

物性工学

問題 1. 図 1.1 に示す単位胞を持つ立方晶の格子（格子定数 a ）を考える。各格子点を 1 個の原子が占める場合について以下の問いに答えなさい。

- 1) この格子の名称を答えなさい。
- 2) この格子の最近接原子数を答えなさい。

図 1.1 の格子について、図 1.2 に示すように基本並進ベクトル $\mathbf{a}'_1, \mathbf{a}'_2, \mathbf{a}'_3$ をとると、この 3 つのベクトルで表される単位胞は原子が 1 つだけ入る基本単位胞となる。

- 3) $\mathbf{a}'_1, \mathbf{a}'_2, \mathbf{a}'_3$ を x, y, z 方向の単位ベクトル $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ を使って表しなさい。
- 4) 基本単位胞の体積を示しなさい。
- 5) 基本並進ベクトルを $\mathbf{a}'_1, \mathbf{a}'_2, \mathbf{a}'_3$ とした時の逆格子の基本ベクトル $\mathbf{g}'_1, \mathbf{g}'_2, \mathbf{g}'_3$ を、 $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ を使って表しなさい。

X 線回折データの解析では通常、図 1.2 に示す基本並進ベクトルは使用せず、対称性が理解しやすい図 1.1 の $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ で表した慣用単位胞を用いる。この場合の逆格子の基本ベクトルを改めて $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3$ と定義する。この基本ベクトルを使った逆格子ベクトル $\mathbf{G}_{hkl} = h\mathbf{g}_1 + k\mathbf{g}_2 + l\mathbf{g}_3$

(h, k, l : 整数) は、ミラー指数 (hkl) で指定される面と垂直に交わる。(hkl) 面に対して X 線を入射すると、ブラッグ条件を満たす波数ベクトルの方向に回折が生じるが、単位胞内の異なる位置に存在する原子との干渉効果により回折ピークが発生しない場合がある。その効果は以下の構造因子 S_{hkl} で示される。

$$S_{hkl} = \sum_{j=1}^N f_j \exp(-i\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{r}_j)$$

ここで、 N は単位胞に含まれる原子の数、 f_j は原子散乱因子、 $\mathbf{r}_j$ は単位胞内の図 1.1 の原点を基準とした原子の位置ベクトルである。いま、単位胞内の原子は全て同じ原子として $f = f_j$ とする。

- 6) (hkl) 面の面間隔を、 h, k, l を使って表しなさい。
- 7) $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3$ を $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ で表しなさい。
- 8) 慣用単位胞には 2 つの原子が含まれる。その原子の $\mathbf{r}_j$ ($j = 1, 2$) を $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ を使って表しなさい。
- 9) この格子の構造因子 S_{hkl} を、 f, h, k, l を使って表しなさい。
- 10) この格子で観測される X 線回折ピークのミラー指数を回折角が小さい方から 3 つ示しなさい。ただし、(100), (010), (001) などと同じ回折角なので同一とみなす。

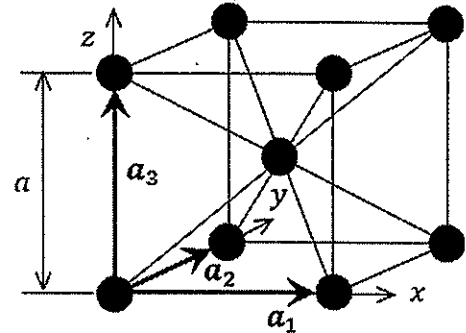


図 1.1 立方晶の格子

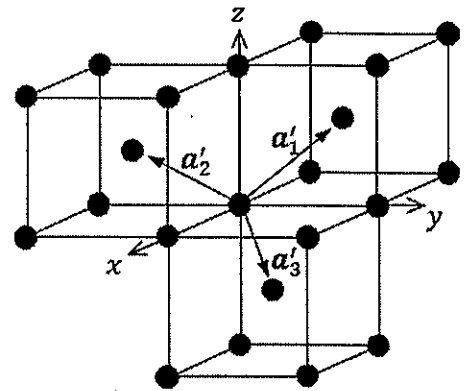


図 1.2 基本並進ベクトル

問題2. 次の文章中の(a)~(l)に当てはまる数式, 記号などを対応する回答欄に書きなさい.

周期 a で x 軸上に原子が均等配列した長さ L の一次元結晶について, ほとんど自由な電子近似のモデルを用いてエネルギーバンド構造を考える($L \gg a$). 一次元のシュレディンガー方程式は, プランク定数 $\hbar$ ($\hbar = h/2\pi$), 電子の質量 m , 電子のエネルギー E および, 結晶のポテンシャル $V(x)$ を使って以下のように書ける.

$$\boxed{\text{(a)}} \psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

$V(x) = 0$ すなわち電子が摂動を受けないときは波動関数 $\psi(x) = e^{ikx} / \sqrt{L}$ および, エネルギー $E^0(k) = \boxed{\text{(b)}}$ が得られる. ここで k は電子の波数である. 次に, $V(x)$ が摂動となる場合を考える. $V(x)$ は結晶と同じ周期性を持っているため, 結晶の逆格子点 $G_n = n \boxed{\text{(c)}}$ ($n = \pm 1, \pm 2, \dots$)のフーリエ級数によって以下のようにフーリエ級数展開できる.

$$V(x) = \sum_{G_n} V_{G_n} e^{iG_n x} \quad (2)$$

一方, 波動関数もフーリエ級数展開し以下のように表すことができる.

$$\psi(x) = \sum_k C_k e^{ikx} \quad (3)$$

なお, $\psi(x)$ が周期的境界条件を満たしていることから, $k = n' \boxed{\text{(d)}}$ ($n' = \pm 1, \pm 2, \dots$)となる. これらを式(1)に代入し, 各フーリエ係数の成分が等しいとすると, C_k と C_{k-G_n} を関連付ける以下の方程式が得られる.

$$(E^0(k) - E)C_k + \sum_{G_n} V_{G_n} C_{k-G_n} = 0 \quad (4)$$

ここで, $V(x) \cdot \psi(x)$ の計算には以下の畳み込み和の式を用いた.

$$V(x) \cdot \psi(x) = \sum_k \left(\sum_{G_n} V_{G_n} C_{k-G_n} \right) e^{ikx}$$

自由電子のエネルギーが $V(x)$ に最も摂動を受けるのは, $k = \pm \pi / a$ のときである. このとき $G_0 = 0$, $G_1 = G$ に対応する C_{k-G_n} のみが値を持つとし, さらに $V_0 = 0$ とすると, 式(4)より以下の2式が得られる.

$$\boxed{\text{(e)}} C_k + \boxed{\text{(f)}} C_{k-G} = 0 \quad (5)$$

$$\boxed{\text{(g)}} C_{k-G} + \boxed{\text{(h)}} C_k = 0 \quad (6)$$

C_k と C_{k-G} が0ではない解を持つための条件から E を求め, さらに $V_G = V_{-G}$ とすると,

$$E^{\pm} = \frac{1}{2} \boxed{\text{(i)}} \pm \sqrt{\frac{1}{4} \boxed{\text{(j)}}^2 + \boxed{\text{(k)}}} \quad (7)$$

となる. これは, 第一ブリュアンゾーンの端において, 2つの状態の縮退が解け, 大きさ $\boxed{\text{(l)}}$ のエネルギーギャップが発生することを示している.