物性工学

問題 I. 次の文章中の [1]〜[12] に当てはまる，言葉，数式，記号等を対応する解答欄に書け.

図 1 は，各種電子素子に最も多く使われている [1] 結晶の構造を示している．もし，この構造が，[2] 原子で構成されていると，[3] 結晶であるので，この結晶構造は [3] 構造と呼ばれる．[3] 構造は，２つの [4] 格子の入れ子構造になっている．一方の [4] 格子は他方の [4] 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 [5] だけずらした位置に存在する．[3] 構造中の 1 個の原子に着目すると，その最近接には [6] 個の原子が存在する．それらを線で結ぶと [7] 体になる．このような原子の配位の仕方は，[7] 体配位と呼ばれる．[7] 体配位は，原子同士が [8] 結合する際に，それぞれの原子の [9] 軌道と [10] 軌道が [11] 混成軌道を形成し，隣り合う原子の [11] 混成軌道が [12] 状態を形成し，その状態を電子が占めるということで説明できる.

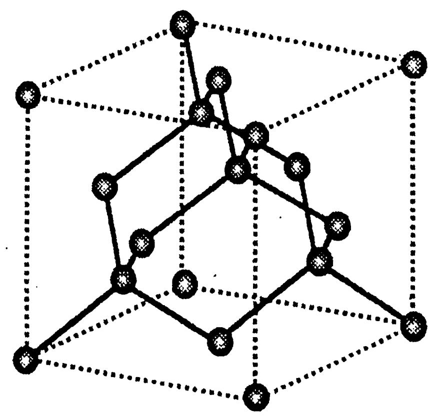

図 1: [1] 結晶の構造

問題 II. 次の文章中の [i]〜[x] に当てはまる，言葉，数式，記号等を対応する解答欄に書け.

図 2 (a) のような，周期 a で原子が配列した一次元結晶を考え，ほとんど自由な電子の近似に基づいて，電子のエネルギーバンド及びエネルギーギャップについて考察する．ほとんど自由な電子の近似では，無摂動系を自由電子とし，結晶のポテンシャルを摂動として取り扱う．自由電子の波動関数は，$\psi_k^0(x) = e^{ikx}$ と書ける．このとき，無摂動系のエネルギーは，電子の質量を m，プランク定数を $\hbar$ とすると，$E^0(k) =$[i] と書ける．これを図示すると，図 2 (b) の破線となる．結晶のポテンシャル $V(x)$ は結晶の周期を持つので，逆格子 $g_m = m$[ii]，$(m = 0, \pm1, \pm2, \cdots)$ で Fourier 級数に展開でき，

$$V(x) = \sum_{g_m} V_{g_m} e^{ig_m x},$$

と書ける.

ほとんど自由な電子の近似で Brillouin Zone の端での電子状態を議論する際には，通常，電子の波動関数を，α_{k-g_m} を係数として，

$$\psi_k(x) = \sum_{g_m} \alpha_{k-g_m} e^{i(k-g_m)x},$$

のように表す．この波動関数は，結晶格子によって[iii]された電子波の重ね合わせの形になっている．また，この波動関数は，[iv]の定理を満たし，n を整数としたとき，$\psi_k(x+na) =$[v]を満たす．上の波動関数を，結晶中の電子に対する Shrödinger 方程式に代入し，係数 α_{k-g_m} に関する式を求めると，

$$\{E^0(k-g_m) - E(k)\}\alpha_{k-g_m} + \sum_{g_{m'}} V_{g_{m'}-g_m}\alpha_{k-g_{m'}} = 0,$$

が得られる．但し，$E(k)$ は求めるべき摂動系のエネルギーである．

問題を具体的に解くために，上の式で $g_m = 0$ 及び $g_m = g$ に対応する α_{k-g_m} のみが値を持つとすると（２波近似），

$$\{[\ \text{vi}\ ]-E(k)\}\alpha_k+[\ \text{vii}\ ]\alpha_{k-g} = 0,$$
$$V_{-g}\alpha_k + \{[\ \text{viii}\ ]-E(k)\}\alpha_{k-g} = 0,$$

が得られる．但し，導出の過程で $V_0 = 0$ としている．この連立方程式の，α_k 及び α_{k-g} が零でない解を持つための条件を考え，簡単な計算を実行すると，

$$E^{\pm}(k) = \tfrac{1}{2}\{E^0(k) + E^0(k-g)\} \pm \tfrac{1}{2}\left[\{E^0(k) - E^0(k-g)\}^2+[\ \text{ix}\ ]\right]^{\frac{1}{2}},$$

が導出できる．但し，この導出では，$V_{-g} = V_g^*$ であることを使う．簡単のため，$g = \frac{2\pi}{a}$ とし，第 1 Brillouin Zone の端である $k = \frac{\pi}{a}$, $k = -\frac{\pi}{a}$ でのエネルギーを求めると，

$$E^{\pm}(\tfrac{\pi}{a}) = E^{\pm}(-\tfrac{\pi}{a}) = \tfrac{\hbar^2}{2m}\left(\tfrac{\pi}{a}\right)^2 \pm [\ \text{x}\ ],$$

となる．したがって，第 1 Brillouin Zone の端でのエネルギーギャップは，$E_{gap} = 2$[x]で与えられ，エネルギーバンドは模式的に図 2（b）の実線のようになる．

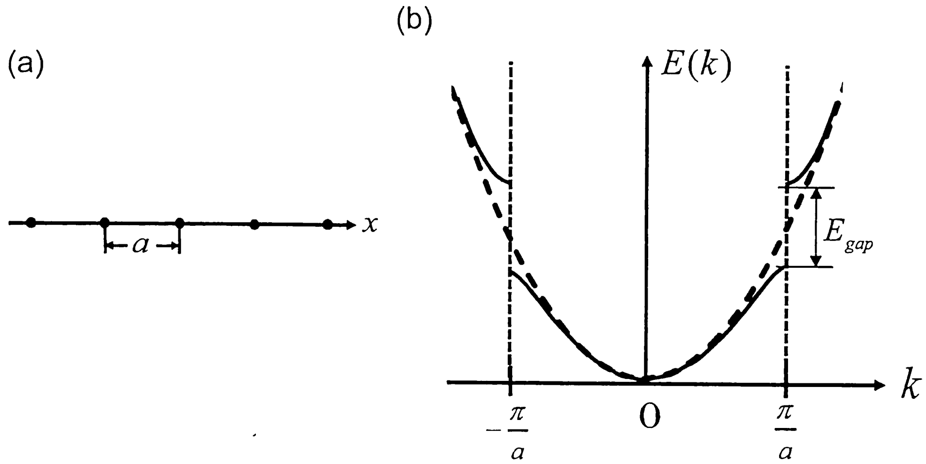

図 2:（a）一次元結晶，(b) エネルギーバンドの模式図