物理工学専攻院試解答集
2015 年度物理学 II 第 4 問

政岡凜太郎

[1] 逆格子と第一ブリュアン域

逆格子の定義は $\boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$ である。$\boldsymbol{b}_1 = (u, v)$ とすると

$$\frac{\sqrt{3}a}{2}u + \frac{a}{2}v = 2\pi, \qquad -\frac{\sqrt{3}a}{2}u + \frac{a}{2}v = 0.$$

和と差から $v = 2\pi/a$, $u = 2\pi/(\sqrt{3}a)$ を得る。同様に

$$\boxed{\boldsymbol{b}_1 = 2\pi\left(\frac{1}{\sqrt{3}a}, \frac{1}{a}\right), \qquad \boldsymbol{b}_2 = 2\pi\left(-\frac{1}{\sqrt{3}a}, \frac{1}{a}\right).} \tag{1}$$

第一ブリュアン域は、原点と最短の逆格子点との垂直二等分線に囲まれた領域である。最短の 6 点は $\pm\boldsymbol{b}_1, \pm\boldsymbol{b}_2, \pm(\boldsymbol{b}_1 - \boldsymbol{b}_2)$。各境界は $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{G} = |\boldsymbol{G}|^2/2$ を満たす。$\boldsymbol{G} = \boldsymbol{b}_1 - \boldsymbol{b}_2$ の境界は $k_x = 2\pi/(\sqrt{3}a)$。$\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2$ の境界の交点は $k_x = 0$, $k_y = 4\pi/(3a)$ なので

$$\boxed{P = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, 0\right), \qquad Q = \left(0, \frac{4\pi}{3a}\right).} \tag{2}$$

得られる領域は図の正六角形である。図中の O は波数原点を表す。

[2] スピンを含めた自由電子の状態数

単位胞の面積を s、系全体の面積を S とすると

$$s = |\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2| = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2, \qquad \text{電子数} = \frac{2S}{s}.$$

波数空間で単位面積あたりの状態数は $S/(2\pi)^2$。スピン 2 重を含めて円内の状態を数えると

$$2\frac{S}{(2\pi)^2}\pi k_F^2 = \frac{2S}{s}, \qquad \boxed{k_F = \frac{1}{a}\sqrt{\frac{8\pi}{\sqrt{3}}}.} \tag{3}$$

[3] フェルミ面と第一域の関係

円の面積は $\pi k_F^2 = (2\pi)^2/s$ で、第一ブリュアン域の面積に等しい。ただし形は円と六角形で異なる。六角形の内接半径 r_{in} と外接半径 r_{out} は

$$r_{\text{in}} = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \qquad r_{\text{out}} = \frac{4\pi}{3a}, \qquad r_{\text{in}} < k_F < r_{\text{out}}.$$

したがってフェルミ面は各辺を横切るが、六角形の頂点には届かない。自由電子のフェルミ面は第一域の外にも続く円である。

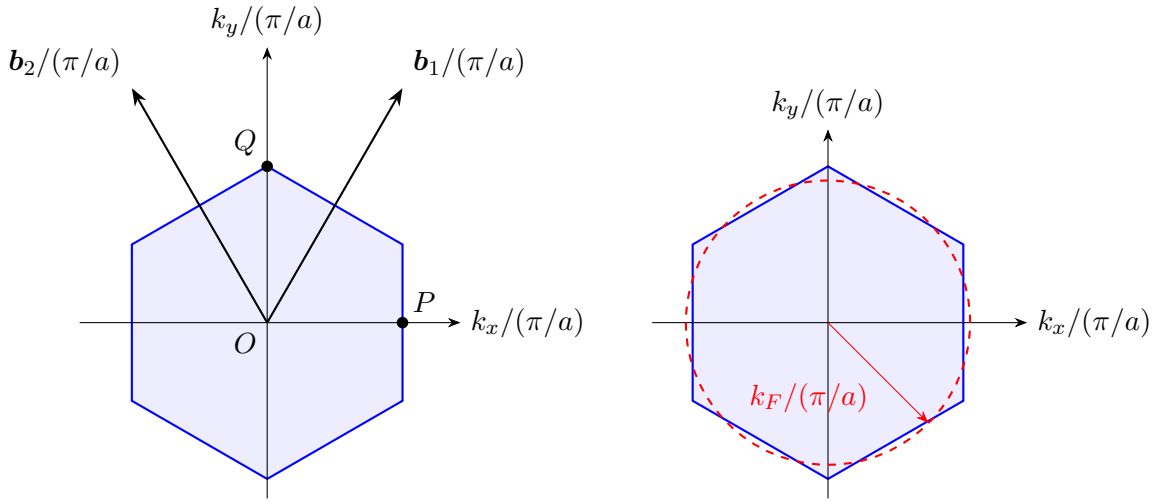


図 1: 左: 逆格子と第一域。座標の単位は π/a。右: 同じ縮尺の第一域（青線）と自由電子のフェルミ面（赤破線）。

[4] 原子軌道への射影

原問の図 2 の配置に従って、A から最近接 B への変位を

$$\boldsymbol{\delta}_1 = \frac{\boldsymbol{a}_1 + 2\boldsymbol{a}_2}{3}, \quad \boldsymbol{\delta}_2 = \frac{\boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_2}{3}, \quad \boldsymbol{\delta}_3 = \frac{-2\boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_2}{3} \tag{4}$$

と選ぶ。どれも長さ $a/\sqrt{3}$ である。最近接位相の和を

$$f(\boldsymbol{k}) = \sum_{j=1}^{3} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_j}$$

と定義する。以下 $\lambda^A = \lambda^A_{\boldsymbol{k}}$, $\lambda^B = \lambda^B_{\boldsymbol{k}}$ と略記する。A 軌道への固有方程式の射影は、規格化積分と最近接行列要素だけを残して

$$\int \phi_A(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i^A)\mathcal{H}\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_i^A}[\epsilon_A\lambda^A + \tau f(\boldsymbol{k})\lambda^B], \tag{5}$$

$$E(\boldsymbol{k})\int \phi_A(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i^A)\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_i^A}E(\boldsymbol{k})\lambda^A. \tag{6}$$

B から A への最近接変位は $-\boldsymbol{\delta}_j$ なので、B への射影には f^* が現れる。共通の位相を除くと

$$\boxed{\begin{pmatrix} \epsilon_A & \tau f(\boldsymbol{k}) \\ \tau f(\boldsymbol{k})^* & \epsilon_B \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \lambda^A \\ \lambda^B \end{pmatrix} = E(\boldsymbol{k})\begin{pmatrix} \lambda^A \\ \lambda^B \end{pmatrix}.} \tag{7}$$

これは係数に対する固有値方程式である。

[5] 二本のエネルギー帯

行列式がゼロになる条件は

$$(E - \epsilon_A)(E - \epsilon_B) - \tau^2|f(\boldsymbol{k})|^2 = 0.$$

したがって上帯を E_+、下帯を E_- とすると

$$\boxed{E_\pm(\boldsymbol{k}) = \frac{\epsilon_A + \epsilon_B}{2} \pm \sqrt{\frac{(\epsilon_A - \epsilon_B)^2}{4} + \tau^2|f(\boldsymbol{k})|^2}.} \tag{8}$$

位相の和の絶対値の二乗は

$$|f|^2 = 3 + 2\sum_{i<j} \cos[\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{\delta}_i - \boldsymbol{\delta}_j)] \tag{9}$$

$$= 3 + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}ak_x}{2}\right)\cos\left(\frac{ak_y}{2}\right) + 2\cos(ak_y). \tag{10}$$

よってこの最後の式を代入すれば k_x, k_y の明示的な関数になる。

[6] 占有状態と最小ギャップ

各エネルギー帯は単位胞あたりスピン込みで 2 個の電子を収容する。電子が単位胞あたり 2 個なら下帯は満たされ、上帯は空である。$f = 0$ で下帯が最大、上帯が最小となる。$k_x = 0$ では

$$|f|^2 = 1 + 4\cos\left(\frac{ak_y}{2}\right) + 4\cos^2\left(\frac{ak_y}{2}\right) = \left[1 + 2\cos\left(\frac{ak_y}{2}\right)\right]^2.$$

ゼロになるのは $\cos(ak_y/2) = -1/2$。第一域にある点は

$$\boxed{X = \left(0, \pm\frac{4\pi}{3a}\right), \qquad E_1 = \epsilon_B, \quad E_2 = \epsilon_A, \quad E_g = \epsilon_A - \epsilon_B.} \tag{11}$$

これらは図の上・下の頂点に当たる。以下では $X = (0, 4\pi/(3a))$ を選ぶ。

[7] X 近傍の曲率と有効質量

$k_y = 4\pi/(3a) + q$ とおき、$|aq| \ll 1$ で展開すると

$$1 + 2\cos\left(\frac{2\pi}{3} + \frac{aq}{2}\right) = -\frac{\sqrt{3}a}{2}q + O(q^2).$$

$E_g > 0$ なので平方根を展開できる。原問の $E_g \gg |\tau|$ の範囲では

$$E_+(q) = \epsilon_A + \frac{3a^2\tau^2}{4E_g}q^2 + O(q^3), \tag{12}$$

$$E_-(q) = \epsilon_B - \frac{3a^2\tau^2}{4E_g}q^2 + O(q^3). \tag{13}$$

電子の有効質量を $1/m^* = (1/\hbar^2)\,\partial^2 E/\partial k_y^2$ で定義すると

$$\boxed{m_+^* = \frac{2\hbar^2 E_g}{3a^2\tau^2}, \qquad m_-^* = -\frac{2\hbar^2 E_g}{3a^2\tau^2}.} \tag{14}$$

上帯は極小なので正、下帯は極大なので負である。下帯のホールを用いる場合は、電子の符号付き曲率質量とは別に $m_{\mathrm{hole}}^* = |m_-^*|$ となる。

[8] すべて同じ原子にした場合

$\epsilon_B = \epsilon_A$ とするとギャップは消え、$k_x = 0$ で

$$E_{\pm}(k_y) = \epsilon_A \pm |\tau| \left| 1 + 2\cos\left(\frac{ak_y}{2}\right) \right|.$$

よって X 近傍では

$$\boxed{E_{\pm}(q) = \epsilon_A \pm \frac{\sqrt{3}a|\tau|}{2}|q| + O(q^2), \qquad E_g = 0.} \tag{15}$$

上下のエネルギーを大小で並べると $|q|$ を含む直線的な交差になる。[7] の放物的な有効質量の式を、ギャップが消える場合にそのまま用いることはできない。