

2-3-4 クローニッヒ・ペニーのモデル

結晶中のポテンシャルを簡単な矩形状に近似したクローニッヒ・ペニーのモデルを考える(図 1)。Schrödinger の波動方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_1(x)}{\partial x^2} = E \psi_1(x) \quad \text{for } 0 \leq x \leq a$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_2(x)}{\partial x^2} + u_0 \psi_2(x) = E \psi_2(x) \quad \text{for } -b \leq x \leq 0$$

上の二式を少し変形して、一般解を決定する。

$$\frac{\partial^2 \psi_1(x)}{\partial x^2} = -\alpha^2 \psi_1(x) \quad \text{ただし } \alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

$$\frac{\partial^2 \psi_2(x)}{\partial x^2} = \beta^2 \psi_2(x) \quad \text{ただし } \beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (u_0 - E)$$

積分定数 A, B, C, D を境界条件を使って求める。

・ $x = 0$ での連続性

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad \frac{\partial \psi_1(0)}{\partial x} = \frac{\partial \psi_2(0)}{\partial x}$$

・ブロッホの定理($x = a$ と $x = -b$ での接続)

$$\psi_1(a) = \psi_2(-b) e^{\pm jk(a+b)} \quad \frac{\partial \psi_1(a)}{\partial x} = \frac{\partial \psi_2(-b)}{\partial x} e^{\pm jk(a+b)}$$

上記の 4 つの境界条件式から得られる連立方程式で、未知数 $A \sim D$ をがゼロ以外の解を持つ条件を考えたと次式が得られる($A \sim D$ がゼロの解を持つとすると、 $\psi = 0$ となり電子が存在しないことになる)。

$$\cos(k(a+b)) = \frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \sin(\alpha a) \sinh(\beta b) + \cos(\alpha a) \cosh(\beta b)$$

上式をもう少し簡単化するため、 $u_0 \rightarrow \infty, b \rightarrow 0$ の極限を考えると

$$\cos(ka) = P \frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} + \cos(\alpha a) \quad \cdots (2.27)$$

$$P = \frac{m a u_0}{\hbar^2} \quad \cdots (2.28)$$

(2.27) 式の解が存在する範囲は図 2 の網掛けの範囲となる。 α はエネルギー E と関係しているの電子がとり得るエネルギーは幅を持ち、且つ不連続が生じることになる(図 3)。電子が存在できるエネルギー範囲を**許容帯(allowed band)**といい、存在できない範囲を**禁制帯(forbidden band)**という。また、エネルギー状態の隔たりを**エネルギーギャップ(energy gap)**という。このように、周期的なポテンシャルを考えると、電子のとり得るエネルギーと取り得ないエネルギーどちらにも幅が生じ、帯(バンド)構造を示す。これがエネルギー帯理論である。

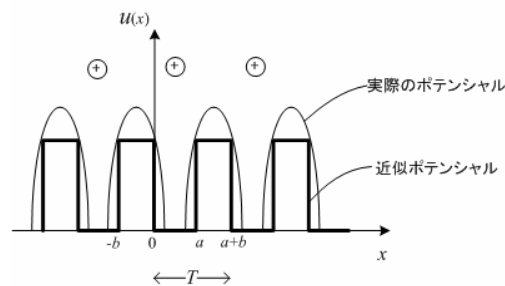


図 1 周期ポテンシャルの近似

$$\text{一般解: } \psi_1(x) = A e^{j\alpha x} + B e^{-j\alpha x}$$

$$\text{一般解: } \psi_2(x) = C e^{\beta x} + D e^{-\beta x}$$

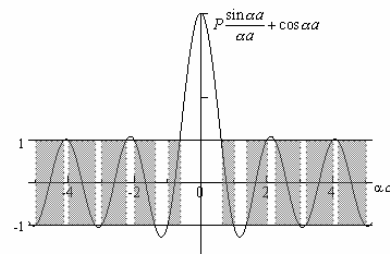


図 2 (2.27) 式の解の存在範囲

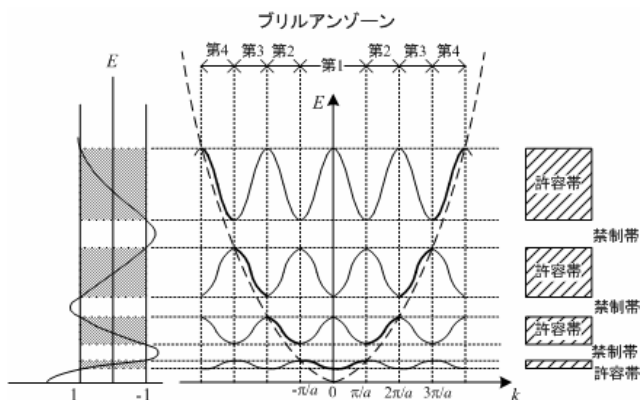


図 3 E - k 関係曲線

