

凝縮系物理のレポート課題に取り組む皆さんへ、

本日（9月29日）、複数名の学生さんから課題2について「(題意が) わからない」と質問を受けました。

そこで、ヒントを作りました。

以下を参考にして、答えを見つけて下さい。なお、このヒントを参考にして問題を解いた人は、レポートに、『参考にしました』と一筆書いて下さい。

(ノーヒントで解く人もいると思うので、その確認のためです。)

なお、 $(0,0)-(π,0)-(π,π)$ の表記部分については、2次元系のブリリュアンゾーン内の Γ 、X、M点を指します。(a=1として考えて下さい。)

レポートの締め切りを1日延長して、10月1日にします。

4時30分までに、古川研125室に提出して下さい。

がんばれ！

古川

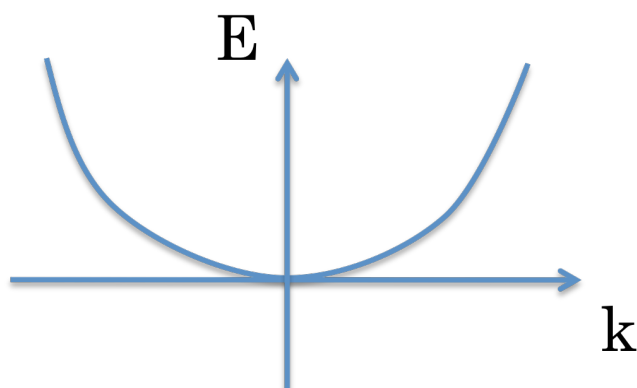
単原子1次元電子系の場合の回答例

バンド構造の絵

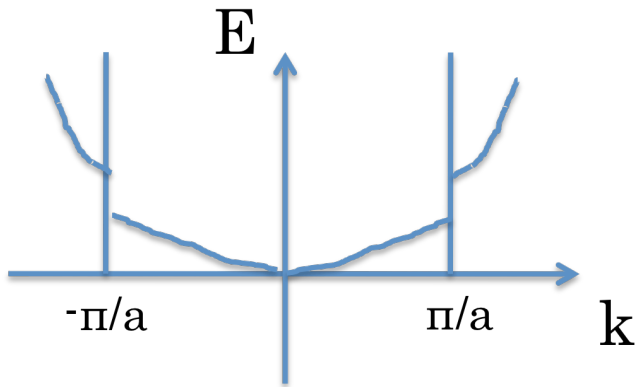
自由電子系では、電子のエネルギーは運動量 k の2乗に比例する。

つまり、 $E \propto k^2$

これ(バンド構造)をポンチ絵で図示すると



これに格子の周期性の影響を入れると、ゾーンバウンダリーでのギャップ形成（アンチクロッシング）が起こり、



(絵が雑でごめんなさい!)

という感じになる。ただし、 a は実空間の格子間隔（周期）。

フェルミ面の絵

1次元の場合、フェルミ面の絵は書けません（面じゃなくて点ですから!）

この系が絶縁体となる条件

絶縁体になるためには、あるエネルギー以下のバンドを電子が完全に占有し、それ以上のエネルギーバンドは完全に空の状態になる必要がある。つまり、ギャップのすぐ下のエネルギーの軌道まで電子が詰まった状態。

例えば、上の図だと第一ブリリユアンゾーン ($-\pi/a < k < \pi/a$) 内に存在する軌道が完全に電子で占有された状態がそれにあたる。

それはどんなときか、、、

k 空間では、 $2\pi/L$ の間隔で軌道が存在する。

従って、第一ブリリユアンゾーン ($-\pi/a < k < \pi/a$) 内では $(2\pi/a) / (2\pi/L) = L/a$ 個の軌道が存在する。1個の軌道にはスピン量子数の異なる2つの電子まで入るので、第一ブリリユアンゾーン全体では $2L/a$ 個までの電子が入ることができる。つまり、系にちょうど $2L/a$ 個の価電子が存在すれば絶縁体になる。

ここで、実は、 L/a とは系の格子点の数に等しい。従って、絶縁体になるためには、各サイト当たり2個の電子をもつ事が条件となる。