中に入ったとき、媒質中の電荷分布はその光電場によって偏り、分極 P が生じる。その関係式を $P = \epsilon_0 \chi E$ というように比例するとしたとき、媒質中での電束密度 D は

$$D = \epsilon_0 E + P = \epsilon_0(1 + \chi)E \quad (1)$$

というように書くことができる。このとき、電場によって励起された分極 P の影響を誘電率に取り込んで真空と同じように扱う。つまり、媒質中では誘電率が $\epsilon = \epsilon_0(1 + \chi)$ の真空であると考ええる。この媒質の持つ誘電率というパラメータは実際には相互作用が伝播していく速度が有限であることから、周波数に依存すると考えると扱いやすい。このように周波数で誘電率を扱ったものを誘電関数という。

実際には光電場はすべて分極を作るのに使われるのではなく、電流や熱になる。熱になるのは少なく、電流になるのがほとんどであるのでこれについて考える。オームの法則により $j = \sigma E$ と書ける。時間をフーリエ変換したアンペール・マクスウェルの式にこれらの式を入れると

$$\nabla \times H(\omega) = j(\omega) - i\omega D = -i\omega \left(\epsilon + \frac{i\sigma}{\omega} \right) E(\omega) \quad (2)$$

となる。これを見ると

$$\tilde{\epsilon}(\omega) = \epsilon(\omega) + \frac{i\sigma}{\omega} \quad (3)$$

として複素数で誘電関数を書くと同様ような形

$$\nabla \times H(\omega) = -i\omega \tilde{\epsilon}(\omega) E(\omega) \quad (4)$$

で書くことができる。これを複素誘電関数や複素誘電率と呼ぶ。このように複素誘電率は電場と分極の関係から導かれたものである。電場と電子の相互作用をモデル化すれば具体的な式の形はわかるものの、実際の目に見える光学現象との対応がわかりにくく、直接測定することはできない。

これをすこし取り扱いしやすくしたのが屈折率である。屈折率は媒質中を通る光電場の様子を用いて光学応答を表すものである。複素誘電率 $\tilde{\epsilon}$ の媒質中では、光の速度は

$$c' = \frac{c}{\sqrt{\tilde{\epsilon}/\epsilon_0}} \quad (5)$$

と書ける。これは光学における媒質による光速の違いを表す式

$$c' = \frac{c}{n} \quad (6)$$

に対応している。ここでの n は屈折率と呼ばれ光学では実数であるが複素数に拡張してみる。複素屈折率を

$$\tilde{n} = n + i\kappa = \sqrt{\tilde{\varepsilon}/\varepsilon_0} \quad (7)$$

というように定義する。これを複素屈折率と呼び複素を付けず単に屈折率といったときには複素屈折率の実部を指し、虚部は消衰係数と呼ばれる。これらと誘電関数の実部と虚部を $\varepsilon_1 = \text{Re}(\tilde{\varepsilon}/\varepsilon_0)$, $\varepsilon_2 = \text{Im}(\tilde{\varepsilon}/\varepsilon_0)$ の間には

$$n^2 - \kappa^2 = \varepsilon_1, \quad 2n\kappa = \varepsilon_2 \quad (8)$$

という対応関係があるこれを使うと複素屈折率 \tilde{n} の媒質中を通る光を次のよう表せる。

$$E = E_0 e^{-i\omega(t - \tilde{n}x/c)} = E_0 e^{-\omega\kappa x/c} e^{-i\omega(t - x/(c/n))} \quad (9)$$

この表式よりに媒質中を通る光の速度とその減衰の様子を表してるのがわかる。波動現象によってはこの量は測定しやすい。光においてはこの量は干渉計や光の強度を測定することで求めることができるものの、これでもまだ煩雑である。

より直接的に測定できる量は反射率と透過率である。2つの媒質の境界面に入射する光の強度を $|E_i|^2$, その面で反射する光の強度を $|E_r|^2$, その面を透過する光の強度を $|E_t|^2$ としたときに、反射率 R と透過率 T は

$$R = \frac{|E_r|^2}{|E_i|^2}, \quad T = \frac{|E_t|^2}{|E_i|^2} \quad (10)$$

というようにあらわされる量である。この量は試料を反射した光との強度を測定することで得られる量である。そのため直感的にわかりやすく、測定もしやすい量である。

反射率・透過率、複素屈折率は電場の境界面における境界条件を計算すると結びつけられる。複素屈折率が \tilde{n}_1 の媒質から複素屈折率が \tilde{n}_2 の媒質へ垂直に入射するときには

$$t = \frac{2\tilde{n}_1}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2}, \quad r = \frac{\tilde{n}_2 - \tilde{n}_1}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} \quad (11)$$

という量を用意するとこの面での反射光と透過光は

$$E_{r1} = r_1 E_i, \quad E_{t1} = t_1 E_i \quad (12)$$

と書ける (p 偏光におけるフレネルの式)。このとき光のエネルギーについてポインティングベクトルを考慮すると、反射光は入射光と同じ媒質を伝播するので単に

$$R = |r|^2 = \left| \frac{\tilde{n}_2 - \tilde{n}_1}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} \right|^2 \quad (13)$$

というように対応づけることができる。透過光は伝播する速度が入射光・反射光と違うため $T \neq |t|^2$ であり、

$$T = 1 - R = \frac{2(\tilde{n}_1^* \tilde{n}_2 + \tilde{n}_1 \tilde{n}_2^*)}{|\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2|^2} \quad (14)$$

となる。とくに、 $\tilde{n}_1 = 1, \tilde{n}_2 = \tilde{n}$ のときには

$$R = \left| \frac{1 - \tilde{n}}{1 + \tilde{n}} \right|^2 \quad (15)$$

$$T = \frac{4n}{|1 + \tilde{n}|^2} \quad (16)$$

と書ける。光が透過するときには実際の試料では光が入射する面と出ていく2つの面があり、この2つの面の間で多重反射した光が透過光強度として測定される。試料の面の法線方向から θ だけ傾いた方向から光が入射したとして、試料の厚さを d , 吸収係数と呼ばれる量を $\alpha = 2\omega\kappa/c$ を使うと、このときの透過率 T' と反射率 R' は

$$T' = \frac{(1 - R^2) \exp(-\alpha d \cos \theta)}{1 - R^2 \exp(-2\alpha d \cos \theta)} \quad (17)$$

$$R' = R(1 + T' \exp(-\alpha d \cos \theta)) \quad (18)$$

となる。実際に測定される透過率・反射率は試料自身の誘電関数から得られる方ではなくこの量である。この式を $\alpha d \cos \theta$ と R について解くと

$$\alpha d \cos \theta = \arcsin \left(\frac{(1 - R')^2 - T'^2}{2T'} \right) \tag{19}$$

$$R = \frac{R'}{1 + T' \exp(-\alpha d \cos \theta)} \tag{20}$$

以上より誘電関数と反射率・透過率がきちんと対応することが分かった。実験から反射率と透過率を測定し、それを説明するような誘電関数を導くモデルが作れたのなら、それが光学現象の機構であると考えられるのがわかる。

3 実験

タングステンランプと重水素ランプを用いた分光光度計である Hitach U-3900 を用いて金属 (Au, Ag) と半導体 (GaAs, ウルツ鉱型 CdS, SrTiO₃) の反射率測定を 200nm - 1050nm の領域で行った。また半導体試料については透過率測定も同様に 200nm - 1000nm の領域で行った。透過率測定を行った試料の厚さは 0.5 mm であった。

4 結果

試料の反射率の測定結果は図 1 のようになった。ここでの反射率の値は理科年表 [1] の値に比べ小さくなっている。なので光の散逸がとても大きい結果であることに注意する必要がある。金属試料である Au と Ag、半導体試料である GaAs, CdS, SrTiO₃ では反射率の振る舞いが違うのがわかる。金属試料は高エネルギーでは反射率が低く、ある波長よりも低エネルギーになると反射率が高くなっているのに対し、半導体試料では反射率は金属試料試料ほどの大きな変化はしていない。金属のこの波長に対応する光の振動数はプラズマ振動数と呼ばれている。高エネルギーになると反射率は大きくなっている。また、反射率の波長依存性は試料がどのように見えるかに直接かかわってくる (課題 3)。反射率が大きい波長の光は見え、低いところの波長は見えない。図 1 の結果より、金は緑色から青色の光はなく、赤色から緑色の光が重ね合わさった色が見える。つまり黄色の物質として見えるというこのスペクトルからわかる。残りの試料については課題のセクションで言及する。

試料の透過率の測定結果は図 2 のようになった。ある波長より高エネルギーになると透過率が 0 になり試料が光を通さなくなることがわかる。この波長を反射率の方でも確認すると反射率の値が階段状になっているのに気付く。これは半導体のバンドギャップに由来する振る舞いであると理解され、この波長に対応する光子エネルギーが半導体のエネルギーギャップである。これよりエネルギーギャップは SrTiO₃ が 3.23 eV, CdS が 2.38 eV, GaAs が 1.40 eV であるのがわかる。

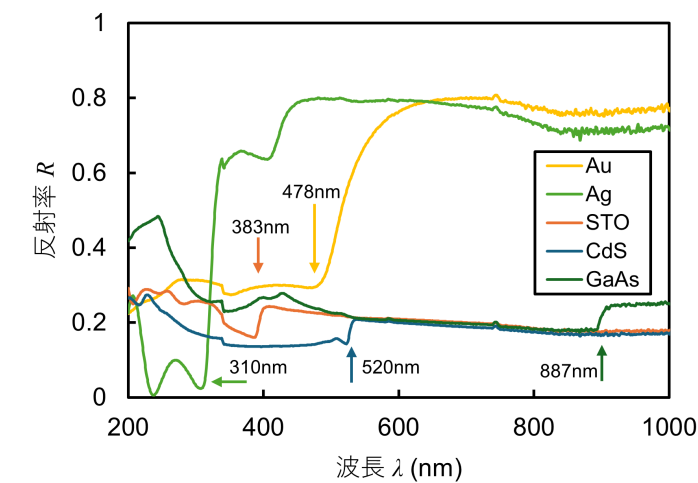


図 1: 金属 (Au, Ag) と半導体 (GaAs, ウルツ鉱型 CdS, SrTiO₃) の反射率の測定結果。金属はプラズマ振動数、半導体はエネルギーギャップに対応する波長が書き込んである。

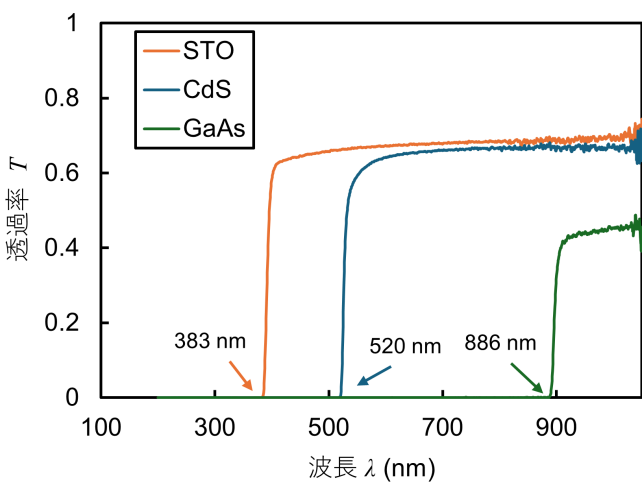


図 2: 半導体 (GaAs, ウルツ鉱型 CdS, SrTiO₃) の反射率の測定結果。エネルギーギャップに相当する波長で透過率が大きく変化している。

5 考察

反射率と透過率の測定結果を他のパラメータに読み替えて結果を分析していく。(19) 式と (20) を使って半導体試料の測定した反射率・透過率から吸収係数 α を求めると図 4 のようになった。測定装置の測定できる強度の精度は 1.0×10^{-5} までである。これより小さい値は測定データとしては非正の値となるため、計算の都合上 1.0×10^{-5} であるとして処理をした。いずれも透過率が大きく変化した波長において吸収係数が大きく変化しているのがわかる。半導体のエネルギーギャップ付近吸収係数の変化の仕方に注目すると、SrTiO₃ と CdS, GaAs で違うのがわかる。SrTiO₃ では対数プロットで傾きがあるのがわかるのに対して、CdS, GaAs ではほとんど垂直に変化している。これは半導体のエネルギーギャップでの電子の励起が直接遷移型であるか、間接遷移型であるかで説明される。CdS と GaAs のバンド図を Quantum espresso という第一原理計算のソフトを使ってバンド図を計算すると、図 3 のようになった。^{*1}これを見ると波数空間の原点である Γ にて直接遷移が起きるのがわかる。またこのバンド図よりエネルギーが CdS では 1.4 eV, GaAs では 1.2 eV であるのも読み取れる。この値が小さく出るのは第一原理計算の仕組み上不可避である。[2]

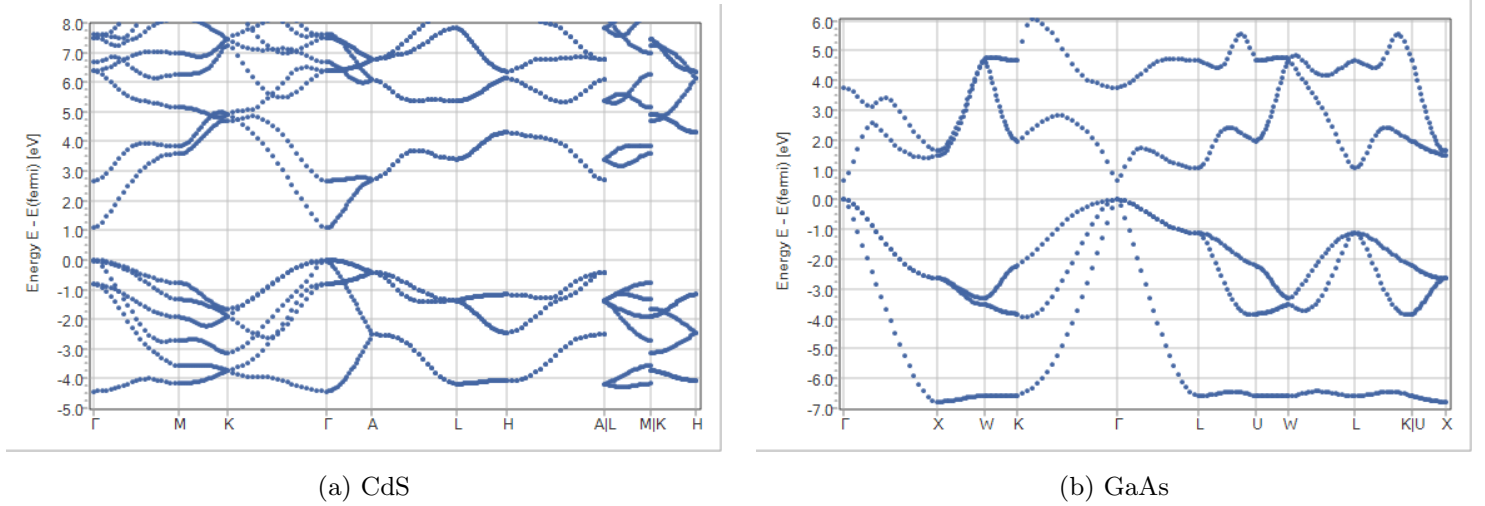


図 3: Quantum espresso で計算した直接遷移型の半導体のバンド図

エネルギーギャップの大きさを E_g , 間接遷移にかかわる格子振動との散乱のエネルギーを $\hbar\Omega$ としする。光のエネルギーが $\hbar\omega \gtrsim E_g$ では吸収係数 α は直接遷移において

$$\alpha \propto \frac{\sqrt{\hbar\omega - E_g}}{\hbar\omega} \quad (21)$$

間接遷移において

$$\alpha \propto \frac{1}{\hbar\omega} \left[\frac{(\hbar\omega + \hbar\Omega - E_g)^2}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} + \frac{(\hbar\omega - \hbar\Omega - E_g)^2}{e^{-\beta\hbar\omega} - 1} \right] \quad (22)$$

になることがブロッホ電子について、周期的な外場のある摂動論を計算するとわかる [3]。これの $\hbar\omega \gtrsim E_g$ での傾きを考えると、直接遷移の傾きは $1/(\hbar\omega - E_g)$, 間接遷移での傾きは 0 となる。吸収係数の測定結果 (図 4) のエネルギーギャップでの振る舞いの違いは確かに表れるのがわかる。これを踏まえてこれらの関数でフィッティングすると図 5 のようになる。^{*2}結果としては実験中に指示された直線によるフィッティングと同じことをやっているが、バンドギャップ付近だけではなくより高エネルギーにおいても使えるものになっている。

^{*1} どんなパラメータのもと、どんな疑ポテンシャルを使ったのかは割愛する。

^{*2} SrTiO₃ のフィッティングは間に合いませんでした。

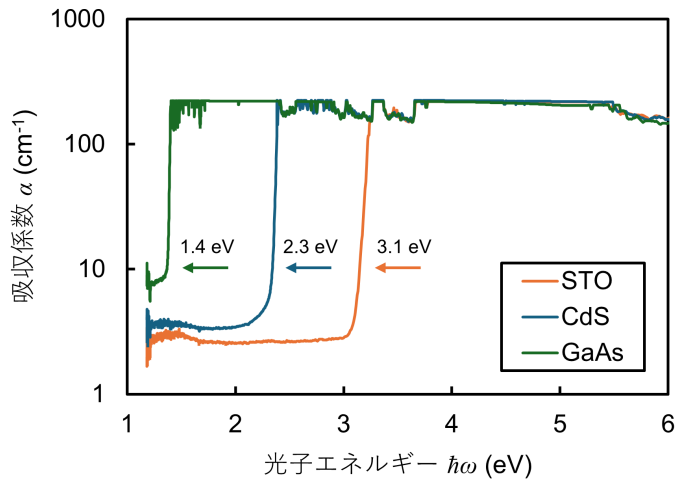


図 4: 半導体 (GaAs, ウルツ鉱型 CdS, SrTiO₃) の各波長における吸収係数

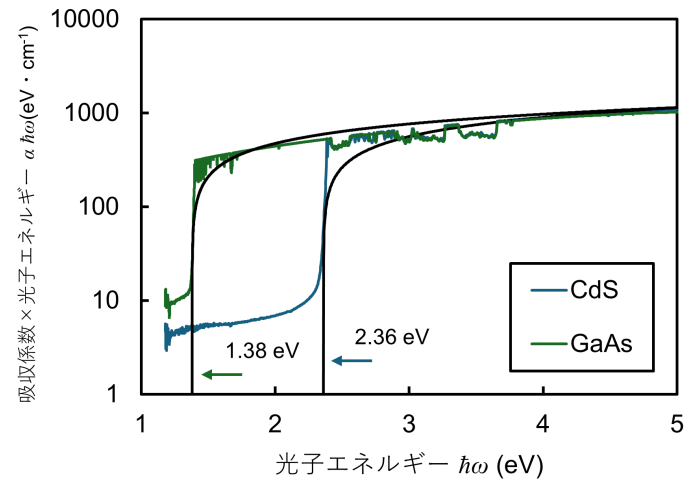


図 5: 直接遷移型半導体 GaAs, ウルツ鉱型 CdS, SrTiO₃ の吸収係数を (21) 式を使ってフィッティングしたグラフ

また吸収係数 α と複素屈折率の虚部 κ の間には

$$\alpha = \frac{2\omega\kappa}{c} \quad (23)$$

という関係が成り立っている。これをこれをもとに複素屈折率の虚部の大きさを調べると $\kappa \sim 10^{-5}$ のオーダーの量になる。つまり今回の測定では試料が厚いため複素屈折率の虚部の虚部は考えずに実部だけを考えればよい。これより (15) 式より屈折率 n は反射率 R を用いて

$$n = \frac{1 + \sqrt{R}}{1 - \sqrt{R}} \quad (24)$$

と書ける。この式を使って各試料の屈折率のスペクトルを求めると図 6 のようになった。これは理科年表 [1] との値とのずれは大きくはない。

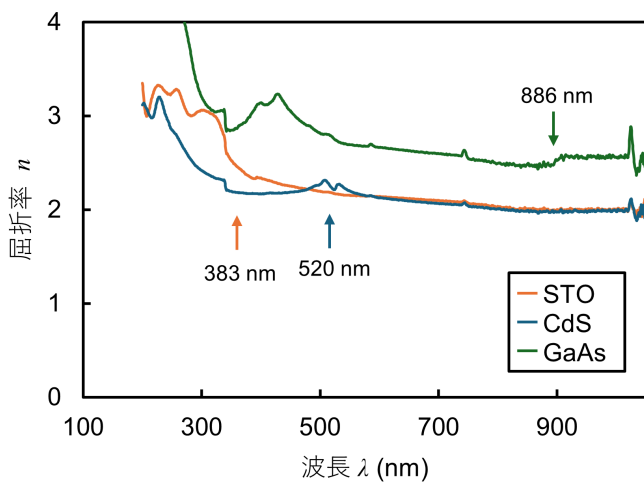


図 6: 半導体 (GaAs, ウルツ鉱型 CdS, SrTiO₃) の各波長における屈折率

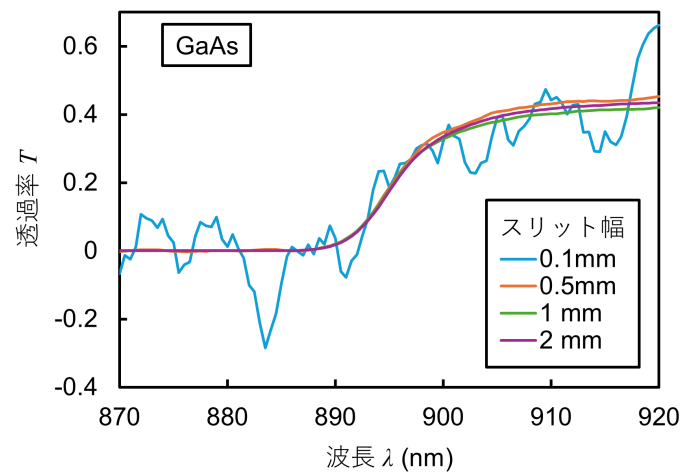


図 7: 分光器の波長を選択するスリット幅を変えて測定したときの GaAs の透過率の測定結果。スリット幅が狭いとノイズがひどくなるのがわかる。

6 課題

課題 1

マニュアルを参考にし、使用した分光系である Hitachi U-3900 の仕組みを記述せよ。特に、リファレンス側とサンプル側に分かれている意義、ベースライン測定をする意義、波長を変えた測定をするしくみ、についてわかりやすく述べよ。また、実験条件である波長範囲、スリット幅、サンプリング間隔、スキャンスPEEDを決定する際に留意すべき点を記述せよ。

仕組みとしては以下のとおりである。赤外から可視光の範囲ではある 350nm -1100nm の間の光源ではタングステンランプを、紫外線である 190 nm - 350 nm では重水素ランプを光源としている分光計である。ランプから出た光は反射型回折格子で波長分解能が高くなるよう平行光線になるようにレンズで光線を制御して、回折格子の回転角で波長をスリットを通すことで選択する。そうして選択された光源はビームスプリッタで半々になるよう分けられる。この際、ビームスプリッタによって強度比が 1:1 に分けられるわけではなくどうしても偏りが生じる。そのため、ベースライン測定と呼ばれる校正データの測定を行う必要がある。片方の光は光の強度の測定基準となり、もう片方の光は試料に当てられ透過率や反射率を測定することとなる。2つの光の強度比を測定することで透過率と反射率が測定されることとなる。

この際に調整できるパラメータとして、回折格子を回す速度であるスキャンスPEED、サンプリング間隔、光源の波長を選択するスリット幅、波長範囲がある。スキャンスPEEDとサンプリング間隔、波長範囲は測定時間と精度のトレードオフにかかわる量である。なので測定のできる時間に合わせて調整すればよい。一方、スリット幅に関しては強度の分解能にかかわってくる。光子エネルギーと波長の関係は

$$E = \frac{hc}{\lambda} \quad (25)$$

より、スリット幅 $\Delta\lambda$ とエネルギーもとい光の強度のずれ幅は

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{\Delta\lambda}{\lambda} \quad (26)$$

となる。つまりスリット幅が狭いと測定する光の強度の値が正確に出るのがわかる。しかし、スリットによって光線がさえぎらるのでセンサーに入る光子の個数が減る。すると光源のゆらぎや外乱によって測定される強度にノイズが多く入ることになる。なのでスリット幅の狭さはエネルギーの精度とノイズとのトレードオフになる。実際に測定したスリット幅によるノイズの影響を測定したのが図 7 でありこの傾向が確かに確認できる。

課題 2

金および銀について、反射スペクトルが大きく変化する振動数によりプラズマ振動数を推定せよ。また金属中の電子を自由粒子であるとするドルーデモデルを仮定したときのプラズマ振動数の理論値を計算せよ。さらに推定値と理論値に差が生じる理由を物理的に考察せよ。

金属中の電子を自由電子とみて、速度に比例する摩擦と振動する光電場を受けながら運動するとしたときの運動方程式は

$$m\ddot{x} + m\gamma\dot{x} = -eE_0e^{-i\omega t} \quad (27)$$

となる。ただし、バンド理論により金属中の電子はほとんど散乱を受けずに自由に動くことがわかっているので $\gamma \ll 1$ である。これをフーリエ変換変換して解くと

$$x(\omega) = \frac{eE(\omega)}{m} \frac{1}{\omega^2 + i\omega\gamma} \quad (28)$$

分極は $P(\omega) = -Nex(\omega)/V$ で書けるので誘電関数は

$$D(\omega) = \varepsilon_0\varepsilon(\omega)E = \varepsilon_0E(\omega) + P(\omega) = \varepsilon_0\left(1 - \frac{Ne^2}{V\varepsilon_0} \frac{1}{\omega^2 + i\gamma\omega}\right)E(\omega) \quad (29)$$

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \gamma^2} + \frac{i\gamma\omega_p^2}{\omega(\omega^2 + \gamma^2)} \quad (30)$$

と書ける。このときの

$$\omega_p = \sqrt{\frac{Ne^2}{V\epsilon_0}} \quad (31)$$

をプラズマ振動数という。誘電関数と複素屈折率 $\tilde{n} = n + i\kappa$ の関係式である (8) を使うと

$$n = \sqrt{\epsilon_1} \sqrt{\frac{1 + \sqrt{1 + \epsilon_2^2/\epsilon_1^2}}{2}} \quad (32)$$

$$\kappa = \sqrt{-\epsilon_1} \sqrt{\frac{-1 + \sqrt{1 + \epsilon_2^2/\epsilon_1^2}}{2}} \quad (33)$$

より、 $\gamma \ll 1$ も合わせると $\omega < \omega_p$ のときには複素屈折率の実部は値を持たずに虚部は値を持ち、 $\omega > \omega_p$ のときには複素屈折率の虚部は値を持たずに実部は値を持つ。つまり、プラズマ振動数は金属が光学的に透明であるかの境目になっているのがわかる。プラズマ振動数を反射率のスペクトルで見るとは反射率が大きく変わる波長である。(26) 式より波長スペクトルをもとに外挿すると波長による誤差の違いが表れるため、反射率のスペクトルを周波数で表し、そこからプラズマ振動数を求めると

$$\hbar\omega_{p(\text{Au})} = 2.5 \text{ eV}, \quad \hbar\omega_{p(\text{Ag})} = 3.95 \text{ eV}$$

とわかる。Au, Ag の束縛されずに自由に動く自由電子の数が s 電子 1 つであると仮定して、ドルーデモデルより得られたプラズマ振動数の式 (31) に値を入れていくと

$$\hbar\omega_{p(\text{Au})} = 9.0 \text{ eV}, \quad \hbar\omega_{p(\text{Ag})} = 9.0 \text{ eV}$$

となり、実験値と合わない。

実際には電束密度は背景が真空ではなく他の束縛電子による影響が入っているため、電束密度と電場、分極の式は

$$D(\omega) = \epsilon' E(\omega) + P(\omega) \quad (34)$$

と書くべきである。この表式でのプラズマ振動数は

$$\epsilon'_p = \sqrt{\frac{Ne^2}{\epsilon' V}} = \sqrt{\epsilon_0/\epsilon'} \omega_p \quad (35)$$

と書ける。つまり他の束縛電子による影響によって金属中の誘電率が真空とは異なるのが原因であると、ドルーデモデルからは言うことができる。

バンド理論といったもう少し複雑なモデルから見ると、この真空の誘電率との違いの由来はこのように言うことができる。自由電子を 1 つの s 電子としたが、実際には 1 つ下の d 電子や f 電子と s 電子のバンドが重なっている。光学現象にかかわってくる電子はこれらが入り混じっているため有効的な誘電率が変わる。

課題 3

今回測定した試料の反射率スペクトルと透過率スペクトルから、各試料の色について考察せよ。

反射率に波長依存性があるということは反射率が大きい波長の光は見え、低いところの波長は見えないということである。すると白色光を当てて試料を眺めたときに、目に見えるのは特定の波長をもった色の光であるので、試料には特有の色があると認知する。また透過率が高いと試料を通して後ろの様子が透けて見える。波長によって透過率が違うということは特定の色の光だけが見えるということである。色のついたフィルムというのは透過率の言葉で言うと、特定の波長をもった光だけを透過しているというものである。それを踏まえて今回測定した試料である Au, Ag, SrTiO₃, CdS, GaAs の反射率スペクトルと透過率スペクトルと実際の見え方を比べる。

図 1 の結果より、Au は緑色から青色の光は弱く、赤色から緑色が強い光の色が見える。つまり黄色の物質として見えるというのがこのスペクトルからわかる。これは実際の経験と合っている。

Au は可視光の範囲ではどの波長の光も同じ程度の強さで反射することから、白色光を入れたとき同じく白色が見えるような白色の金属であるというのがスペクトルからわかる。これは実際の経験と合っている。

SrTi_3 と CdS は可視光の範囲ではほとんど一定で互いに同じ反射率となっているので白色をした見た目であるとスペクトルからわかる。 GaAs はバンドギャップに対応する波長である 520 nm で反射率が少し変化しているので、少しだけ黄色に見える。

また図 2 の透過率について注目すると SrTiO_3 は可視光の範囲では常に光を透過するのがわかる。このスペクトルより SrTiO_3 は少し暗い透明な物質であると人の目には認識される。透明な半導体であることを利用したデバイスというのも世の中には多くあるのだろう。

CdS は緑の光より高エネルギーの光を通さないものであるというのがわかる。つまりこれは緑色のレーザーポインタを当てたときに透過することはないが、赤色のレーザーポインタを当てると透過することを表す。このことからきれいな単結晶を用意すればレーザーポインタを CdS にあてるだけで、結晶の回折を見ることができ、回折パターンから結晶構造が推定できることが予想される。

GaAs は可視光の範囲では光を通さない物質であるのがわかる。しかし、赤外線は通すので赤外線カメラや赤外線レーザーにとっては GaAs は透明であるとみなすことができる。そして、金属の反射率は 0.8 程度と大きいので明るい色を持った光沢として見えるのに対し、 GaAs の反射率は 0.2 程度と金属と比べると小さい。そのためくすんだ光沢をもった白色として見えるのがわかる。

7 結論

金属である Au , Ag の反射率の測定するとある波長より短い波長では反射率が下がり、それより大きい波長では反射率が大きくなるスペクトルが得られた。このスペクトルは目に見える金属の色ときちんと対応しているのを確認した。特定の波長で反射率が大きく変わるという振る舞いはドルーデモデルをもとにした誘電関数によって説明できた。これより金属中の電子はイオンが多数分布しているのにも関わらず自由電子のように振舞うことを表す。

半導体である SrTiO_3 , CdS , GaAs の反射率と透過率の測定により、屈折率や、吸収係数を求めることができた。この吸収係数のふるまいは半導体のバンドギャップの大きさを説明するだけではなく、バンド理論が预言する周波数依存性を満たしていることを確認した。つまり結晶中の電子はバンド理論によるブロッホ電子という描像で振舞うと考えてもよい。

参考文献

- [1] 国立天文台（編）. 理科年表. 丸善出版, 2023.
- [2] 前園涼, 市場友宏. 動かして理解する 第一原理電子状態計算. 森北出版, 第 2 版, 2023.
- [3] 御子柴宣夫. 半導体の物理. 培風館, 改訂版, 1991.

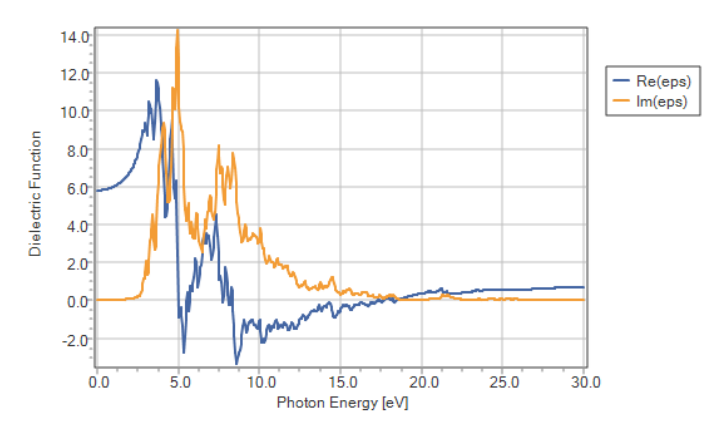
付録

誘電関数の第一原理計算の結果

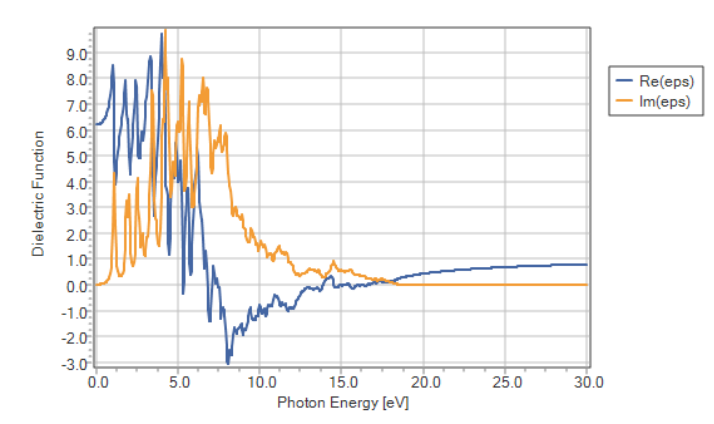
第一原理計算によって SrTiO_3 , CdS , GaAs の誘電関数を計算して求めた。しかし、計算がうまくいっているのか、この誘電関数のふるまいはセットしたパラメータのどこに由来するのか、等の解釈が力不足でできなかったため本文には載せなかった。その誘電関数をここに載せる。

その他の図表

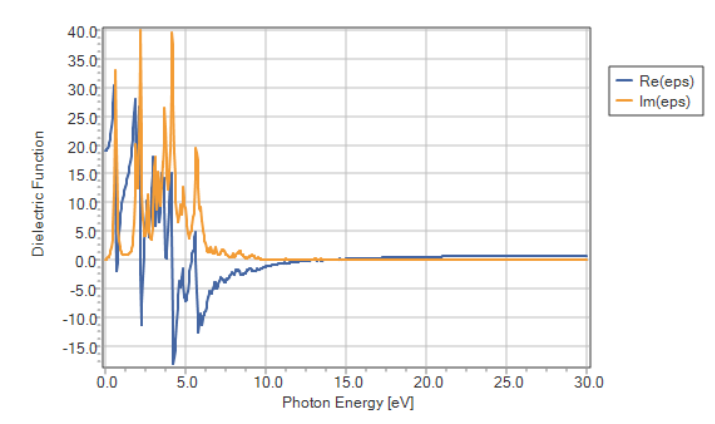
実験中に作成を指示されたが使わなかった図表をここに載せる。



(a) SrTiO_3



(b) CdS



(c) GaAs

図 8: 第一原理計算によって求めた半導体の誘電関数

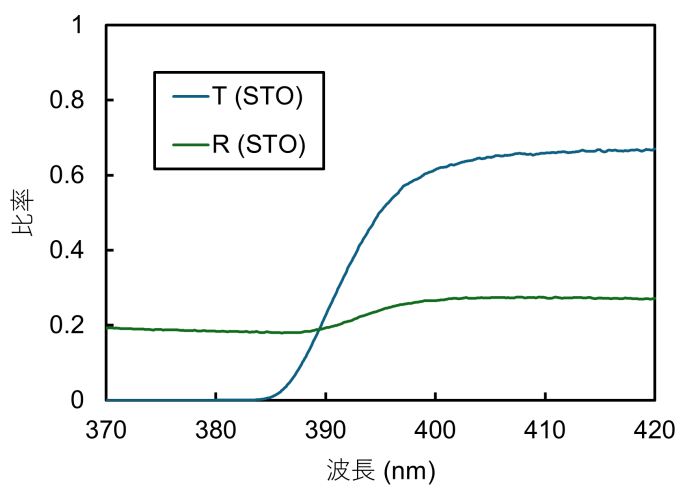


図 9: SrTiO_3

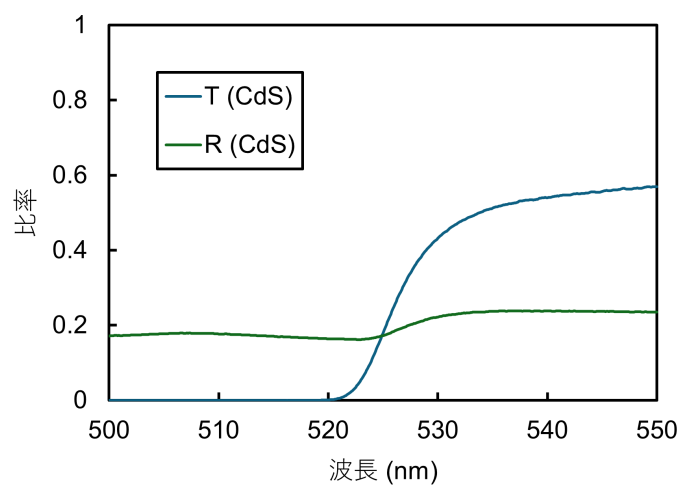


図 10: CdS

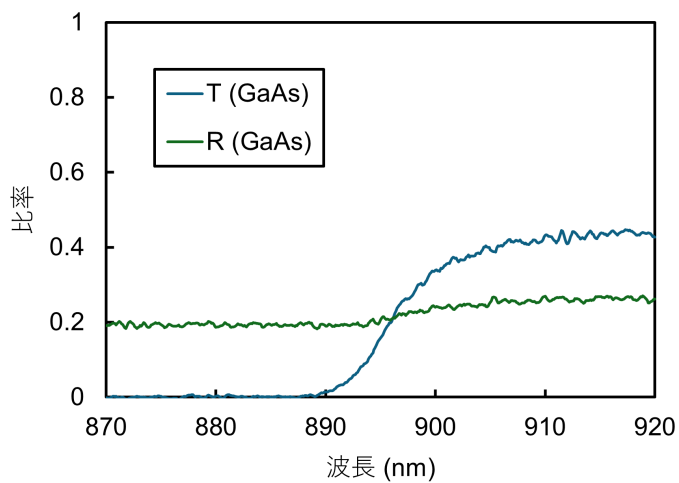


図 11: GaAs

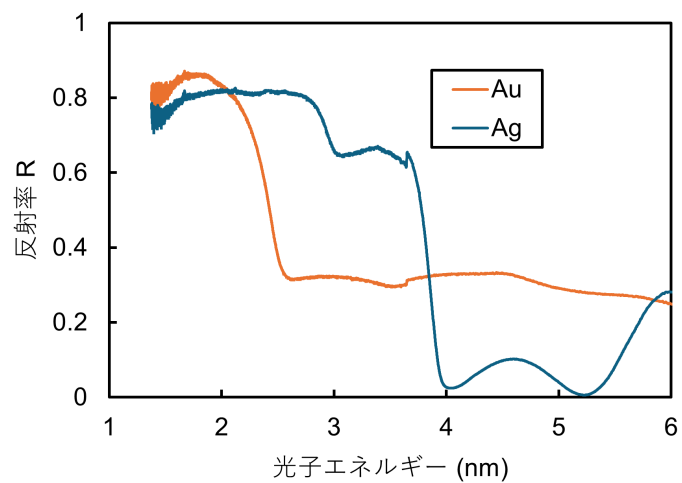


図 12: 金属の反射率を周波数で表示したもの