

物性工学

問題 1. 次の文章中の (a) ~ (l) に当てはまる, 言葉, 数式, 記号等を対応する解答欄に書け.

金, 銀などの金属の結晶は, 図 1 の構造をとる. 図 1 の結晶構造は (a) 構造と呼ばれ, 各原子は (b) 個の最近接原子で囲まれている. 格子定数を a とすると, 最近接原子間距離は (c) である. 図 1 の x, y, z 方向の単位ベクトルを, i_x, i_y, i_z とすると, 基本ベクトル a_1, a_2, a_3 は, (d) となる. このように基本ベクトルをとると, すべての格子点は, $r_n = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$ で定められ, 単位胞は Primitive cell になる.

次に図 1 の結晶構造の逆格子ベクトルを考える. 逆格子の基本ベクトル g_1, g_2, g_3 を a_1, a_2, a_3 を用いて表すと, (e) となり, 逆格子ベクトルは, $G_{hkl} = hg_1 + kg_2 + lg_3$ と定義される. 整数 h, k, l の組は $(h k l)$ 面の (f) と呼ばれ, G_{hkl} は $(h k l)$ 面と (g) に交わる. 格子面 $(h k l)$ の面間隔 d_{hkl} は, G_{hkl} を用いて (h) と表される. $(3 1 1)$ 面の面間隔 d_{311} は (i) である. 逆格子の基本ベクトル g_1, g_2, g_3 を i_x, i_y, i_z を用いて表すと, (j) となる. これは, 格子定数 (k) の (l) 構造の基本ベクトルとなっている.

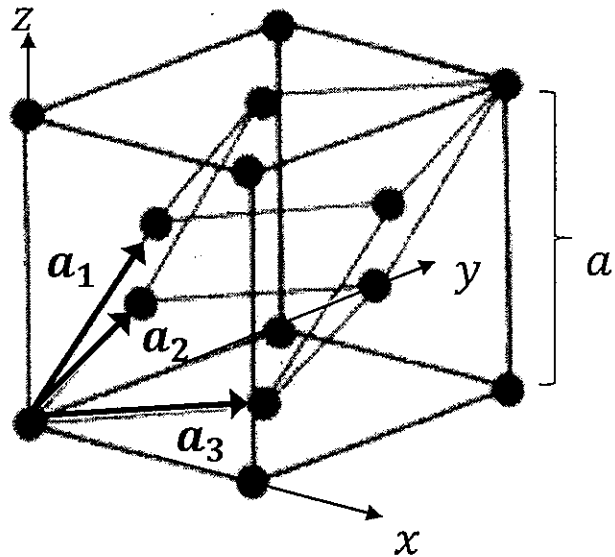


図 1 (a) 構造

問題2. 次の文章中の (i) ~ (iv) に当てはまる, 言葉, 数式, 記号等を対応する解答欄に書け. また, 1) ~ 6) の答えを対応する解答欄に書け.

結晶中の電子の状態について考える. 孤立した原子のエネルギー的に深い殻の準位を占める電子は, 空間的に強く局在している. これらの電子は, 原子が結晶を形成しても局在性を保持する. このような内殻電子の取り扱いには, 「強く束縛された電子の近似」が適している. この近似を用いると, 電子のエネルギー E は次のようになる.

$$E = E_0 + \sum_l e^{-ik \cdot \rho_l} \int \phi^*(\mathbf{r} - \rho_l) [V(\mathbf{r}) - U(\mathbf{r})] \phi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (1)$$

ここで, ρ_l はある格子点を原点にとった場合の任意の格子原子を表す位置ベクトル, $U(\mathbf{r})$ は孤立した原子の作るポテンシャル, $\phi(\mathbf{r} - \rho_l)$ は ρ_l に位置する孤立原子に束縛された電子の波動関数, E_0 は孤立した原子に束縛された電子のエネルギー固有値である. $V(\mathbf{r})$ は結晶中の電子に対するポテンシャル, $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ は波数ベクトルである. いま, 最近接原子までの重なりを考慮し, 最近接原子を結ぶベクトルを ρ_0 とすると, 必要な積分は次の2つになる.

$$\int \phi^*(\mathbf{r}) [V(\mathbf{r}) - U(\mathbf{r})] \phi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = -\alpha \quad (2)$$

$$\int \phi^*(\mathbf{r} - \rho_0) [V(\mathbf{r}) - U(\mathbf{r})] \phi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = -\gamma \quad (3)$$

波動関数が球対称のs関数の場合, γ はすべての最近接原子に対して同一の値をとるから, 式(1)を α, γ で表すと,

$$E = \text{[I]} \quad (4)$$

となる. 格子定数 a の単純立方格子を考えると, [ii] 個の最近接原子は $\rho_0 = \text{[iii]}$ にあるから, エネルギーを具体的な式で(三角関数を用いて)表すと,

$$E = \text{[iv]} \quad (5)$$

となる.

- 1) 第一ブリルアンゾーン内で, Γ 点 ($\mathbf{k} = (0, 0, 0)$) から $[111]$ 方向及び $[100]$ 方向へのエネルギーと波数の関係(式(5))を図示しなさい. 図中に, Γ 点及び第一ブリルアンゾーン端の波数 $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ とエネルギーの値を記入する事.
- 2) 式(5)より, エネルギーバンドの幅を求めよ.
- 3) 式(5)を Γ 点 ($\mathbf{k} = (0, 0, 0)$) 付近で展開し, エネルギーバンドの底付近でエネルギーが等方的であることを示せ.
- 4) 3)で求めたエネルギーと波数の関係から, エネルギーバンドの底における有効質量を求めよ. 解答に必要な物理量を表す記号は各自で定義しなさい.
- 5) 単位胞 N 個で構成された単純立方格子の結晶を考えると, \mathbf{k} 空間で各電子は $(2\pi)^3/V$ (V は巨視的な結晶の体積)の体積を占める. この体積と, 第一ブリルアンゾーンの体積を比較することにより, 一つのエネルギーバンドに収容できる電子の数を求めよ(スピンを考慮する事).
- 6) 図1の構造について, 式(5)に相当する式を求めよ.