H19 年度　　3E 電子デバイス工学　講義資料

July 10, 2007

2-3-2　自由電子論(つづき)

箱の中の電子(自由電子モデル)に対する Schrödinger の波動方程式を解く。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=E\psi$$

ψ の一般解を　$\psi = A\exp(jkx)+B\exp(-jkx)$　とすると(A,B は積分定数、k は波数)、

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=-k^2\left\{A\exp(jkx)+B\exp(-jkx)\right\}=-k^2\psi$$

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

ここで、定数 A および B を求めるために境界条件を考える。箱の壁はポテンシャルエネルギーが∞であるので電子は壁に侵入できず、波動関数は 0 となる。よって、境界条件は

$$x=0 \quad で \quad \psi(0)=0 \qquad\qquad x=L \quad で \quad \psi(L)=0$$

となる。これより、直ちに

$$\psi(0)=A+B=0 \quad \rightarrow \quad A=-B$$

$$\psi(L)=A\left\{\exp(jkL)-\exp(-jkL)\right\}=2jA\sin(kL)=0 \quad \rightarrow \quad C\sin(kL)=0\ (ただし、C=2jA)$$

箱の中に電子が存在している条件を考えると、　$\sin(kL)=0$　となる必要がある。よって、波数 k は

$$k=\frac{n\pi}{L} \qquad (n=1,\quad 2,\quad 3\cdots)$$

これより、波動関数 $\psi(x)$ は　$\psi(x)=C\sin(\frac{n\pi}{L}x)$　となる。ここで、$\left|\psi(x)\right|^2$ は確率密度と呼ばれている。箱の中に電子が存在する確率は 1 となるので、$x=0\sim L$ の範囲での積分をする。

$$\int_0^L C^2\sin^2(\frac{n\pi}{L}x)dx=1 \quad \rightarrow \quad C=\left(\frac{2}{L}\right)^{1/2}$$

よって、波動関数は $\psi(x)$

$$\psi(x)=\left(\frac{2}{L}\right)^{1/2}\sin(\frac{n\pi}{L}x)$$

と求められる。また、電子のエネルギー E は

$$E=-\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2$$

となり、電子のとり得るエネルギーは離散的になる(n は整数)。n と E の関係を表すと図 1 のようになる。図の 2 次曲線上のとびとびの点が電子のとり得るエネルギーとなる。すなわち、エネルギー準位はとびとびで表され、バンド(帯)構造をとらない。よって、自由電子モデルは金属のような物質には適用できるが、半導体のような自由電子の少ない物質には他のモデルを考える必要がある。

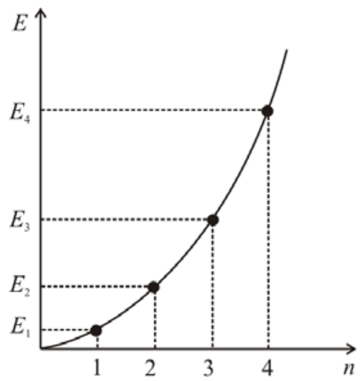

図 1　$n-E$ 関係

2-3-3　ブロッホの定理

半導体の場合は、金属と異なり結晶中の周期的な(規則的な)ポテンシャルを無視できない。そこで、周期的なポテンシャルを考慮して波動関数を求めることになる。この周期性を考慮するためにブロッホ関数を導入する。周期ポテンシャル中の波動関数を次のように定義する。

$$\psi(x)=u_k(x)\cdot e^{jkx}$$

この関数 $\psi(x)$ をブロッホ関数(Bloch function)という。ただし、$u_k(x)$ は周期性を持った振幅で

$$u_k(x)=u_k(x+T)$$

で表される(T はポテンシャルの周期)。