結晶格子の量子論とバンドギャップ

舘川 暁斗　明治大学大学院先端数理科学研究科
博士前期課程　河野研究室

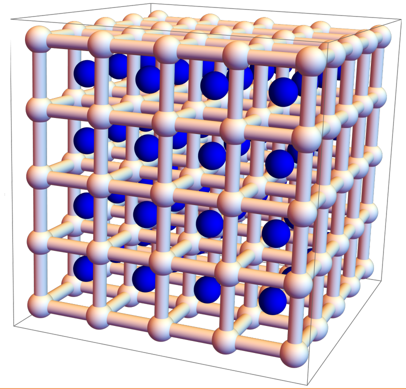
自己紹介と研究内容

私は, 結晶構造の量子論, 特に半導体に興味を持っている. 結晶格子においてのブロッホの定理を, 結晶群の表現を用いることによって精密化する. またバンド構造, バンドギャップについて, 固有値問題の立場からから研究を行う.

結晶群の対称性を持つシュレディンガー作用素

結晶群

結晶群 G は n 次元ユークリッド空間の合同変換群の以下の 1,2 を満たす部分群である.



1. 群 G の作用は不連続である.
2. 群 G の要素で平行移動全体をなす群は n 個の 1 次独立なベクトル $e_1, \cdots, e_n$ の平行移動で生成される格子群 Γ である.

Blochの定理

$L^2(\mathbb{R}^n)$ に作用するシュレディンガー作用素を

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\boldsymbol{x})$$

Δ:$\mathbb{R}^n$ のラプラシアン $V(\boldsymbol{x})$: ポテンシャル関数, Γ の作用で不変. $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$

固有値問題 $\hat{H}\psi(\boldsymbol{x}) = \lambda\psi(\boldsymbol{x})$ を考える. この時, $L^2(\mathbb{R}^n)$ に属する解 ψ は

$$\psi(\boldsymbol{x}) = e^{2i\pi\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}u(\boldsymbol{x})$$

となる. $u(\boldsymbol{x})$ は Γ の作用で不変, $\boldsymbol{k} \in \mathbb{R}^n$ この定理を結晶群に拡張する.

結晶群の表現の導出

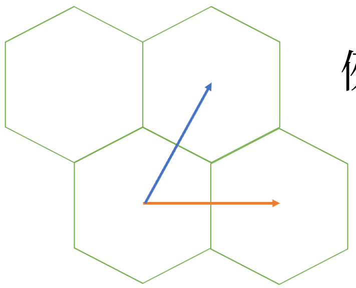
格子群の表現

$\hat{H}$ の固有値問題の解 ψ に対して $t \in \Gamma$ の作用を表現:χ:$\Gamma \to \mathbb{C}^*$ を用いて $\psi(t(x)) = \chi(t)\psi(x)$, $t \in \Gamma$ と考えると $\chi(t) = e^{2i\pi \boldsymbol{k}\cdot t}$ となる.

結晶群の表現

Bloch の定理より固有空間の結晶群の表現は $\chi : \Gamma \to \mathbb{C}^*$ の誘導表現として得られることが示される. $\lambda_j(\boldsymbol{k})$ の固有空間への G の作用は $\boldsymbol{k}$ で定まる χ の誘導表現である.

$\boldsymbol{k}$ を固定することで固有値 $\lambda_1(\boldsymbol{k}) \leq \lambda_2(\boldsymbol{k}) \leq \lambda_3(\boldsymbol{k}) \leq \cdots \lambda_k(\boldsymbol{k}) \leq \cdots$ が得られ, 有限次元の固有空間が得られる.



例として六方格子を考える. χ による Γ の表現空間の基底を $\exp(2\pi i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\varphi(\boldsymbol{x})$ とする.

$$\rho(g)\exp(2\pi i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\varphi(\boldsymbol{x}) = \exp(2\pi i\boldsymbol{k}\cdot g^{-1}\boldsymbol{x})\varphi(g^{-1}\boldsymbol{x}), g \in G$$

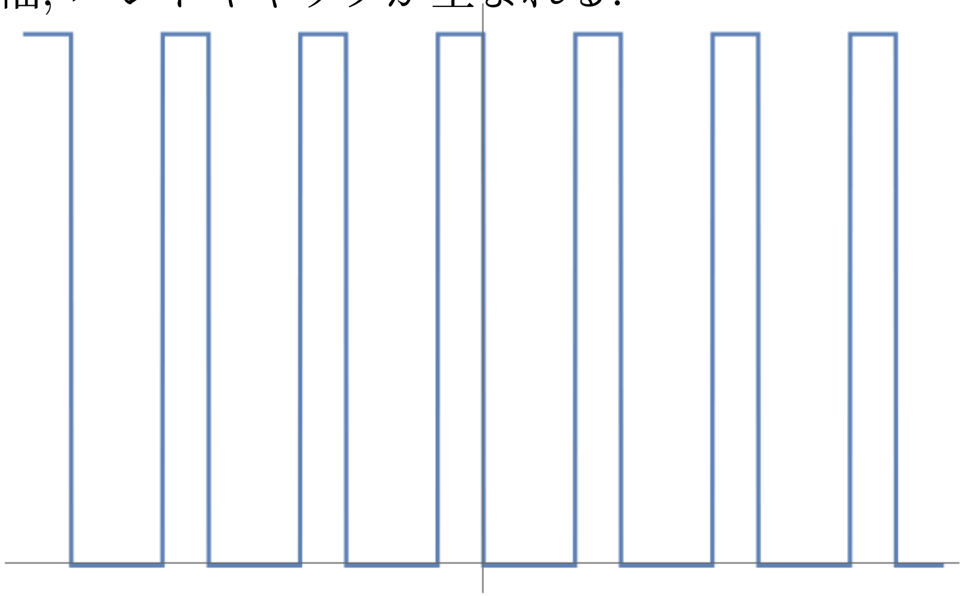
より, G の作用より次の 6 つの基底が作られる. 得られる表現 ρ はユニタリー表現となる.

$\boldsymbol{e} = {}^t(e^{2\pi i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\varphi(\boldsymbol{x}), e^{2\pi i\boldsymbol{k}\cdot s\boldsymbol{x}}\varphi(s\boldsymbol{x}), e^{2\pi i\boldsymbol{k}\cdot r\boldsymbol{x}}\varphi(r\boldsymbol{x}), e^{2\pi i\boldsymbol{k}\cdot r^2\boldsymbol{x}}\varphi(r^2\boldsymbol{x})$,$e^{2\pi i\boldsymbol{k}\cdot sr\boldsymbol{x}}\varphi(sr\boldsymbol{x})$, $e^{2\pi i\boldsymbol{k}\cdot sr^2\boldsymbol{x}}\varphi(sr^2\boldsymbol{x}))$

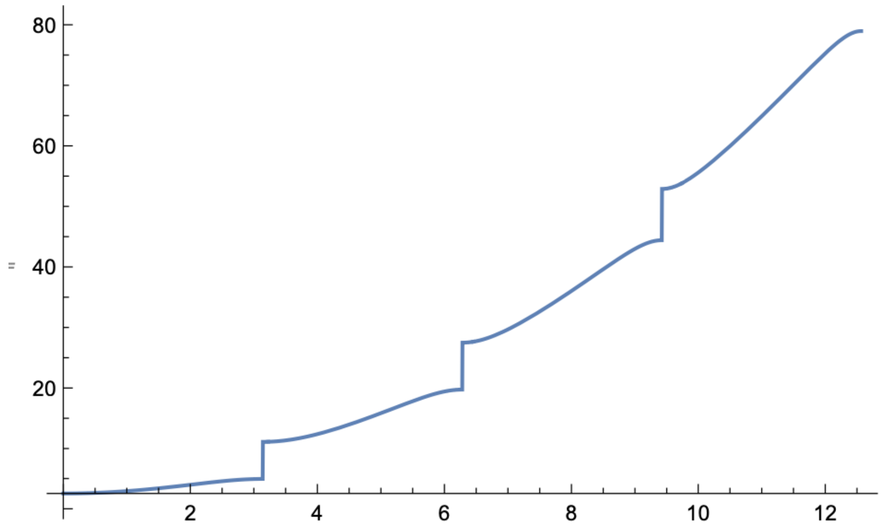
バンドギャップについて

バンド，バンドギャップ

結晶においてシュレディンガー作用素の固有値問題 $\hat{H}\psi(\boldsymbol{x}) = \lambda\psi(\boldsymbol{x})$ において $\boldsymbol{k}$ ごとに $\lambda(\boldsymbol{k})$ の値が定まる．この固有値 $\lambda(\boldsymbol{k})$ の値がエネルギーの値であり, $\boldsymbol{k}$ を固定するごとに $\lambda_1(\boldsymbol{k}) \leq \lambda_2(\boldsymbol{k}) \leq \lambda_3(\boldsymbol{k}) \leq \cdots \lambda_k(\boldsymbol{k}) \leq \cdots$ と離散的に定まる．$\boldsymbol{k}$ を動かすことでバンドが得られる．しかし $\boldsymbol{k}$ がある値をとると関数 ψ の $L^2(\mathbb{R}^2)$ 性が崩れる．この時に λ の幅, バンドギャップが生まれる．



ポテンシャル関数：井戸型ポテンシャル



自由電子のバンドギャップの例

まとめと今後の研究課題

・ハミルトニアンが結晶群の対称性をにもつシュレディンガー作用素の固有値問題を扱い. $\boldsymbol{k}$ を固定することで固有値 $\lambda_1(\boldsymbol{k}) \leq \lambda_2(\boldsymbol{k}) \leq \lambda_3(\boldsymbol{k}) \leq \cdots \lambda_k(\boldsymbol{k}) \leq \cdots$ が得られ, 有限次元の固有空間が得られた.

・ $\boldsymbol{k}$ を固定するごとに $\lambda_j(\boldsymbol{k})$ の固有空間への G の作用が $\boldsymbol{k}$ で定まる χ の誘導表現によりどのように作用しているか調べた.

今後

・$\boldsymbol{k}$ の空間を用いてバンド構造の変化を調べていきたい.