

前回のまとめ

(1) バンドギャップができる要因

a) 共有結合（等極結合）

Si などの等極性結晶と LCAO 法によるバンド形成で見たように、基本単位格子が 2 つ以上の原子を含み、それらの原子間の結合、反結合軌道のエネルギー分裂によってバンドギャップが形成される

b) イオン結合（異極結合）

酸化物などの異極性結晶と LCAO 法によるバンド形成で見たように、基本単位格子が 2 種類以上の原子を含み、それらの原子のエネルギー準位の違いによってバンドギャップが形成される

c) ブリルアンゾーン端での干渉（Bragg 反射に対応する）

ほとんど自由な電子モデルで見たように、ブリルアンゾーン境界で電子の回折が起こってバンドギャップが形成される

d) その他

他に、d 電子、f 電子などの局在性の強い軌道が価電子帯上端を作っている場合、電子間反発によってバンドギャップが形成されることがある。同じ軌道内の電子間反発の場合を「ハバードギャップ」、陽性イオンと陰性イオンの間での電子間反発が問題になる場合を「電荷移動ギャップ」と呼ぶ。これらが一般に「強電子相関係」と呼ばれている。

上の(1)~(3)を拡大解釈すればこれらも(1)~(3)のグループに入れることができるが、(1)~(3)は一電子バンド構造でもバンドギャップが形成されるのに対し、強電子相関係では一電子バンド構造によるバンドギャップはほとんど意味を成さない。

(2) 大雑把に解釈する場合、逆空間における k を、電子が進む方向とみなしてよい場合が多い。

注意： 逆空間の k は、厳密には電子の運動量ではない

： 運動量保存則が成立しない $k' = k + G_{hkl}$

(2) 金属であるか、絶縁体（半導体）であるかは、バンド構造のどこまでを電子が占有しているかで判断できる。

その他重要なこと（今日の講義）

(3) 光吸収とバンド構造の関係

絶縁体、半導体の光吸収の最低エネルギーはバンドギャップで決まる。

(4) 有効質量、移動度の概念とバンド構造との関係

有効質量は、バンド分散 $E(k)$ の「曲率」 $d^2E(k)/dk^2$ が大きいほど小さくなる。

有効質量は共鳴積分 $|h_{12}|$ が大きいほど小さくなる。

「隣の原子間の波動関数の重なりが大きいほど、キャリアは“動きやすい”」

移動度は有効質量が小さいほど、緩和時間が長いほど大きい。

電子による電気伝導度（電子伝導度）は、移動度とキャリア密度が高いほど大きい。

キャリア密度が高い半導体では赤外領域の自由電子吸収によって有効質量、緩和時間が測れる。