

物性工学

問題 1 次の文章中の(i)～(viii)に当てはまる言葉、数式、記号等に対応する解答欄に書け。また、1・1)～1・3)に解答せよ。

多くの III-V 族化合物半導体は、図 1 の(i)の結晶構造をもつ。この構造は、入れ子になった二つの(ii)格子に異なる種類の原子を配したものである。一つの(ii)格子は、もう一つの(ii)格子に対して、図 1 の立方体の対角線に沿って、対角線の長さの(iii)だけずれた位置に存在する。図 1 において、二つの(ii)格子に同じ元素を配置すると、(iv)構造となる。(iv)構造の各原子は(v)の頂点に位置する(vi)個の最近接原子と(vii)結合している。図 1 の単位格子内の原子の数は(viii)個である。

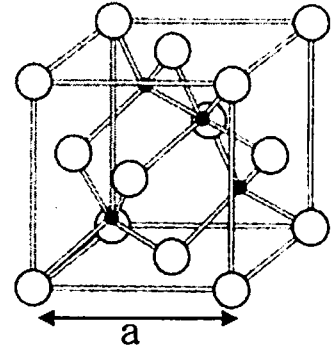


図 1 (i)の結晶構造

- 1・1) 図 1 において、二つの(ii)格子に同じ元素を配置する場合を考える。(110)面と(111)面における原子配列を書け。但し、答案用紙に示す(100)面の例に倣って、原子間の距離を記入すること。
- 1・2) (110)面の面間隔を求めよ。
- 1・3) 図 1 において、最近接原子間の距離を求めよ。

問題 2 次の文章中の(a)~(h)に当てはまる, 言葉, 数式, 記号等を対応する解答欄に書け。

固体のエネルギーバンド構造を考える。強く束縛された電子の近似を用いると, 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である。 $V(\mathbf{r})$ は結晶中の電子に対するポテンシャル, k は波数ベクトルである。式 (1) の積分において, 最近接原子間の重なりだけを考慮すると, 次の 2 項からの寄与のみを残し, 他は無視することができる。

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

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

ここで, ρ_0 は最近接原子を結ぶベクトルである。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,

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

となる。格子定数 a の単純立方格子を考えると, [b] 個の最近接原子は $\rho_0 = \text{[c]}$ 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,

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

となる。式 (5) より, 単純立方格子ではエネルギー幅 [e] γ のエネルギーバンドが形成されることがわかる。また, バンドのエネルギー幅は, このバンドに対応する近接原子の波動関数の重なりが大きいほど [f] なる。従って, より局在した状態に由来する低いエネルギーにあるバンドは幅が [g] 。式 (5) を Γ 点 ($k = 0$) 付近で展開すると, $E = \text{[h]}$ が得られる。つまり, エネルギーバンドの底付近では, エネルギーは等方的であり, 自由電子の場合と同様の取り扱いが可能である。