

2. バンド図の k .

確かに 固体物理学では様々な場面で k が登場します。必ずしも同じものとはいえず、文脈をしっかりと把握した上で解釈すべきです。ここではエネルギーバンドの上での k について述べてます。

まず、一般論として述べますと k は空間(実空間)の“座標点”を現表わすものです。でそので電子状態とは無関係に定義されるものです。つまり基本ベクトル

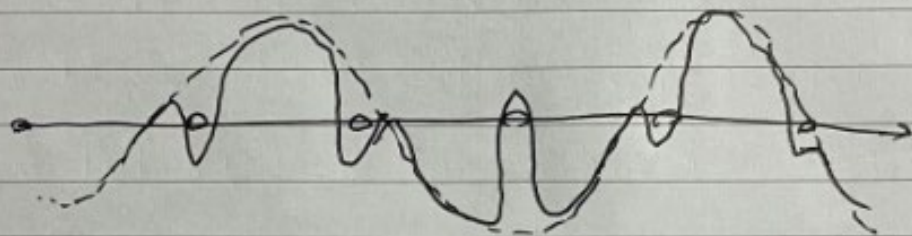
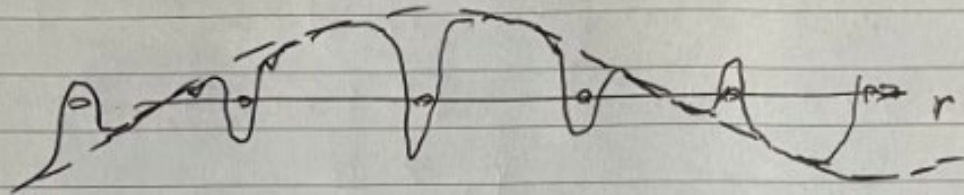
$$b_i = 2\pi \frac{a_j \times a_k}{a_i \cdot (a_j \times a_k)}$$

で張られる逆格子空間の一点を表わすものですが、それ以上、以下でもありません。

ここで周期ポテンシャル中の電子状態という問題に阻みますと、 k には特別の意味がでてきます。Bloch定理によりますと、電子の固有状態(定常状態)は k を量子数として表わされるということです。

イメージでいえば、次のページで示します。

どんな固有状態 $\psi_k(r)$ でも 下図のように、



$\psi_k(r)$ には 点線 で示される 包絡線 があるということです。
この包絡線は 平面波 e^{ikr} です。

一つの固有状態 $\psi_k(r)$ の中には ただ一つの k の包絡線
しかありません。違う k は 混ざりません。だから、
固有状態 ψ は ψ_k と k で 指定されるのです。

符号に関しては、時間依存も含めて考えますと
平面波は $e^{i(kr - \omega t)}$ と表わされます。

つまり k が 正 となるのは、進行波の方向を示す
ものです。