

2-4 結晶内の電子の速度と有効質量

結晶中の電子の速度と質量を考えていく。はじめに、真空中の電子(自由電子)の場合の速度と質量について考察し、それとの比較により結晶内(周期場内)の電子の場合について類推していく。

1) 自由電子の場合

自由電子のエネルギー E は

$$E - U_0 = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$

で与えられている((2.20)式)。これより、 E - k 図は図 1(a)のように 2 次曲線を描くことがわかる。 E を k で微分し($v \propto dE/dk$)、ド・ブロイ関係($p = \hbar k$)を使うと、 $v \propto k$ となる(図 1(b))。さらに k で微分すると

$$m = \frac{\hbar^2}{d^2 E / dk^2}$$

となり、 $d^2 E / dk^2$ が一定より、質量 m は一定となる(図 1(c))。

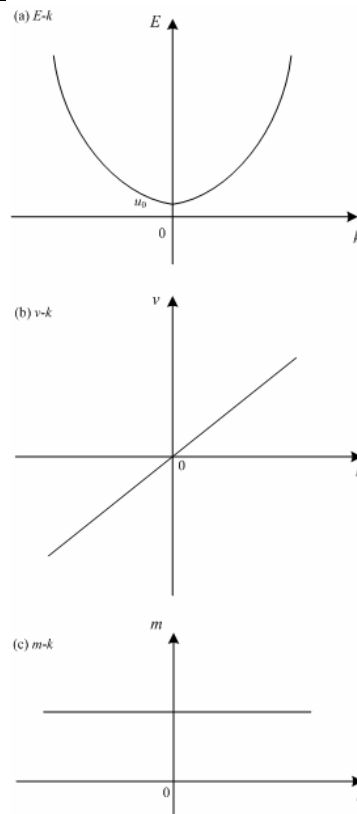


図 1 自由電子の場合

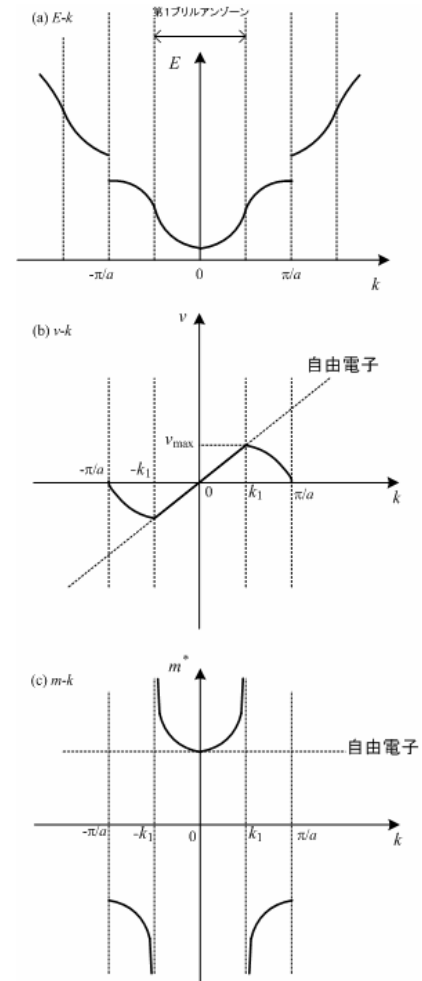


図 2 結晶中の電子の場合

2) 結晶中の電子の場合

結晶中の電子は周りの電子や原子からの影響を受ける。結晶中の電子のエネルギー E は、クローニツヒ・ペニーのモデルから求めたように不連続(エネルギーギャップ)が存在している(図 2(a))。この場合について、自由電子と同様に電子の速度と質量を考えていく。速度 v と波数 k の関係は $v \propto dE/dk$ より、

$$k = 0, \pm\pi/a \text{ で } dE/dk = 0 \text{ なので } v = 0$$

$$k > 0 \text{ で } dE/dk > 0 \text{ なので } v > 0$$

$$k < 0 \text{ で } dE/dk < 0 \text{ なので } v < 0$$

これらを考慮して傾き(dE/dk)に注意して v - k 図を描くと図 2(b)のようになる。次に結晶中の電子の質量を考える。このときの質量の記号を、自由電子の場合の質量と分けて考えるため「*」をつけて m^* と表し、「有効質量」と呼ぶ。自由電子の場合から m^* は

$$m^* \propto (d^2 E / dk^2)^{-1} \propto (dv/dk)^{-1}$$

$$k = \pm k_1 \text{ で } dv/dk = 0 \text{ なので } |m^*| \rightarrow \infty$$

$$|k| < k_1 \text{ で } dv/dk > 0 \text{ なので } m^* > 0$$

$$|k| > k_1 \text{ で } dv/dk < 0 \text{ なので } m^* < 0$$

m^* - k 関係を図 2(c)に示す。結晶中電子の質量は自由電子の場合と異なり、 m^* は一定ではなく、 $|k| > k_1$ で負の質量を示すことがわかる。

3) 負の有効質量の解釈

結晶中の電子の有効質量について、 $E-k$ 図との関係を表すと図 3 のようになる。すなわち、許容帯の上端付近で有効質量 m^* が負になる。

このことを説明するために、電界 $\vec{\varepsilon}$ が掛かっている中の結晶内の電子の運動を考える。電子の運動方程式は加速度 $\vec{a}$ をとして

$$m^* \vec{a} = q \vec{\varepsilon}$$

となる。いま、 $m^* < 0$ の場合を考えると、上式は

$$-|m^*| \vec{a} = -|q| \vec{\varepsilon}$$

これを正の質量の粒子として振る舞うとすると、両辺の符号をかえて

$$|m^*| \vec{a} = |q| \vec{\varepsilon}$$

と考えることで、正の質量、正の電荷を持つ粒子の運動方程式と解釈することができる。この正の質量、正電荷を有するものが正孔(ホール)である。

一般には、電子の有効質量 < 正孔の有効質量である(電子の方が軽く動きやすい)が、実際の結晶では方向により有効質量が異なっている。

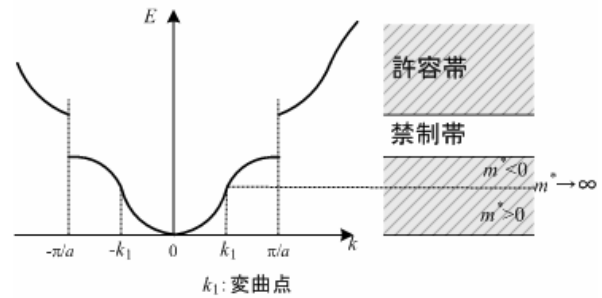


図3 エネルギーバンドと有効質量