

# 電子物性入門

博士(工学) 中村 嘉孝 著

コロナ社

# まえがき

なぜ、私たちは電子物性を学ぶのでしょうか。私の一つの理由は宇宙を理解するためです。私たちの住んでいる、この物理宇宙はビッグバンにより生まれ膨張しているといわれています。時間を遡って現在から過去に行くと、宇宙は縮小してどんどん小さくなっていきます。宇宙が生まれるその直前まで過去に遡ると、宇宙の大きさは点になり、そして、最後には消えてなくなることになります。この小さくなった点の宇宙の、その周りは何なのでしょう。そのよくわからない世界の中に住んでいる私たちはいったい何者なのでしょう。

宇宙を構成しているのは物質で、それは原子が凝集した状態です。原子は原子核と電子から成り、その電子は観測する前は波の状態ですが、観測すると粒子（波束）として計測されます。観測前は1個の電子はさまざまな位置に共存していて、あそこに存在してもいるし、ここにも存在している状態です。この電子がどこで発見されるのか、その確率の計算の基となる関数が波（波動関数）で表されます。また、物理的に大きな炭素分子のフラーレンも波であり共存しているようです。このような、電子、原子、物質とは何か。金属はなぜ電荷を運びやすいのか。磁石になるのはなぜか、など、物質の性質を理解するのが電子物性という分野です。物質の性質がわかると、その性質を生かした新しい有効な機能を持った素子（デバイス）の開発も可能になります。ゆえに電子物性は科学と工学の両分野で重要な科目といえます。

私は学部生の頃、教科書だけではなかなか理解できませんでした。高校時代は1冊の参考書を読みながら、実際に計算すると答を導き出せます。計算して確認できたので、理解したという気持ちになれます。けれども、大学での学びはそううまくいきません。例えば、物理学を理解するとき、数学や他の物理学の本を何冊も開き、あっちの本、こっちの本、と行き来しながら学んでいきます。私が本を読んでいてよく出会ったのは、「この式を計算すると次式となる」という表現です。よし、計算しようと必死に考えるのですがよくわからない。導き出せない。図書館に何時間も籠もって、このことが書かれている本はないか、1冊1冊開いて探していました。すると、この式を導き出すのに他の本で

は10ページ程度かけて説明していました。「あ、この本ではたった1行で書いているけれど、これを理解するには他の分野の知識を含め10ページ必要だったのか。それなら、わからなくて当然だ」と気付きました。私は何時間も時間をかけないと理解できなかつたので、「私はなんて頭が悪いのだろう」と思っていました。学生の皆さんの中には「自分は頭が悪い」と勘違いされている方がいるように思います。さまざまな本をたくさん探して、読んで、考えて、やっと理解できますので、どうぞ、自分に自信を持って、理解することを諦めずにコツコツと学んでほしいと思います。

本書は大学、高専の学生を対象として執筆しました。また、大学院生、研究者の方にも参考になる部分があれば願っています。前半では、量子力学の基礎、結晶構造、格子振動、電気伝導、エネルギーバンド理論など、固体全般に共通する基本的な事柄について解説しました。後半は、半導体、誘電体、磁性体、超伝導体など、性質ごとに分類された物質の特性について解説しています。本書を執筆する上で心掛けたことは、できるだけ論理的な思考ができるようにしたことです。暗記は苦しいけれど、理解は楽しいものです。理解する喜びを感じていただけるように心掛けました。また、論理的な飛躍を少なくするため数式の展開も詳しく書きました。私のように数学で苦しまないように願っています。

私はまだまだ学びが足りず、間違っている部分、勘違いをしている部分があるかもしれません。皆様からのご指摘をいただければ幸いです。

最後に、八戸高専校長 東北大学名誉教授 岡田益男先生、山形大学名誉教授 大嶋重利先生かたがたには、お忙しい中、時間を作って読んでいただき、たくさんの貴重なご指摘、ご意見をいただきました。心から深く感謝申し上げます。また、本書の図を作ってくれた卒研究生の皆さんとたくさんのご配慮をいただいたコロナ社の皆様に心から感謝申し上げます。最後に、いつも、支えてくれた妻に感謝します。皆様、ありがとうございました。

2015年10月吉日

中村嘉孝

# 目 次

## 1. 量子力学の基礎

1.1 光, 電子の粒子性と波動性 .....	2
1.2 ハイゼンベルクの不確定性原理 .....	4
1.3 シュレーディンガー方程式 .....	5
1.4 無限井戸型ポテンシャル中の粒子 .....	12
1.5 有限井戸型ポテンシャル中の粒子 .....	22
1.6 トンネル効果 .....	33
演習問題 .....	40

## 2. 結晶構造

2.1 固体の結合力 .....	43
2.1.1 イオン結合 .....	43
2.1.2 共有結合 .....	49
2.1.3 金属結合 .....	51
2.2 ブラベー格子と空間格子 .....	52
2.3 結晶の方向と面を表すミラー指数 .....	54
2.4 結晶の不完全性 .....	55
2.5 代表的な結晶構造 .....	57
2.6 X線回折と結晶構造 .....	58
演習問題 .....	60

### 3. 格子振動と熱的性質

3.1 同種原子から成る一次元格子振動 .....	63
3.2 二種原子から成る一次元格子振動 .....	67
3.3 格子振動の量子化 .....	78
3.4 固体の比熱 .....	78
3.4.1 デューロン・プティの法則 .....	79
3.4.2 アインシュタインの理論 .....	80
3.4.3 デバイの理論 .....	81
3.5 固体の熱伝導 .....	84
演習問題 .....	85

### 4. 金属の自由電子論

4.1 移動度, 緩和時間, 電流密度 .....	87
4.2 金属の自由電子モデル .....	90
4.2.1 三次元井戸型ポテンシャル中の粒子 .....	90
4.2.2 フェルミ球とフェルミエネルギー .....	94
4.2.3 状態密度 .....	97
4.2.4 フェルミ・ディラック分布関数と電子分布 .....	100
演習問題 .....	101

### 5. エネルギーバンド理論

5.1 クローニッヒ・ペニーのモデル .....	103
5.2 結晶内における電子の運動と有効質量 .....	107
5.3 金属, 半導体, 絶縁体のバンド構造 .....	111
演習問題 .....	114

## 6. 半 導 体

6.1 真性半導体	116
6.2 キャリヤドーピング	127
6.3 不純物半導体のキャリヤ密度の温度依存性	131
6.4 ホール効果	135
6.5 キャリヤの拡散とアインシュタインの関係式	140
6.6 光吸収と光吸収係数	142
6.7 pn 接合	143
演習問題	145

## 7. 誘 電 体

7.1 電気双極子モーメントと誘電分極	151
7.2 誘電率	153
7.3 局所電界	155
7.4 誘電分極の機構	156
7.5 誘電分散と誘電損失	158
演習問題	160

## 8. 磁 性 体

8.1 磁性の起源	162
8.1.1 電子の軌道運動による磁気モーメント	162
8.1.2 電子のスピンによる磁気モーメント	164
8.2 磁化率と透磁率	165
8.3 磁性体の分類	167

---

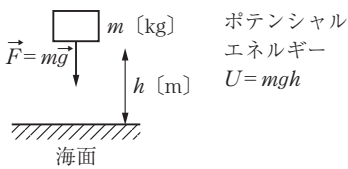
演習問題	170
------	-----

## 9. 超伝導体

9.1 完全導電性	172
9.2 マイスナー効果	173
9.3 ロンドン方程式	176
9.4 超伝導体の諸特性	181
9.4.1 第一種・第二種超伝導体と磁束の量子化	181
9.4.2 比熱の飛びと遠赤外光吸収スペクトル	183
9.4.3 同位体効果	185
9.4.4 ジョセフソン効果と超伝導量子干渉計	186
9.5 高温超伝導体	186
演習問題	187
引用・参考文献	188
演習問題解答	190
索引	197

### 1.4 無限井戸型ポテンシャル中の粒子

シュレーディンガー方程式が正確に解ける簡単な問題である、無限井戸型ポテンシャル中に閉じ込められ束縛された電子について考える。まず初めに、ポテンシャルエネルギーについて復習する。力学で学んだように、地球による重力（力）が存在する空間（重力場）に質量  $m$  の物体があるとき、その物体には、**図 1.1** のように力  $\vec{F} = m\vec{g}$  ( $\vec{g}$  は重力加速度) が働く。その力に逆らって海面から高さ  $h$  にその物体を運んだとき、その物体は位置（ポテンシャル）



**図 1.1** 重力場におけるポテンシャルエネルギー

ポテンシャル  
エネルギー  
 $U = mgh$

エネルギー  $U = mgh$  を持つ。つぎに、電界によるポテンシャルエネルギーを考える。原点  $O$  に  $+e$  [C] の電荷があるとき、そこから  $\vec{r}$  だけ離れた点  $A$  には電界  $\vec{E} = (e/4\pi\epsilon_0|\vec{r}|^2)(\vec{r}/|\vec{r}|)$  (電荷に作用する力の場) が生じる。この点  $A$  に  $+e$  [C] の

電荷があるとき、クーロン力  $\vec{F} = e\vec{E} = (e^2/4\pi\epsilon_0|\vec{r}|^2)(\vec{r}/|\vec{r}|)$  が働く。その力に逆らって無限遠点から点  $A$  まで運んだとき、その電荷  $+e$  [C] はポテンシャルエネルギー  $U = (e^2/4\pi\epsilon_0|\vec{r}|)$  [J] を持つ<sup>†</sup>。ここで、点  $A$  に正の電荷  $+e$  [C] の代わりに  $-e$  [C] の電子を置くと、その電子の持つポテンシャルエネルギーは

$$U = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}|} \quad (1.35)$$

となり、負の値となる。正電荷の置かれた原点  $O$  からの距離  $|\vec{r}|$  に対するポテンシャルエネルギー  $U(r)$  の変化の様子を**図 1.2**に示す。距離  $r_0$  の位置でのポテンシャルエネルギーを  $U_0$  とする。すると距離  $r_0$  に電子が存在したと

<sup>†</sup> 点  $A$  に  $+e$  [C] の代わりに  $+1$  C の単位電荷を置いた場合、そのポテンシャルエネルギーは  $V = U/(+e) = e/4\pi\epsilon_0|\vec{r}|$  であり、これが電位である。単位は  $(\text{J})/(\text{C}) = (\text{V})$  となる。



き、 $U_0$  以下のポテンシャルエネルギーを持つことはできない。つまり、ポテンシャルの壁（ポテンシャル障壁）があると考えることができる。

いま、水素原子のように、正電荷として陽子 1 個を含む原子核、負電荷として 1 個の電子を考え、原子中の電子のポテンシャルエネルギーの形を表したものが図 1.2 であるとみなせる。式 (1.35) のポテンシャルエネルギーをシュレーディンガー方程式 (1.25) の  $U$  に代入するこ

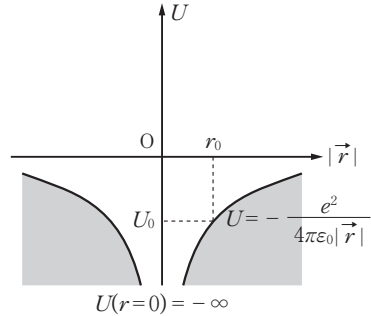


図 1.2 原点  $r=0$  に  $+e$  [C] の電荷が、 $r=r_0$  に  $-e$  [C] が存在したときの、 $-e$  [C] の電荷のポテンシャルエネルギー  $U(r)$  の変化の様子

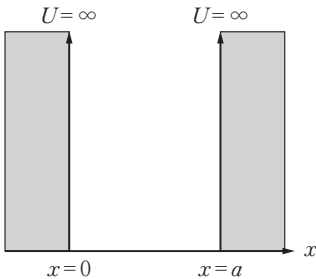


図 1.3 無限井戸型ポテンシャル

とで、水素原子中の電子の波動関数を求めることができる。しかし、ポテンシャルエネルギーは距離に対して  $U \propto -1/|r|$  と変化するので計算は複雑になる。そこで、図 1.3 のように、 $x \leq 0$ ,  $x \geq a$  で  $U = \infty$ ,  $0 < x < a$  で  $U = 0$  となる無限井戸型ポテンシャルを考え、この中に電子が閉じ込められているモデルを考えれば、原子中の電子の状態の概略を知ることができる。つまり、原子中の電子の持つ

ポテンシャルエネルギー  $U$  が距離に反比例するところを、距離に依存せず一定と単純化して考える。また、一次元とし距離を表す  $r$  を  $x$  に置き換えて考える。

それでは、無限井戸型ポテンシャル中の電子の波動関数、発見確率、そしてエネルギー固有値（電子の取り得るエネルギー）を求めていく。

$x \leq 0$ ,  $x \geq a$  の領域の波動関数を考える。この領域ではポテンシャルエネルギーが無限大なので、もし仮に、波動関数がこの領域で有限の値を持ってしまおうと発見確率も有限になり、そこに存在している電子のポテンシャルエネルギー

ギーは無有限大になってしまう。無限のエネルギーを持つことは不可能なので波動関数は0にならなければならない。したがって、ポテンシャルエネルギー  $U=0$  の  $0 < x < a$  の領域のみ考えればよい。よって、シュレーディンガー方程式 (1.25) において、 $U(x)=0$  と置く。すると、この領域のシュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) = \varepsilon \varphi(x) \quad (1.36)$$

となる。ここで、1.3節で用いた定数係数斉次線形微分方程式の一般解を求める方法に従って、この微分方程式の一般解を求める。特性方程式は

$$\lambda^2 + \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} = 0 \quad (1.37)$$

である。判別式  $D$  は

$$D = -4 \cdot 1 \cdot \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} = -\frac{8m\varepsilon}{\hbar^2} \quad (1.38)$$

となり、エネルギー固有値の値の大きさ  $\varepsilon > 0$ ,  $\varepsilon = 0$ ,  $\varepsilon < 0$  によって、一般解は (\*) のように異なるので分けて考えていく。

(I)  $\varepsilon < 0$  (つまり、 $D > 0$  の実根) のとき

$$\alpha, \beta = \frac{\pm \sqrt{-\frac{8m\varepsilon}{\hbar^2}}}{2 \cdot 1} = \pm \sqrt{-\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \quad (1.39)$$

より、微分方程式 (1.36) の一般解は

$$\varphi(x) = C_1 e^{+\sqrt{-\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \cdot x} + C_2 e^{-\sqrt{-\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \cdot x} \quad (1.40)$$

となる。境界条件  $\varphi(x=0) = \varphi(x=a) = 0$  より  $x=0$  で波動関数は0にならなけ

### ワンポイント

シュレーディンガー方程式

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right) \varphi(x) = \varepsilon \varphi(x) \quad \dots (1.25)$$

### ワンポイント

(\*) 定数係数斉次線形微分方程式

$\frac{d^2 u}{dx^2} + a \frac{du}{dx} + bu = 0$  の一般解は

(1) 実根  $u = C_1 e^{\alpha x} + C_2 e^{\beta x}$

(2) 重根  $u = (C_1 + C_2 x) e^{\alpha x}$

(3) 虚根  $u = e^{\beta} (C_1 \cos qx + C_2 \sin qx)$

または

$$u = C_1 e^{(\beta+iq)x} + C_2 e^{(\beta-iq)x}$$

ればならないので、つぎのようになる。

$$\varphi(x=0) = C_1 e^{+\sqrt{-\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \cdot 0} + C_2 e^{-\sqrt{-\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \cdot 0} = C_1 + C_2 = 0 \rightarrow \therefore C_1 = -C_2 \quad (1.41)$$

よって

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= C_1 e^{\sqrt{-\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \cdot x} - C_1 e^{-\sqrt{-\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \cdot x} = C_1 \left( e^{\sqrt{-\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \cdot x} - e^{-\sqrt{-\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \cdot x} \right) \\ &= C_1 2 \sinh \sqrt{-\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \cdot x \end{aligned} \quad (1.42)$$

となる。 $\sinh x$  の関数の形は図 1.4 のように変化する。もう一つの境界条件、 $x=a$  で波動関数は  $\varphi(x=a)=0$  にならなければならないが、 $\sinh x$  が 0 となるのは原点のみである。つまり、境界条件を満足できないので、この形の一般解は、波動関数とはなり得ない。

(II)  $\varepsilon=0$  (つまり、 $D=0$  の重根) のとき

$\alpha=0$  より、一般解は

$$\varphi(x) = C_1 + C_2 x \quad (1.43)$$

境界条件  $\varphi(x=0)=0$  より

$$C_1 = 0 \rightarrow \therefore \varphi(x) = C_2 x \quad (1.44)$$

となる。つまり、この場合も、 $\varphi(x=a)=0$  とならず、 $x=a$  における境界条件を満足しない。よって、この形の一般解も波動関数とはなり得ない。

(III)  $\varepsilon>0$  (つまり、 $D<0$  の虚根) のとき

$$\alpha, \beta = p \pm iq = \frac{\pm \sqrt{-\frac{8m\varepsilon}{\hbar^2}}}{2 \cdot 1} = \pm i \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \quad (1.45)$$

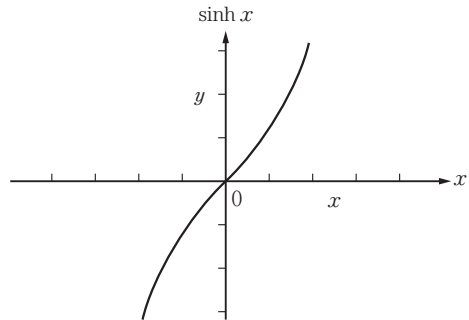


図 1.4 関数  $\sinh x$

より、一般解は

$$\varphi(x) = C_1 \cos \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \cdot x + C_2 \sin \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \cdot x \quad (1.46)$$

または

$$\varphi(x) = C_1 e^{+i\sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \cdot x} + C_2 e^{-i\sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \cdot x} \quad (1.47)$$

となる。一般に、井戸の中に閉じ込められているような場合は、 $\sin ax$ ,  $\cos ax$  を使う場合が多いので、それに従い、式 (1.46) を使用する。凸型ポテンシャルやステップ状ポテンシャル中を進む進行波を扱う場合には、 $e^{iax}$  など指数関数で表された波動関数が採用される。

境界条件  $\varphi(x=0) = 0$  より

$$\varphi(x=0) = C_1 \cos \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \cdot 0 + C_2 \sin \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \cdot 0 = C_1 = 0 \quad (1.48)$$

となる。よって

$$\varphi(x) = C_2 \sin \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \cdot x \quad (1.49)$$

となる。もう一つの境界条件  $\varphi(x=a) = 0$  より

$$\varphi(x=a) = C_2 \sin \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \cdot a = 0 \rightarrow C_2 = 0 \text{ または } \sin \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \cdot a = 0 \quad (1.50)$$

となる。 $C_2 = 0$  では、波動関数が0になってしまうので

$$\sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \cdot a = n\pi \quad (n=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots) \quad (1.51)$$

という条件が課される。 $n$  を量子数という。ここは非常に重要なポイントである。境界条件を満足させるために初めて量子数  $n$  が現れ、連続的ではなく、飛び飛びの離散的な整数の値しか取り得ない、という条件が現れた瞬間である。実験で明らかになっているように、原子中の電子のエネルギー固有値は離

散的になるが、この実験事実を説明する理論式が表された瞬間である。

ここで、量子数  $n$  について考えてみる。 $n=0$  の場合は

$$\sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \cdot a = 0 \cdot \pi = 0 \quad (1.52)$$

となり、 $m$  は粒子の質量、 $\hbar = h/2\pi$  であり、 $h$  はプランク定数、井戸の幅  $a$  は 0 ではないので、 $\varepsilon=0$  が要求される。しかし、ここでは  $\varepsilon>0$  の虚根の場合を考えているので、矛盾することになる。よって、 $n=0$  は含まれないことになる。つまり

$$n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (1.53)$$

となる。式 (1.51) より

$$\sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} = \frac{n\pi}{a} \rightarrow \therefore \varphi(x) = C_2 \sin \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \cdot x = C_2 \sin \frac{n\pi}{a} \cdot x \quad (1.54)$$

である。ここで、量子数  $n$  が正のときと負のときに分けて考えてみる。

$n = +1, +2, +3, \dots$  の場合の波動関数は

$$n=1 \text{ のとき } \varphi(x) = C_2 \sin \frac{1\pi}{a} \cdot x \quad (1.55 \text{ a})$$

$$n=2 \text{ のとき } \varphi(x) = C_2 \sin \frac{2\pi}{a} \cdot x \quad (1.55 \text{ b})$$

となる。

$n = -1, -2, -3, \dots$  の場合の波動関数は

$$n=-1 \text{ のとき } \varphi(x) = C_2 \sin \frac{-1\pi}{a} \cdot x = -C_2 \sin \frac{1\pi}{a} \cdot x \quad (1.56 \text{ a})$$

$$n=-2 \text{ のとき } \varphi(x) = C_2 \sin \frac{-2\pi}{a} \cdot x = -C_2 \sin \frac{2\pi}{a} \cdot x \quad (1.56 \text{ b})$$

となり、 $n$  が正の場合の波動関数の振幅にマイナスが付いた形になる。波動関数の意味はいまだに明確に理解されているわけではなく、また、式 (1.18) で示したように、波動関数は複素数なので、物理空間で観測することはできない。観測できないという視点で見ると、波動関数自体には物理的な意味はなく、観測に関わる発見確率、つまり、粒子の位置を観測したときに、位置  $x$

にいる粒子を発見する確率を表す波動関数の絶対値の2乗  $|\varphi(x)|^2 = \varphi(x)\varphi^*(x)$  (ただし、 $\varphi^*(x)$  は  $\varphi(x)$  の共役複素数) や、物理量の期待値などを計算する場合のみ、物理的意味が発生する。つまり、 $|\varphi(x)|^2 = \varphi(x)\varphi^*(x)$  のような発見確率などは、波動関数の振幅の正・負によって変わるわけではなく同じ値を示す。つまり、 $n=1, 2, 3, \dots$  の場合と  $n=-1, -2, -3, \dots$  の場合の波動関数を用いて発見確率などを計算した場合、まったく同じ形になるので、 $n$  の正負のうち片方だけで代表させてかまわない。わざわざ、負符号を付けるのも面倒なので、代表として正符号で表すことにする。したがって、波動関数を

$$\varphi(x) = C_2 \sin \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \cdot x = C_2 \sin \frac{n\pi}{a} \cdot x \quad (n=1, 2, 3, \dots) \quad (1.57)$$

とする。この波動関数には、任意定数が付いているので、規格化(正規化)し消去する。規格化とは、考えている領域(いまの場合は、電子は  $0 < x < a$  の領域にのみ存在している)で発見確率を足し合わせたものは1になる(確率の和は1なので)。つまり

$$\int_0^a |\varphi(x)|^2 dx = 1 \quad (1.58)$$

を計算することで、任意定数を決めることができる。つまり

ワンポイント

半角公式

$$\sin^2 \alpha = \frac{1 - \cos 2\alpha}{2} \dots \textcircled{1}$$

$$\begin{aligned} \int_0^a |\varphi(x)|^2 dx &= \int_0^a \left| C_2 \sin \frac{n\pi}{a} \cdot x \right|^2 dx = \int_0^a |C_2|^2 \left| \sin \frac{n\pi}{a} \cdot x \right|^2 dx \\ &= |C_2|^2 \int_0^a \overbrace{\sin^2 \frac{n\pi}{a} \cdot x}^{\textcircled{1}} dx = |C_2|^2 \int_0^a \frac{1}{2} \left( 1 - \cos \frac{2n\pi}{a} \cdot x \right) dx \\ &= \frac{|C_2|^2}{2} \left[ x - \frac{a}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi}{a} \cdot x \right]_0^a = \frac{|C_2|^2}{2} \left( a - \frac{a}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi}{a} \cdot a \right) \\ &= \frac{|C_2|^2}{2} a = 1 \quad \therefore |C_2|^2 = \frac{2}{a} \end{aligned} \quad (1.59)$$

となる。よって

$$|C_2|^2 = |C_2| |C_2| = \frac{2}{a} \rightarrow |C_2| = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$\therefore C_2 = \pm \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (1.60 \text{ a})$$

または

$$\therefore C_2 = \pm i \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (1.60 \text{ b})$$

である。なぜなら

$$|C_2| = \left| 0 + i \sqrt{\frac{2}{a}} \right| = \sqrt{0^2 + \left( \sqrt{\frac{2}{a}} \right)^2} = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

となるからである。

任意定数は実数でも虚数でもどちらでも数学上はかまわない。もちろん、正でも負でもどちらでもよい。一般的には実数で表されることが多いので、実数を選ぶと波動関数は

$$\varphi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \cdot x = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} \cdot x \quad (n=1, 2, 3, \dots) \quad (1.61)$$

と表される。この波動関数  $\varphi(x)$  の形を **図 1.5** に、発見確率  $|\varphi(x)|^2$  の形を **図 1.6** に示す。

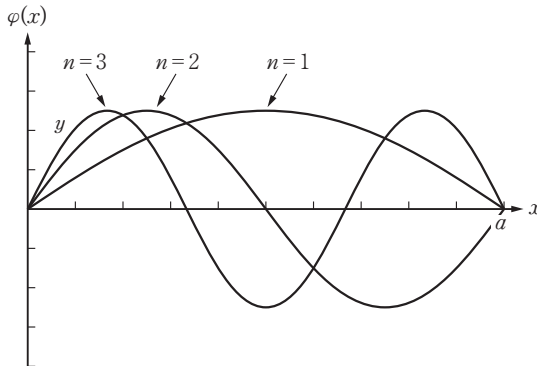


図 1.5 波動関数  $\varphi(x)$  の形

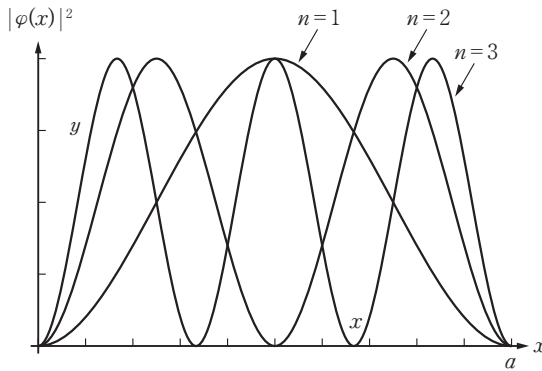


図 1.6 発見確率  $|\varphi(x)|^2$  の形

電子は粒子であり波でもある、という二重性を持っているが、波を表す波動関数により電子の性質は表される、という意味で電子は波であるといえる。また、電子の位置を測定すると 1 個の粒子として観測されるので、電子は粒子である。正確に述べると、観測前は多くの場合はポテンシャルエネルギーに閉じ込められていないので、広がった波であるが、観測の際のプロープとの相互作用が局所的なので、空間的に局所的なポテンシャルエネルギーが生じ、電子の波動関数がそれによって閉じ込められ波束（粒子のように）となっているのである。しかし、ここでは簡単のため粒子と表現する。観測行為による粒子としての顕在化の解釈として以下のものが考えられている。つまり、図 1.6 の発見確率の分布のように、電子を観測する前は井戸の中のさまざまな場所に同時に存在（共存）し、観測するとある一点の位置に発見され、顕在化する。この現象の代表的な解釈を二つ挙げる。一つは、**コペンハーゲン解釈**と呼ばれ、シュレーディンガー方程式と**波束の収縮（射影仮説、収縮仮説）**を原理とするものである。収縮とは広がっていた波動関数が観測により観測点に収縮されるというものである。しかし、なぜ、収縮するのか、その理由はいまだ明らかになっていない<sup>4)</sup>。また、光速を超えて収縮することになるが、現在も波動関数が何なのかわからないので、物体の運動のように光速を超えてはいけないうのかわかっていないので、相対性理論に反しているのかどうか議論すること



は難しい。これに対し、原理をシュレーディンガー方程式のみとする**多世界解釈**がある。広がっている波動関数、つまり、その広がりの中に共存している電子のうち、ある点に存在している電子を観測した場合、その点に電子が存在する世界に観測者も存在する。他の位置に存在している電子を観測した観測者の存在する世界もある。つまり、多世界が同時に存在しているという考え方である。しかし、多世界が共存しているということは、いまの常識では納得することは難しいと思われる。ほかにも、さまざまな解釈が考えられているが、どれが正しいのか、未解決な問題として残っている。

つぎに、図 1.6 に示した  $n=1, 2, 3$  のような発見確率を持つ電子のエネルギー固有値(電子の取り得るエネルギー)を計算してみよう。シュレーディンガー方程式は ① であったので、波動関数式 (1.61) を左辺に代入すると

**ワンポイント**

シュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) = \varepsilon \varphi(x) \quad \dots \text{①}$$

$$\begin{aligned}
 -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} \cdot x \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \sqrt{\frac{2}{a}} \frac{n\pi}{a} \cos \frac{n\pi}{a} \cdot x \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n\pi}{a} \right)^2 \underbrace{\sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} \cdot x}_{=\varphi(x)} \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n\pi}{a} \right)^2 \varphi(x) = \varepsilon \varphi(x) \tag{1.62}
 \end{aligned}$$

となる。したがって、エネルギー固有値  $\varepsilon$  は

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n\pi}{a} \right)^2 \quad (n=1, 2, 3, \dots) \tag{1.63}$$

と表される。図 1.7 に離散的なエネルギー固有値を示す。この図を見ると、 $a$  の小さな狭い井戸の中に閉じ込められた電子のエネルギーは連続的な値を自由に取れるわけではなく、境界条件から要請された  $n=1, 2, 3, \dots$  で規定される、離散的(飛び飛び)のエネルギーしか取り得ないことがわかる。

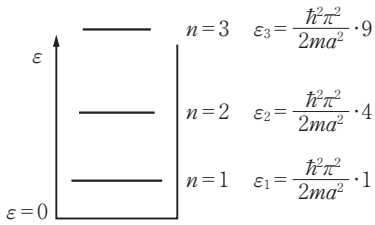


図 1.7 離散的なエネルギー固有値

以上のことを、水素原子に当てはめて考えると、原子核中の陽子の電荷によるクーロン力によって閉じ込められた原子中の電子のエネルギーは、離散的な飛び飛びのエネルギーを持つことが以上のことから予測される。実際、実験により水素中の電子のエネルギーの離散性が確認

されており、このような単純な無限井戸型ポテンシャルのモデルによって、原子などミクロの世界の現象を厳密ではないが理解できる。

### 1.5 有限井戸型ポテンシャル中の粒子

電荷  $+e$  [C] の二つの粒子が作り出す電界における、 $-e$  [C] の電荷を持つポテンシャルエネルギーを考える。いま、図 1.8 (a) のように、 $x=0$  と  $x=a$  に  $+e$  [C] の電荷が置かれているとする。 $x=x$  における  $-e$  [C] の電荷のポテンシャルエネルギーは

$$U = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{|x|} + \frac{1}{|x-a|} \right) \quad (1.64)$$

となる。ポテンシャルエネルギーは、 $+e$  [C] の電荷からの距離に依存する

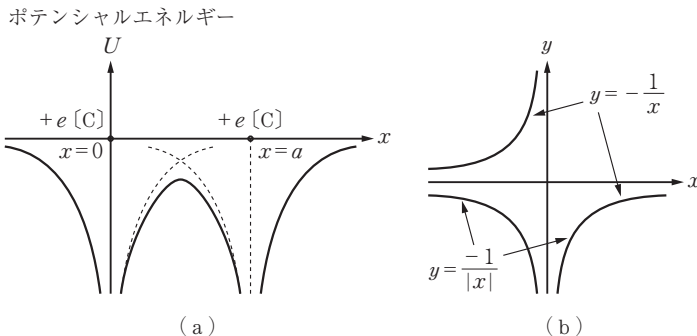


図 1.8 電荷によるポテンシャルエネルギーの形

ているので、発見確率は有限となる。つまり、壁の中にも粒子を発見し得ることを示している。

### 1.6 トンネル効果

図 1.15 のような高さ  $V_0$  の凸型ポテンシャル障壁に、 $V_0$  より高いエネルギー固有値  $\varepsilon(\varepsilon > V_0)$  を持った電子が、左側から入射した場合を考える。電子のエネルギーが障壁より高い場合、古典論では電子はすべて領域Ⅲに抜けていくと考えられる。しかし、以下の計算からわかるように、量子力学の教えるところは、一部の電子は、 $x=0$  と  $x=a$  の境界で反射されてしまう。このことを確認する。ここでは領域Ⅰ、ⅡからⅢに透過していく確率を求める。

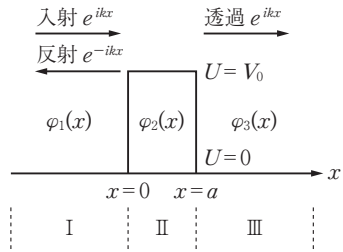


図 1.15 凸型ポテンシャル障壁

(i)  $x < 0$  の領域Ⅰにおける、シュレーディンガー方程式と波動関数は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \varepsilon \psi(x)$$

変形すると

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} \psi(x) = 0$$

特性方程式は

$$\lambda^2 + \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} = 0$$

判別式は

$$D = -4 \cdot 1 \cdot \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} < 0$$

より虚根となる。よって

#### ワンポイント

定数係数斉次線形微分方程式

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + a \frac{du}{dx} + bu = 0 \text{ の一般解は}$$

(1) 実根  $u = C_1 e^{ax} + C_2 e^{bx}$

(2) 重根  $u = (C_1 + C_2 x) e^{ax}$

$$u = e^b (C_1 \cos qx + C_2 \sin qx)$$

(3) 虚根, または

$$u = C_1 e^{(p+jq)x} + C_2 e^{(p-jq)x}$$

$$\lambda = \frac{\pm \sqrt{\frac{-8m\varepsilon}{\hbar^2}}}{2} = \pm i \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} = \pm ik$$

よって、波動関数は

$$\varphi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (1.105)$$

となる。

(ii)  $x > a$  の領域Ⅲにおける、シュレーディンガー方程式と波動関数も同様に

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_3(x) = \varepsilon \psi_3(x)$$

$$\therefore \psi_3(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx}$$

$x > a$  の領域Ⅲには、ステップなどのポテンシャルはなく、反射する要素はないので  $D=0$  となる。よって、波動関数は

$$\varphi_3(x) = Ce^{ikx} \quad (1.106)$$

となる。

(iii)  $0 < x < a$  の領域Ⅱにおける、シュレーディンガー方程式と波動関数も同様に

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \right\} \psi_2(x) = \varepsilon \psi_2(x) \rightarrow \frac{d^2}{dx^2} \psi_2(x) + \frac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2} \psi_2(x) = 0$$

特性方程式は

$$\lambda^2 + \frac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2} = 0$$

判別式は

$$D = -4 \cdot 1 \cdot \frac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2} < 0$$

より虚根となる。よって

$$\lambda = \frac{\pm \sqrt{\frac{-8m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2}}}{2} = \pm i \sqrt{\frac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2}} = \pm i\beta$$

よって、波動関数は

$$\varphi_2(x) = Fe^{i\beta x} + Ge^{-i\beta x} \quad (1.107)$$

となる。波動関数は、滑らかな連続関数でなければならないという境界条件から、 $x=0$ の境界では

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0) \rightarrow \therefore A+B = F+G \quad (1.108)$$

$$\begin{aligned} \varphi_1'(0) = \varphi_2'(0) &\rightarrow ikAe^0 - ikBe^0 = i\beta Fe^0 - i\beta Ge^0 \\ &\rightarrow \therefore k(A-B) = \beta(F-G) \end{aligned} \quad (1.109)$$

$x=a$ の境界では

$$\varphi_2(a) = \varphi_3(a) \rightarrow \therefore Fe^{i\beta a} + Ge^{-i\beta a} = Ce^{ika} \quad (1.110)$$

$$\begin{aligned} \varphi_2'(a) = \varphi_3'(a) &\rightarrow i\beta Fe^{i\beta a} - i\beta Ge^{-i\beta a} = ikCe^{ika} \\ &\rightarrow \therefore \beta(Fe^{i\beta a} - Ge^{-i\beta a}) = kCe^{ika} \end{aligned} \quad (1.111)$$

が成り立たなければならない。ここで、電荷の保存則  $\text{div} \vec{J}_c = -\partial \rho / \partial t$  を考えてみる。電流密度  $\vec{J}_c$  はこれに垂直な単位面積を単位時間に通過する総電荷量である。 $\rho$  は電荷密度である。この保存則は、単位体積から流出（流入）する総電荷量は、その単位体積に含まれる電荷量の減少量（増加量）に等しいことを意味している。量子力学では確率でしか議論できないため、電荷密度  $\rho$  の代わりに、確率密度（単位体積中の発見確率）を  $|\psi(r, t)|^2$  と置いて考える。確率も保存されるので  $\text{div} \vec{J}(r, t) = -\partial |\psi(r, t)|^2 / \partial t$  と置ける。ここで、 $\vec{J}(r, t)$  を**確率の流れの密度**と呼ぶ。確率の流れの密度  $\vec{J}(r, t)$  とは、これに垂直な単位面積を単位時間に通過する確率の総和となる。粒子が入射し流れる場合は、確率の流れの密度を用いて考えると便利である。確率の流れの密度は

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi} \left( \varphi^* \frac{\partial}{\partial x} \varphi - \varphi \frac{\partial}{\partial x} \varphi^* \right) \vec{i}_1$$

となることが導かれている<sup>18)</sup>。

入射波の確率の流れの密度は、領域 I の波動関数（式 (1.105)）において入

射波を表す  $Ae^{ikx}$  を用い

$$\begin{aligned}
 \vec{j}_i &= \frac{\hbar}{2mi} \left( \varphi^* \frac{\partial}{\partial x} \varphi - \varphi \frac{\partial}{\partial x} \varphi^* \right) \vec{i}_1 \\
 &= \frac{\hbar}{2mi} \left( A^* e^{-ikx} ik A e^{ikx} + A e^{ikx} ik A^* e^{-ikx} \right) \vec{i}_1 \\
 &= \frac{\hbar}{2m} (A^* A k + A A^* k) \vec{i}_1 = \frac{\hbar}{m} k |A|^2 \vec{i}_1
 \end{aligned} \tag{1.112}$$

となる。反射波の確率の流れの密度は、領域 I の波動関数において反射波を表す  $Be^{-ikx}$  を用い

$$\begin{aligned}
 \vec{j}_r &= \frac{\hbar}{2mi} \left( \varphi^* \frac{\partial}{\partial x} \varphi - \varphi \frac{\partial}{\partial x} \varphi^* \right) \vec{i}_1 \\
 &= \frac{\hbar}{2mi} \left( -B^* e^{ikx} ik B e^{-ikx} - B e^{-ikx} ik B^* e^{ikx} \right) \vec{i}_1 \\
 &= -\frac{\hbar}{2m} (B^* B k + B B^* k) \vec{i}_1 = -\frac{\hbar}{m} k |B|^2 \vec{i}_1
 \end{aligned} \tag{1.113}$$

となる。透過波の確率の流れの密度は、領域 III の波動関数において透過波を表す  $Ce^{ikx}$  を用い

$$\begin{aligned}
 \vec{j}_t &= \frac{\hbar}{2mi} \left( \varphi^* \frac{\partial}{\partial x} \varphi - \varphi \frac{\partial}{\partial x} \varphi^* \right) \vec{i}_1 \\
 &= \frac{\hbar}{2mi} \left( C^* e^{-ikx} ik C e^{ikx} + C e^{ikx} ik C^* e^{-ikx} \right) \vec{i}_1 \\
 &= \frac{\hbar}{2m} (C^* C k + C C^* k) \vec{i}_1 = \frac{\hbar}{m} k |C|^2 \vec{i}_1
 \end{aligned} \tag{1.114}$$

となる。反射率は、入射波の確率の流れの密度の大きさと反射波の確率の流れの密度の大きさの比なので

$$R = \frac{|\vec{j}_r|}{|\vec{j}_i|} = \frac{\left| -\frac{\hbar}{m} k |B|^2 \vec{i}_1 \right|}{\left| \frac{\hbar}{m} k |A|^2 \vec{i}_1 \right|} = \frac{\|B\|^2}{\|A\|^2} = \frac{|B|^2}{|A|^2} \tag{1.115}$$

となる。透過率は、入射波の確率の流れの密度の大きさと透過波の確率の流れの密度の大きさの比なので

$$T = \frac{\left| \frac{\vec{j}_t}{j_i} \right|}{\left| \frac{\vec{j}_i}{j_i} \right|} = \frac{\left| \frac{\hbar}{m} k |C|^2 \vec{i}_1 \right|}{\left| \frac{\hbar}{m} k |A|^2 \vec{i}_1 \right|} = \frac{\left| |C|^2 \right|}{\left| |A|^2 \right|} = \frac{|C|^2}{|A|^2} \quad (1.116)$$

となる。したがって、透過率を求めるには、任意定数  $C$  と  $A$  の比がわかれば求まる。そこで、先ほどの境界条件を用いて、この比を計算する。

式 (1.110), (1.111) より  $F, G$  を  $C$  で表すと

$$\begin{aligned} \text{式 (1.111)} + \beta \times \text{式 (1.110)} &\rightarrow 2\beta F e^{i\beta a} = C k e^{ika} + C \beta e^{ika} \\ \therefore F &= \frac{C(k+\beta)e^{ika}}{2\beta e^{i\beta a}} \end{aligned} \quad (1.117)$$

$$\begin{aligned} \text{式 (1.111)} - \beta \times \text{式 (1.110)} &\rightarrow 2\beta G e^{-i\beta a} = -C k e^{ika} + C \beta e^{ika} \\ \therefore G &= \frac{C(\beta-k)e^{ika}}{2\beta e^{-i\beta a}} \end{aligned} \quad (1.118)$$

式 (1.108), (1.109) より  $A$  を  $F$  と  $G$  で表し、式 (1.117), (1.118) を代入し、 $C/A$  を求めると

$$\begin{aligned} \text{式 (1.109)} + k \times \text{式 (1.108)} &\rightarrow 2kA = \overset{\text{式 (1.117)}}{(k+\beta)\widehat{F}} + \overset{\text{式 (1.118)}}{(k-\beta)\widehat{G}} \\ &= (k+\beta)^2 \frac{C e^{ika}}{2\beta e^{i\beta a}} - (\beta-k)^2 \frac{C e^{ika}}{2\beta e^{-i\beta a}} = \frac{C e^{ika}}{2\beta} \left\{ (k+\beta)^2 e^{-i\beta a} - (\beta-k)^2 e^{i\beta a} \right\} \\ \therefore \frac{C}{A} &= \frac{4k\beta e^{-ika}}{\left\{ (k+\beta)^2 e^{-i\beta a} - (\beta-k)^2 e^{i\beta a} \right\}} \frac{e^{i\beta a}}{e^{i\beta a}} = \frac{4k\beta e^{i(\beta-k)a}}{(k+\beta)^2 - (\beta-k)^2 e^{i2\beta a}} \end{aligned} \quad (1.119)$$

となる。よって

$$|C|^2 = \left| 4k\beta e^{i(\beta-k)a} \right|^2 = 16k^2 \beta^2 \overbrace{\left| e^{i(\beta-k)a} \right|^2}^{=1} = 16k^2 \beta^2 \quad (1.120)$$

$$Y(y) = Ce^{i\sqrt{\frac{2m\varepsilon_y}{\hbar^2}} \cdot y} = Ce^{ik_y y}$$

$$Z(z) = Ee^{i\sqrt{\frac{2m\varepsilon_z}{\hbar^2}} \cdot z} = Ee^{ik_z z}$$

よって、式 (4.15) より

$$\varphi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z) = \underbrace{ABC}_{\text{規格化により } \frac{1}{\sqrt{l^3}}} e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}$$

したがって

$$\varphi(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{l^3}} e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} \quad (4.20)$$

$$\varepsilon = \varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (4.21)$$

となる。可能な波数は

$$\left. \begin{aligned} k_x &= \frac{2\pi}{l} n_x, & k_y &= \frac{2\pi}{l} n_y, & k_z &= \frac{2\pi}{l} n_z \\ & (n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \end{aligned} \right\} \quad (4.22)$$

となる (5.3 節参照)。ここで、 $n_x = +1$  のときは、 $+x$  方向に進む進行波を表し、 $n_x = -1$  のときは、 $-x$  方向に進む進行波を意味する。

#### 4.2.2 フェルミ球とフェルミエネルギー

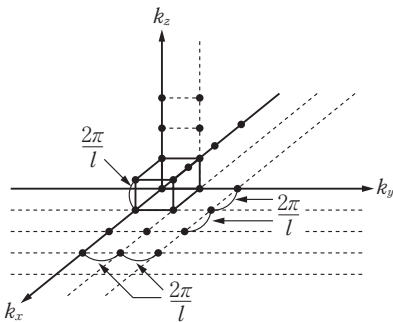


図 4.8 波数空間中の許される状態

式 (4.22) で示された、波数空間での許される状態を黒丸で示したものを図 4.8 に示す。エネルギー固有値は式 (4.21) なので変形すると

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \left[ \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \right]^2 = r^2 \quad (4.23)$$

となる。

この式は、 $x, y, z$  軸を波数  $k_x, k_y, k_z$



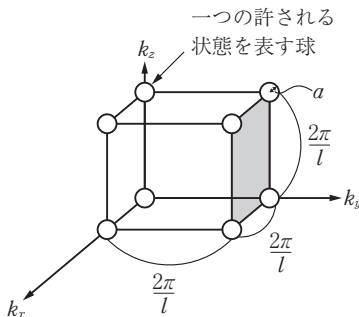
としたとき、半径  $r = \sqrt{2m\epsilon/\hbar^2}$  の球を表す関数であり、原点から等距離の状態の電子のエネルギーは等しいことを表している。また、**図 4.9** に示すように、 $(k_x, k_y, k_z)$  の各点 (状態) に半径  $a$  の小球を置き (ただし、 $a < (1/2)(2\pi/l)$ )、一つの小球を一つの許された状態とみなす。すると、1 辺  $2\pi/l$  の立方体の中に半径  $a$  の小球は立方体の角の部分に小球の  $1/8$  個が含まれ、8 個の角があるので、 $(1/8) \times 8 = 1$  個、つまり、「波数空間において 1 辺の長さ  $2\pi/l$  の立方体の体積は一つの状態」と考えることができる。つまり、「体積  $(2\pi/l)^3 = 8\pi^3/V$  の中に、一つの状態がある」と考えることができる。ただし、 $V = l^3$  であり、結晶の体積を表す。ここで、体積  $V$  の結晶中に  $N$  個の自由に動ける伝導電子があったとすると、パウリの排他律 (一つのエネルギー状態には、スピン  $\uparrow$  と  $\downarrow$  の 2 個の電子しか入れない) から、 $N/2$  個の電子状態が必要となる。式 (4.22) からわかるように、 $k_x, k_y, k_z$  が小さいほどエネルギーは低いので、 $k_x, k_y, k_z$  の小さい方から電子は入っていく。つまり、半径  $r$  の球の中心が最もエネルギーが小さいので、球の中心から電子は満たされていく。ここで、**図 4.10** のように  $N$  個の電子が詰まったときの波数 (半径) を  $k_f = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$  とする。すると、この球内の電子状態の数は

$$\begin{aligned} & (\text{半径 } k_f \text{ の球の体積}) \div (\text{状態 1 個当りの体積}) \\ & = \text{半径 } k_f \text{ の球の中に含まれる状態数} \end{aligned}$$

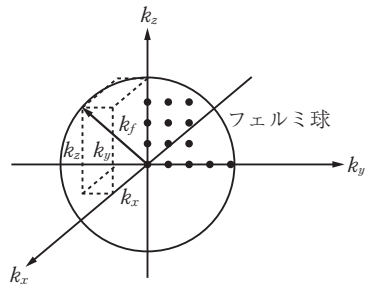
なので

**ワンポイント**

$$\epsilon = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \dots (4.21)$$



**図 4.9** 立方体の状態数



**図 4.10** フェルミ球

$$\frac{\frac{4}{3}\pi k_f^3}{\frac{8^2\pi^2}{V}} = \frac{Vk_f^3}{6\pi^2} \quad (4.24)$$

となり、この値が  $N/2$  個に等しい必要があるから

$$\frac{Vk_f^3}{6\pi^2} = \frac{N}{2} \rightarrow k_f^3 = 3\pi^2 \frac{N}{V} \rightarrow \therefore k_f = \left(3\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (4.25)$$

となる。よって、図 4.10 に示すような半径  $k_f$  の球（フェルミ球）の最表面の最も高いエネルギーは、式 (4.22) より

$$\varepsilon_f = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} \right)^2 = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( 3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{\frac{2}{3}} = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \left( \frac{N}{V} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (4.26)$$

となる。これをフェルミエネルギーと呼び、 $k_f$  をフェルミ波数と呼ぶ。ここで、金 (Au) 結晶のように、1 個の原子から 1 個の伝導電子を放出する場合を考えると、伝導電子数は原子数と等しくなるので、式 (4.26) の  $N/V$  は単位体積中の原子数、つまり、結晶の密度に等しいので、実際の金属の密度を代入するとフェルミエネルギーを計算できる。

フェルミエネルギーを熱エネルギーに換算すると、式 (4.27) となる。

$$\varepsilon_f = k_B T_f \rightarrow \therefore T_f = \frac{\varepsilon_f}{k_B} \quad (4.27)$$

ここで、 $T_f$  をフェルミ温度と呼ぶ。

フェルミエネルギーを伝導電子の速度に換算すると、式 (4.28) となる。

$$\varepsilon_f = \frac{1}{2} m v_f^2 \rightarrow \therefore v_f = \sqrt{\frac{2\varepsilon_f}{m}} \quad (4.28)$$

ここで、 $v_f$  をフェルミ速度という。

例として Au のフェルミエネルギー、フェルミ温度、フェルミ速度を計算する。Au は図 4.11 のように、面心立方構造を持ち、辺の長さ（格子定数）は  $a$

$=4.0785 \text{ \AA}$ であり、固体になると+1価の陽イオンになるので、1個のAu原子から1個の伝導電子を生成する。面心立方構造の場合、面の中心の原子は、立方体の中に原子1個の $1/2$ 個を含み、6面あるので $1/2 \times 6 = 3$ 個の原子が含まれている。また、8個の角には原子1個の $1/8$ 個が含まれているので $1/8 \times 8 = 1$ 個の原子があり、合計4個の原子が面心立方格子の中にあるので、伝導電子も4個となる。よって、伝導電子密度は

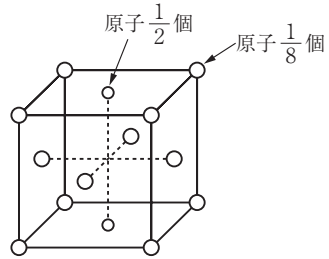


図 4.11 面心立方構造

$$\frac{N}{V} = \frac{4}{(4.0785 \times 10^{-10})^3} = 5.9 \times 10^{28} \text{ 個/m}^3$$

となる。したがって、フェルミエネルギー、フェルミ温度、フェルミ速度は

$$\begin{aligned} \varepsilon_f &= \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \left( \frac{N}{V} \right)^{\frac{2}{3}} \\ &= \frac{(1.0545 \times 10^{-34})^2}{2 \times 9.109 \times 10^{-31}} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} (5.9 \times 10^{28})^{\frac{2}{3}} \text{ J} \\ &= 5.51 \text{ eV} \\ T_f &= 64\,000 \text{ K} \\ v_i &= 1.4 \times 10^6 \text{ m/s} \end{aligned}$$

となる。つまり、Au結晶の中の最も高いエネルギーを持った電子のエネルギー（フェルミエネルギー）は5.51 eVであり、温度に換算すると64 000 Kに相当するエネルギーを持っている。つまり、固体材料は非常に高いエネルギー状態を維持していることがわかる。

### 4.2.3 状態密度

結晶中の電子の**状態密度**を計算する。状態密度とは電子が存在できる単位エネルギー当りの状態の数である。任意の波数 $k$ の球内で許される状態数は、

式 (4.25) より

$$\frac{\frac{4}{3}\pi k^3}{\frac{8\pi^3}{V}} = \frac{Vk^3}{6\pi^2} \quad (4.29)$$

となる。ここで、式 (4.18

ワンポイント

$$\frac{\frac{4}{3}\pi k_f^3}{\frac{8\pi^3}{V}} = \frac{Vk_f^3}{6\pi^2} \quad \dots(4.24)$$

$$k_x = \sqrt{\frac{2m\varepsilon_x}{\hbar^2}}, \quad k_y = \sqrt{\frac{2m\varepsilon_y}{\hbar^2}}, \quad k_z = \sqrt{\frac{2m\varepsilon_z}{\hbar^2}} \quad \dots(4.18 d)$$

d) より波数  $k$  は、 $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = \sqrt{(2m/\hbar^2)(\varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z)} = \sqrt{2m\varepsilon/\hbar^2}$  であるので上式に代入すると、あるエネルギー  $\varepsilon$  までの状態数は

$$\frac{V}{6\pi^2} \frac{(2m\varepsilon)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^3} \quad (4.30)$$

となる。一つの状態に  $\uparrow$  スピンの電子 1 個と  $\downarrow$  スピンの電子 1 個、合計 2 個存在できるので、上式を 2 倍したものがスピンを考慮した状態数となり

$$G(\varepsilon) = \frac{V}{3\pi^2} \frac{(2m\varepsilon)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^3} \quad (4.31)$$

と表される。これは最低エネルギー状態から任意のエネルギー  $\varepsilon$  までの状態数（電子が存在できる座席の数）を表す。 $\varepsilon \sim \varepsilon + \Delta\varepsilon$  のエネルギー範囲（[図 4.12](#) 参照）にある状態数  $\Delta G(\varepsilon)$  は

$$\Delta G(\varepsilon) = G(\varepsilon + \Delta\varepsilon) - G(\varepsilon) \quad (4.32)$$

であるから、 $\Delta\varepsilon$  で割り、単位エネルギー当りの状態数を求めると

$$\frac{\Delta G(\varepsilon)}{\Delta\varepsilon} = \frac{G(\varepsilon + \Delta\varepsilon) - G(\varepsilon)}{\Delta\varepsilon} \quad (4.33)$$

となる。ここで、 $\Delta\varepsilon \rightarrow 0$  の極限を取り、エネルギー  $\varepsilon$  付近の単位エネルギー当りの状態数を求めると

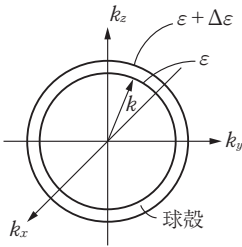


図 4.12  $\varepsilon \sim \varepsilon + \Delta\varepsilon$  のエネルギー範囲

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\Delta G(\varepsilon)}{\Delta\varepsilon} &= \lim_{\Delta\varepsilon \rightarrow 0} \frac{G(\varepsilon + \Delta\varepsilon) - G(\varepsilon)}{\Delta\varepsilon} = \frac{dG(\varepsilon)}{d\varepsilon} = \frac{d}{d\varepsilon} \left( \frac{V}{3\pi^2} \frac{(2m\varepsilon)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^3} \right) \\ &= \frac{V}{3\pi^2 \hbar^3} \frac{3}{2} (2m)^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{\frac{1}{2}} = \frac{V}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2} m^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (4.34)$$

となる。これを体積  $V$  で割り、単位体積当りに変換すると

$$g(\varepsilon) \equiv \frac{dG(\varepsilon)}{V d\varepsilon} = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2 \hbar^3} m^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{\frac{1}{2}} \quad (4.35)$$

となる。これは、エネルギー  $\varepsilon$  付近の単位体積かつ単位エネルギー当りの状態数を表している。したがって、エネルギー幅  $d\varepsilon$  の中に含まれる状態数は

$$g(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2 \hbar^3} m^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{\frac{1}{2}} d\varepsilon \quad (4.36)$$

となる。この  $g(\varepsilon)$  のことを**状態密度** (density of states) という。 $g(\varepsilon)$  は  $\varepsilon^{\frac{1}{2}}$  に比例して増加する。図 4.13 (a) に  $g(\varepsilon)$  のエネルギー依存性を示す。

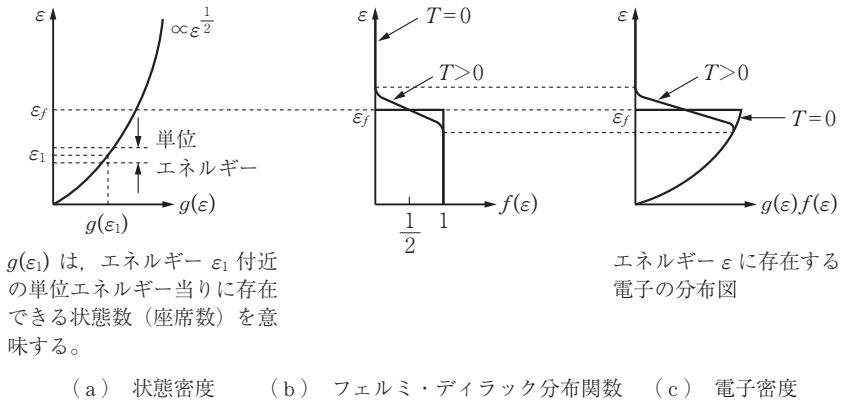


図 4.13 エネルギー依存性

状態密度  $g(\varepsilon)$  は電子の存在できる座席の数であり、考えているエネルギー  $\varepsilon$  を中心にした単位エネルギー当りの座席に電子がどの程度の確率で存在するかは、次節の確率を表すフェルミ・ディラック分布関数によって決まる。

# 索引

<b>【あ】</b>		拡散	140	群速度	107
アインシュタイン		拡散係数	141	<b>【け】</b>	
——の関係	142	拡散電流	141	結晶粒	55
——の比熱の式	78, 81	確率の流れの密度	35	結晶粒界	55
アインシュタイン温度	81	価電子帯	112	<b>【こ】</b>	
アクセプタ不純物	130	下部臨界磁界	182	高温超伝導体	186
アクセプタ密度	131	完全反磁性	173	光学分岐	76
アプリコソフ格子	182	<b>【き】</b>		交換相互作用	168
アモルファス	56	規格化	18	光子	3
アンチサイト欠陥	56	基礎吸収	142	格子間原子	56
<b>【い】</b>		軌道磁気モーメント	163	格子振動	63, 67
イオン化エネルギー	129	軌道半径	128	格子定数	52
イオン結合	43	キャリヤ	116	格子面	55
イオン分極	156, 159	キュリー温度	169	拘束電荷	154
イオン分極率	157	キュリー定数	168	硬超伝導体	181
位相速度	107	キュリーの法則	168	光量子	3
移動度	89	キュリー・ワイスの法則	169	光量子説	3
<b>【う】</b>		境界条件	27	コペンハーゲン解釈	20
渦糸状態	183	強磁性	167	混合状態	183
<b>【え】</b>		強磁性体	167, 168	<b>【さ】</b>	
永久磁気双極子	167	共存	20	三次元井戸型ポテンシャル	90
永久磁気モーメント	167	共有結合	43, 49	散乱時間	88
永久双極子モーメント	158	局所電界	155	<b>【し】</b>	
永久電流	172	極性分子	158	磁化	165
エネルギー固有値	21	巨視的電界	155	磁化ベクトル	165
エネルギーの量子化	2	許容帯	106	磁化率	166
エネルギーバンド	106	禁制帯	106	磁気能率	165
エネルギー量子	2	金属	111	磁気モーメント	162
<b>【お】</b>		金属結合	43, 51	磁区	168
音響分岐	76	<b>【く】</b>		仕事関数	23
<b>【か】</b>		空間格子	52	磁性体	167
角運動量	163	偶奇性	32	磁束の量子化	182
——の量子化	3	空格子点	56	磁束量子	183
		空乏層	144	質量作用の法則	127
		クーパー対	185		
		クローニッヒ・ベニーのモデル	103		

自発磁化	168	多世界解釈	21			
射影仮説	20	単位格子	52			
周期的境界条件	92	単位胞	52			
収縮仮説	20	単結晶	55			
自由電子モデル	90					
シュレーディンガー方程式		<b>【ち】</b>				
	5	超伝導現象	171			
時間に依存しない——	9	超伝導電流	172			
時間に依存する——	8	超伝導量子干渉計	186			
常磁性	167					
常磁性体	166, 167	<b>【て】</b>				
少数キャリア	127	抵抗率	90			
状態密度	97, 99, 119	定数係数齊次線形微分方程式	10			
衝突時間	88	定積比熱	79			
上部臨界磁界	183	デバイ				
ジョセフソン効果	186	——の $T^3$ 則	84			
ショットキー欠陥	56	——の比熱の式	79			
進行波	93	デバイ温度	83			
真性キャリア密度	126	出払い領域	135			
真性半導体	116	デューロン・プティの法則	78, 79, 80			
真性領域	135	電位	12			
真電荷	154	転位	56			
		転移温度	172			
<b>【す】</b>		電気双極子	151			
水素結合	43	電気双極子モーメント	151			
スピン角運動量	164	電気的感受率	155			
スピン磁気モーメント	164	電気的中性条件	132			
スピン量子数	164	点欠陥	56			
		電子分極	156, 159			
<b>【せ】</b>		電子分極率	157			
正規化	18	電子密度	121			
正孔	111, 116	伝導帯	112			
正孔密度	124	伝導電子	51			
積層欠陥	56	電流密度	89			
絶縁体	111					
線欠陥	56	<b>【と】</b>				
		同位元素効果	185			
<b>【そ】</b>		同位体効果	185			
双極子分極	156, 159	透過率	36			
双極子分極率	158	透磁率	166			
ゾンマーフェルトのモデル		導電率	89			
	91	ドナー不純物	128			
<b>【た】</b>		ドナー密度	131			
第一ブリルアンゾーン	66	ドーピング	116			
第一種超伝導体	181	ド・ブロイ波	4			
第二種超伝導体	181	ドリフト速度	89			
多結晶	55	トンネル効果	33, 39			
多数キャリア	127					
					<b>【な】</b>	
					軟超伝導体	181
					<b>【に】</b>	
					2流体モデル	176
					<b>【ね】</b>	
					熱伝導	84
					熱伝導率	84
					熱量	84
					ネール温度	169
					<b>【は】</b>	
					配向分極	156, 157
					配向分極率	158
					パウリの排他律	50
					波束	107
					——の収縮	20
					発見確率	17, 18
					波動関数	4
					波動性	4
					パリティ	32
					反強磁性	167
					反強磁性体	167, 169
					半金属	114
					反磁性	167
					反磁性体	166, 167
					反射率	36
					半導体	111
					バンド間遷移	142
					<b>【ひ】</b>	
					光吸収	142
					光吸収係数	142
					非晶質	55
					比透磁率	166
					比熱	79, 183
					比誘電率	154
					<b>【ふ】</b>	
					ファン・デル・ワールス結合	43
					フェライト	170
					フェリ磁性	167
					フェリ磁性体	167, 169
					フェルミエネルギー	96
					フェルミ温度	96
					フェルミ球	96

フェルミ速度	96	飽和磁化	168		
フェルミ・ディラック		飽和領域	135	<b>【も】</b>	
分布関数	100, 121	ボーズ・アインシュタイン		モード	76
フェルミ波数	96	分布関数	100	<b>【ゆ】</b>	
フェルミ粒子	100	ボーズ粒子	100	有限井戸型ポテンシャル	22
フォノン	62, 78	ポテンシャルエネルギー		有効質量	110
不確定性原理	4		12, 44	有効状態密度	124
複素誘電率	159	ホール	116	誘電損失	160
不純物半導体	116	ホール移動度	140	誘電体	151
不純物領域	134	ホール係数	139	誘電分極	151
物質波	4	ホール効果	135	誘電分散	159
ブラッグの回折条件	58, 60	ボルテックス状態	183	誘電率	153
ブラベー格子	52	ホール電圧	138		
プランク定数	2	ホール電界	137	<b>【り】</b>	
プランク分布	78			離散化	3
フレネル欠陥	56	<b>【ま】</b>		離散的	21
ブロッホの定理	104	マイスナー効果	173, 175, 176	粒子性	4
分極	151	マーデルング定数	46	量子化	2
分極電荷	154	<b>【み】</b>		量子数	16
分極ベクトル	151	ミラー指数	55	臨界温度	172
分散曲線	66			臨界磁界	172, 181
<b>【へ】</b>		<b>【む】</b>		<b>【ろ】</b>	
変数分離	91	無限井戸型ポテンシャル	12	ローレンツ電界	156
<b>【ほ】</b>		<b>【め】</b>		ロンドンの磁界侵入深さ	
ボア磁子	164	面欠陥	56	ロンドン方程式	179
方位量子数	163				178
方向のミラー指数	54				

<b>【B】</b>		<b>【P】</b>		<b>【S】</b>	
BCS 理論	185	pn 積	127	sp <sup>3</sup> 混成軌道	51
<b>【N】</b>		pn 接合	143	SQUID	186
n 型半導体	127	p 型半導体	127	<b>【X】</b>	
				X 線回折法	58



— 著者略歴 —

- 1990年 岩手大学工学部電子工学科卒業  
1992年 岩手大学大学院工学研究科博士前期課程修了  
(電子工学専攻)  
1996年 山形大学大学院工学研究科博士後期課程修了  
(システム情報工学専攻)  
博士(工学)  
1996年 八戸工業高等専門学校助手  
2003年 八戸工業高等専門学校講師  
2006年 八戸工業高等専門学校助教授  
2007年 八戸工業高等専門学校准教授  
現在に至る

## 電子物性入門

Introduction to Electronic Properties of Materials

©Yoshitaka Nakamura 2016

2016年1月12日 初版第1刷発行



検印省略

著者 なか むら よし たか  
中 村 嘉 孝  
発行者 株式会社 コロナ社  
代表者 牛来真也  
印刷所 新日本印刷株式会社

112-0011 東京都文京区千石4-46-10

発行所 株式会社 コロナ社

CORONA PUBLISHING CO., LTD.

Tokyo Japan

振替00140-8-14844・電話(03)3941-3131(代)

ホームページ <http://www.coronasha.co.jp>

ISBN 978-4-339-00878-4 (横尾) (製本: 愛千製本所)

Printed in Japan



本書のコピー、スキャン、デジタル化等の無断複製・転載は著作権法上での例外を除き禁じられております。購入者以外の第三者による本書の電子データ化及び電子書籍化は、いかなる場合も認めておりません。

落丁・乱丁本はお取替えいたします