

物性工学

問題 1. 以下の問いについて、それぞれ指定された答案用紙に解答しなさい。

図 1 のような 2 原子一次元鎖の格子振動について考える。最近接原子間にもみ相互作用がありフックの法則が成り立つとする。隣接原子間のばね定数は、交互に $2f$ と f を繰り返している。また、隣接原子間の間隔を $\frac{a}{2}$ 、原子の質量を M とする。

- 1) n 番目の単位胞の 2 つの原子の平衡位置からのずれをそれぞれ $u_{n,1}$, $u_{n,2}$ とし、それぞれの原子の変位についての運動方程式を書きなさい。
- 2) この方程式の解として、

$$u_{n,1} = u_1(q)\exp(iqna - i\omega t)$$

$$u_{n,2} = u_2(q)\exp(iqna - i\omega t)$$
 を仮定する。ここで、 t は時間、 ω は角周波数、 q は波数、 $u_1(q)$, $u_2(q)$ は振幅である。これらの式を運動方程式に代入し、 $u_1(q)$, $u_2(q)$ に対する連立方程式を求めなさい。
- 3) $u_1(q)$, $u_2(q)$ がともに 0 でない解を持つための条件を示しなさい。
- 4) 3) で求めた式を ω^2 について解きなさい。
- 5) ω と q の関係を、第一ブリルアンゾーンで図示しなさい。図中にゾーン端における q の値、 $q = 0$ 及びゾーン端における ω の値を書きなさい。
- 6) 光学モードについて、 $q = 0$ における $u_1(q)$ と $u_2(q)$ の比を求めなさい。

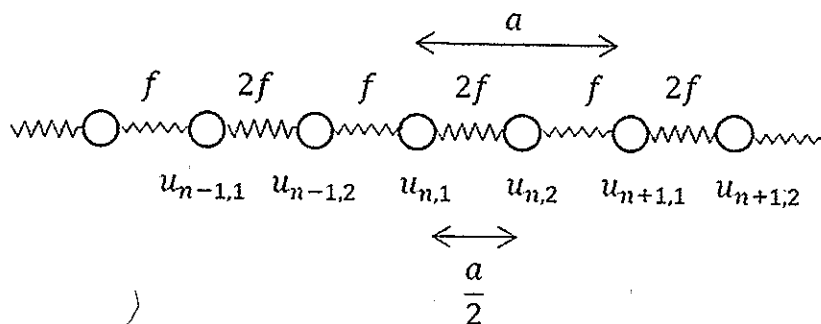


図 1 2 原子一次元鎖のモデル

問題 2. 以下の問いについて、それぞれ指定された答案用紙に解答しなさい。

「強く束縛された電子の近似」を用いて固体のエネルギーバンド構造を考える。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。

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

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、 $V(\mathbf{r})$ 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。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。

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

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

波動関数が球対称の場合、 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) は、

$$E = E_0 - \alpha - \gamma \sum_l e^{-ik \cdot \rho_l} \quad (4)$$

となる。格子定数 a の単純立方格子の場合、電子のエネルギーは

$$E = E_0 - \alpha - 2\gamma(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \quad (5)$$

となる。

図 2 に示す単位胞を持つ立方晶の結晶格子のエネルギーバンド構造を考える (格子定数 a)。各格子点を 1 個の原子が占めるものとする。

- 1) この格子の名称を答えなさい。
- 2) 最近接原子数を求めなさい。
- 3) 最近接原子間距離を求めなさい。
- 4) 基本ベクトル $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ が互いになす角度を求めなさい。
- 5) 基本単位胞の体積を求めなさい。
- 6) この格子について、単純立方格子の場合の式 (5) のような電子のエネルギーを表す式を書きなさい。
- 7) 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しなさい。
- 8) エネルギーバンドの幅を求めなさい。

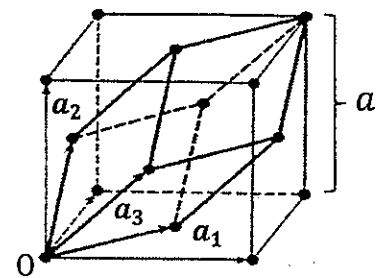


図 2 立方晶の格子