

# 半導体デバイスの物理 (基礎編)

## 一次元自由電子の Schrödinger 方程式

### 1 波動関数

#### 1.1 確率波

前回まで 2 回程数学的準備を続けましたが、今回から量子論/物性論に戻ります。現在我々は、第 2 回レポートでまとめた電子の性質として電子は粒子と波動の二重性を持つという認識を得ています。

これをもう少し考えてみると、粒子である電子の存在確率に波動性があると解釈することも可能です。そこで確率波という考え方を導入することにします。

まず、電子が波動であることを考えれば、電子を表す波動  $\psi(x, t)$  は第 1 回レポートの式 (6) より

$$\psi(x, t) = \cos(kx - \omega t) \quad (1)$$

として表すことができます (もちろん  $\sin$  で表現しても問題ありません)。ここで式 (1) の  $k$  は波数、 $\omega$  は角振動数です。

電子が de Broglie 波であること、すなわち粒子と波動の二重性を持つことが確認された実験は、電子線をニッケルにあてたことで生じた回折波の観測によるものだったことも、第 2 回レポートで説明しました。

そのときは回折によって「一様な回折稿」が形成されましたが、これの意味するところは、電子の存在確率は時間/空間によらず一様だということです。

すると電子の存在確率は式 (1) で表されるとした場合、存在確率が時間と空間に依存することとなり、回折観測の実験結果と矛盾します。つまり式 (1) で de Broglie 波を表現することはできないのです。

#### 1.2 複素数による表現

時間と位置によらず常に大きさが一定... 例えば思いつくのは円周上の点です。円周上を移動するイメージであれば、位置を表す角度によらず、大きさである半径は一定で、かつ周期性を持ちます。しかし 2 軸なので位置としての制限が出てしまいます。

そこで、実数空間の 1 軸  $(x, y, z)$  それぞれに対し虚数軸を組み合わせ、複素平面での極座標を利用してはどうでしょうか。実数軸上では任意の確率値 (0~1) ですが、複素数としては大きさ 1 を保てます。つまり式 (2) のように確率波  $\psi(x, t)$  を記述することで、波動性/周期性を持ち、かつ存在確率 (確率波の 2 乗値) が一定になるという条件を満たすことができるのです。

$$\psi(x, t) = \cos(kx - \omega t) + i \sin(kx - \omega t) = \exp\{i(kx - \omega t)\} \quad (2)$$

この式 (2) は波動関数と呼ばれます。かなり定性的な説明で、少しだけ「数学の得意な人から教わった感」もありますが、工学的見地に基づく立場としては、この程度の理解でも問題無いでしょう。

これで式 (2) として、電子という粒子かつ波動である存在の確率を表現することができました。先にも書いたように存在確率自身は式 (2) の 2 乗、つまり  $|\psi^2|$  です。 $\psi$  は複素数なので、共役複素数積

$$|\psi^2| = \psi^* \psi \quad (3)$$

として存在確率の大きさを表します。

## 2 Schrödinger 方程式

### 2.1 de Broglie の関係式と波動関数

ここで電子に関して我々が持っている情報を整理してみましょう。第 2 回レポート「電子の粒子性と波動性」にて、その二重性を表現する式 (24),(25):de Broglie の関係式があります。改めて、式 (4),(5) としておきます。

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad (4)$$

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \quad (5)$$

つまり、現在の電子に関する情報は

- ・電子のエネルギー/運動量と波動の関係を示す式 (4),(5)
- ・電子の波動関数である式 (2)

の 2 種になります。

そこで波動関数とエネルギー  $E$ 、運動量  $p$  との関係を求めてみましょう。具体的には式 (2) の  $k, \omega$  を  $E, p$  で置き換えます。

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \exp \left\{ i \left( \frac{p}{\hbar} x - \frac{E}{\hbar} t \right) \right\} \\ &= \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (px - Et) \right\} \end{aligned} \quad (6)$$

式 (6) から、 $\psi$  と  $E$  の関係及び  $\psi$  と  $p$  の関係を整理します。まず  $\psi$  を  $t$  で偏微分<sup>(\*1)</sup> すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (px - Et) \right\} \cdot -\frac{i}{\hbar} E = \psi \left( -\frac{i}{\hbar} \right) E \\ i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= E\psi \end{aligned} \quad (7)$$

次に  $\psi$  を  $x$  で偏微分すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial x} &= \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (px - Et) \right\} \cdot \frac{i}{\hbar} p \\ -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} &= p\psi \end{aligned} \quad (8)$$

が得られます。

### 2.2 自由電子のエネルギー

次に古典物理学における、波動性を意識しない場合のエネルギーと運動量の関係を考えます。特に、ここでは自由電子を対象に考えます。その理由ですが、半導体デバイスの特性は自由電子の振る舞いで決まることがほとんどだからです。

自由電子の場合、その定義から言って電子の持つエネルギーは全て運動エネルギーです。よって電子の質量を  $m$ 、速度を  $v$  とした場合、自由電子の運動量  $p$  は

$$p = mv \quad (9)$$

そのときの運動エネルギー  $E$  は<sup>(\*2)</sup>

$$E = \frac{1}{2}mv^2 \quad (10)$$

で与えられます。この 2 式から、 $E$  と  $p$  の関係

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (11)$$

が得られます。

## 2.3 一次元自由電子の Schrödinger 方程式

我々はこちらまで、電子の波動性に着目したとき

- ・エネルギー  $E$  と波動関数  $\psi$  の関係:式 (7)
- ・運動量  $p$  と波動関数  $\psi$  の関係:式 (8)

電子の粒子性に着目したとき

- ・エネルギー  $E$  と運動量  $p$  の関係:式 (11)

についてまとめてきました。

ここで第2回レポートにて、de Broglie の関係式をどのように検証したか思い出してみると、既知のエネルギーで電子をニッケル表面に当て、その回折縞から求められた波長と de Broglie の関係式から計算された波長が一致するという事でした。

すると、当然ながら式 (7),(8) と式 (11) は両立するはずで、よって次式のように書くことができます。

$$E\psi = \frac{p^2}{2m}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \quad (12)$$

$p^2$  を何とかするため、式 (8) に着目<sup>(\*)3</sup> してみましょう。

$$p\psi = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

この式の両辺を  $x$  で偏微分すると

$$\begin{aligned} p\frac{\partial\psi}{\partial x} &= -i\hbar\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \\ p\cdot\left(-\frac{p}{i\hbar}\psi\right) &= -i\hbar\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \\ p^2\psi &= -\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \end{aligned} \quad (13)$$

この結果を式 (12) に入れると、次式が得られます。

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \quad (14)$$

やっとここまでできました。式 (14) は、存在確率を波動関数  $\psi$  で表す自由電子が満たすべき方程式となっています。この式は一次元自由電子の Schrödinger 方程式と呼ばれます。

## 2.4 三次元での記述

原理を理解するための解析は一次元で進めることが多いのですが、一応三次元の記述についても説明しておきます。と言っても話は簡単で、 $x, y, z$  の三要素を合わせるだけです。

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= (x, y, z) \\ \mathbf{p} &= (p_x, p_y, p_z) \end{aligned}$$

とすれば、式 (6) より

$$\psi = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - Et)\right\} \quad (15)$$

になります。 $\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}$  はベクトル積なので、 $\psi$  はスカラーです。よって式 (14) と式 (15) から

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \quad (16)$$

が得られます。

これは単に表記上の話ですが、Laplace 演算子と呼ばれる

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

を用いれば、式 (16) は

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \quad (17)$$

となります。

### 3 まとめ

では今回のレポートをまとめましょう。最初に粒子と波動の二重性を持つ de Broglie 波の波動関数を、複素数を用いて式 (2) で表すことにしました。

次に de Broglie の関係式 (4),(5) を波動関数式 (2) に適用し、エネルギー  $E$  と波動関数  $\psi$ 、運動量  $p$  と波動関数  $\psi$  の関係を、それぞれ式 (7),(8) として整理しました。

更に自由電子の古典論的運動エネルギー/運動量と、波動性に着目して得られた式 (7),(8) は両立するという条件から、一次元自由電子の Schrödinger 方程式である式 (14) を導きました。

式 (14) は、自由電子に対して常に成立する方程式です。つまり我々は式 (14) に対してエネルギー  $E$  の条件を与えれば、波動関数  $\psi$  について解くことができるようになったのです。

次回からは、固体や結晶のエネルギー状態をモデル化し、それを Schrödinger 方程式で解析することにより、固体/結晶内電子の特性を見ていきたいと思えます。

### 4 注釈

#### (\*1):偏微分

波動関数  $\psi$  は  $x, t$  という二つの変数を持つ関数です。よって  $\psi$  の変化分を考える際には、本来であれば  $x, t$  の両方を処理しますが、偏微分の場合は、着目する変数に対する変化分のみ扱うこととなります。つまり、 $t$  で偏微分する際は、 $x$  を定数とみなすこととなります。

#### (\*2):運動エネルギーの導出

電子に働く力  $F$  の定義は、運動量  $p$  の変化なので

$$F = \frac{dp}{dt} = m\frac{dv}{dt}$$

エネルギー  $E$  は、その定義より

$$\begin{aligned} E &= \int_0^x F dx = \int_0^x m \frac{dv}{dt} dx \\ &= m \int_0^t \frac{dv}{dt} \cdot \frac{dx}{dt} dt = m \int_0^t v \frac{dv}{dt} dt \\ &= m \int_0^v v dv = \frac{1}{2}mv^2 \end{aligned}$$

#### (\*3):導関数にもとの関数が含まれるとき

式 (8) のように導関数にもとの関数が含まれる場合、もとの関数の  $n$  乗は  $n$  階導関数を用いて表現できること

がほとんどです。合成関数として微分すれば、積項としてもとの関数が出てくるので、考えてみると当たり前の話です。

この性質は物理数学の観点で多用されるので、よく覚えておいて下さい。

以上

#### 履歴

2007/01/31 : 初版

Copyright(c)2007 Monpe  
All Rights Reserved