

物 性 工 学

I. 図 1 の結晶格子に対して、以下の問に答えよ。

- 1) この格子は何と呼ばれるか？
- 2) この格子を基本としてできている結晶の名前を 1 つあげよ。
- 3) 図のように、 x, y, z 方向の単位ベクトルを $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ とするとき、基本並進ベクトル $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ を $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ を用いて表せ。
- 4) 逆格子の基本ベクトルを $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ を用いて書け。
- 5) この格子に対応する第 1 Brillouin Zone は、図 2 のようになる。Zone 端上の X, L 各点の座標を書け。

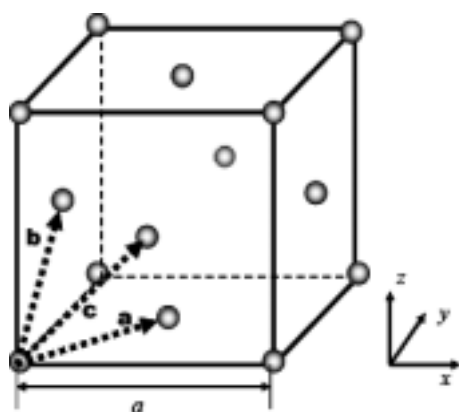


図 1 ある結晶格子

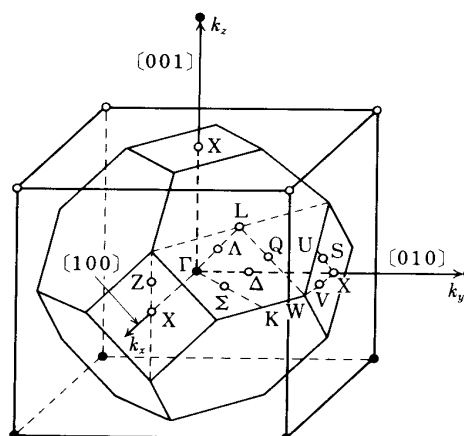


図 2 図 1 の格子に対する第 1 Brillouin Zone

II. 以下の文章は、結晶の電子構造にバンドギャップが生じる理由を、ほとんど自由な電子の近似に基づいて定性的に述べたものである。□～□にあてはまる、記号、式、言葉等を、また
 [図 A] 及び [図 B] にあてはまる図をそれぞれの解答欄に書け。

まず、 x 方向に進行する自由電子の波動関数を波数 k を用いて書くと $\varphi_k(x) = \square$ となり、対応するエネルギーの固有値は $E(k) = \square$ となる。このエネルギーの固有値を k の関数として図示すると [図 A] のようになる。次に x 軸上の $x_n = an$ ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) の位置にプラスイオンが配列している一次元格子を考える。このとき逆格子点は、 $g_m = \square m$ ($m = (0, \pm 1, \pm 2, \dots)$) で与えられ、第 1 Brillouin Zone は $\square \leq k_x \leq \square$ の領域である。波数 k の電子波が格子中を進行すると、格子の \square を持つポテンシャルの作用により、種々の波数を持つ回折波が生じる。一般に回折波の波数は、 $k' = k + \square$ で与えられる。ほとんど自由な電子の近似では、電子の波動関数

がこれらの回折波の重ね合わせで与えられると仮定し、バンド構造を導く。

特別な場合として、波数 k の波 $\varphi_k(x)$ と、 g_{-1} によって回折された k' を持つ波 $\varphi_{k'}(x)$ のみを考え、それらの重ね合わせ、 $\varphi^+(x) = \varphi_k(x) + \varphi_{k'}(x)$ 及び $\varphi^-(x) = \varphi_k(x) - \varphi_{k'}(x)$ を考える。 $k = (\pi/a)$ とし、それぞれの波動関数に対応する電子の存在確立を P^+ 、 P^- とすると、 P^+ は に比例し、 P^- は に比例することが導かれる。 の電子状態ではプラスイオンの近傍に電子が分布し静電エネルギーを得ることにより、自由電子の場合よりエネルギーが くなる。 の電子状態では、プラスイオンの間に電子が分布し、 の電子状態よりエネルギーが くなる。これらの事は、第 1 Brillouin Zone の でエネルギーギャップが生じることを物語っている。以上を踏まえ、一次元格子中の電子のバンド構造を模式的に図示すると 図 B のようになる。