固体電子工学

平成２０年前期　中間試験問題

平成20年6月2日

注意

１．本・ノートを参照しても良い。

２．電卓を使用しても良い。

３．試験問題を解くにあたって必要であれば次を用いよ。

電子の質量	m	9.11×10^{-31}	kg
プランク定数	$\hbar$	1.05×10^{-34}	Js
ボルツマン定数	k_B	1.38×10^{-23}	JK^{-1}
素電荷	q	1.60×10^{-19}	C
真空の誘電率	ε_0	8.85×10^{-12}	C/Vm
アボガドロ数	N_A	6.022×10^{23}	mol^{-1}

1

不活性ガス元素 Ne, Ar, Kr, Xe は、低温において、van der Waals 結合により、fcc 結晶となる。2 原子間に働く力を次の Lennard-Jones 型ポテンシャルで表す。

$$u(r) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right]$$

ここに ε, σ は、原子に依存したパラメータで、次表の値をとる。

	Ne	Ar	Kr	Xe
ε (meV)	3.1	10.4	14.0	20.0
σ(Å)	2.74	3.40	3.65	3.98

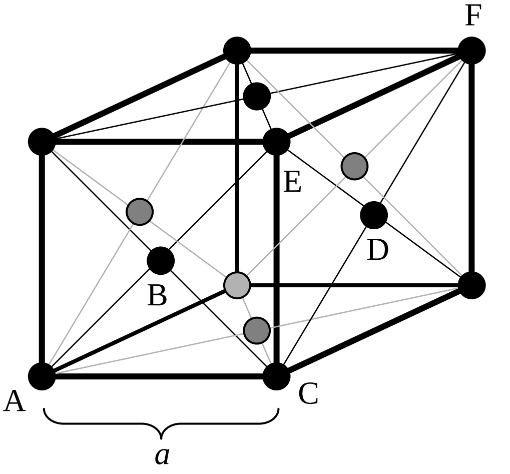


図1　fcc 構造

(1) 図1の最近接原子間の距離A-Bを d としたとき、A-C 間の距離、A-D 間の距離、A-E 間の距離、A-F 間の距離を d で表わせ。

(2) A-B と同じ距離にある原子はAの周りに何個あるか。同様にA-C, A-D, A-E, A-F と同じ距離にある原子は A の周りに何個あるか。

N 個の原子からなる結晶の凝集エネルギーは次で与えられる。

$$U = \frac{N}{2}\sum_{j\neq i} u\left(r_{ij}\right)$$

ここで j は i 番目の原子（例えば図1のA）の周りにあるすべての原子（B, C, D, E, F 等）についてとる。原子 i , j 間の距離 r_{ij} を最近接原子間距離 d を用いて

$$r_{ij} = p_{ij} d$$

と表すと

$$U = 2\varepsilon N\left[A_{12}\left(\frac{\sigma}{d}\right)^{12} - A_{6}\left(\frac{\sigma}{d}\right)^{6}\right]$$

ここに

$$A_n = \sum_{j\neq i}\left(\frac{1}{p_{ij}}\right)^{n}$$

(3) 凝集エネルギーが最小となる条件から、最近接原子間距離 d および凝集エネルギーU を A_6, A_{12}, ε, σ で表わせ。

(4) A-B, A-C, A-D, A-E, A-F の距離にある原子までを考えて、(1)(2)の結果を用いて A_6 と A_{12} を計算せよ。

(5) Ne, Ar, Kr, Xe について、図1の格子定数 a および1原子あたりの凝集エネルギー U/N を計算せよ。単位として格子定数は nm、凝集エネルギーは eV/atom を用い有効数字2桁で答えよ。

2

図2は六方最密構造 hcp を示したもので、原点を O とする。
格子ベクトルは (x, y, z) 座標で

$$\vec{a} = (a, 0, 0) \qquad \vec{b} = \left(-\frac{a}{2}, \frac{\sqrt{3}a}{2}, 0\right) \qquad \vec{c} = \left(0, 0, \frac{2\sqrt{6}a}{3}\right)$$

である。

(1) 点 A, B, C が乗っている水色で示した格子面のミラー指数を求めよ。

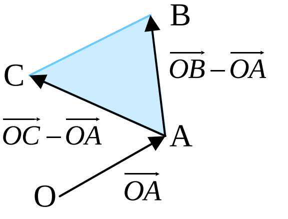
(2) この格子面の面間隔を求めよ。

(3) この面と原点 O との間には何枚の平行な格子面が存在するか。

(4) この格子面に平行で原点に最も近い格子面上にあり、かつ1つの直線上に並んでいない格子点を3つあげよ。

ヒント: A, B, C が乗っている面上の点Pは、t, u をパラメータとして、次のように表される。

$$\overrightarrow{OP} = \overrightarrow{OA} + t\left(\overrightarrow{OB} - \overrightarrow{OA}\right) + u\left(\overrightarrow{OC} - \overrightarrow{OA}\right)$$



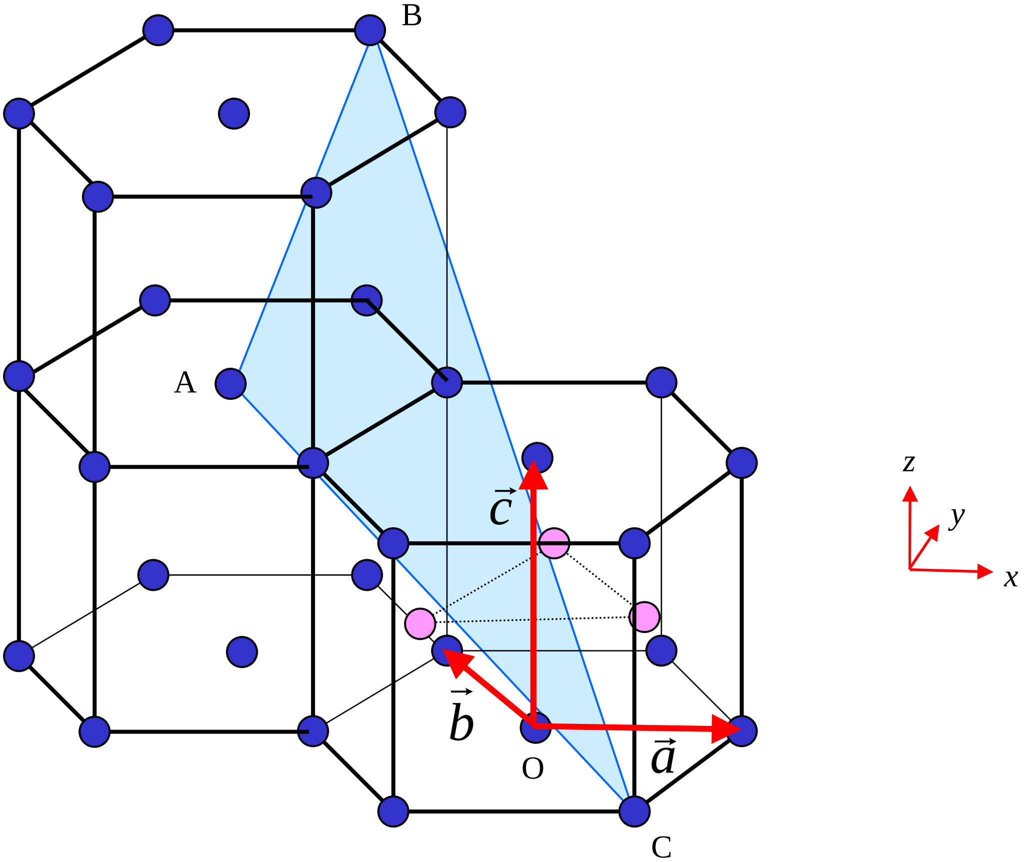


図2

3

図3は面心立方格子 fcc 、図4は体心立方格子 bcc を示したものである。手前の原子（ y 座標が小さい）ほど明るく塗られている。また、図中の点線は基本単位胞を示す。

(1)　fcc, bcc の基本単位胞の格子ベクトル　$\vec{a},\vec{b},\vec{c}$ （青点線）を x , y , z 座標で表わせ。
(2)　(1) で求めた基本単位胞の格子ベクトルに対し、その逆格子ベクトルを求めよ。

この結果から、fcc の逆格子は bcc となることがわかる。図5はbcc 格子のウィグナー・ザイツ胞で、これはfcc 格子の第1ブリルアンゾーン（図6）でもある。

(3)　図6において Γ は逆格子空間の原点を表わし、X は x , y , z 軸上にある。図中の L 点の座標を求めよ。ただし、実空間でのfcc 格子の格子定数を a とする（図3）。

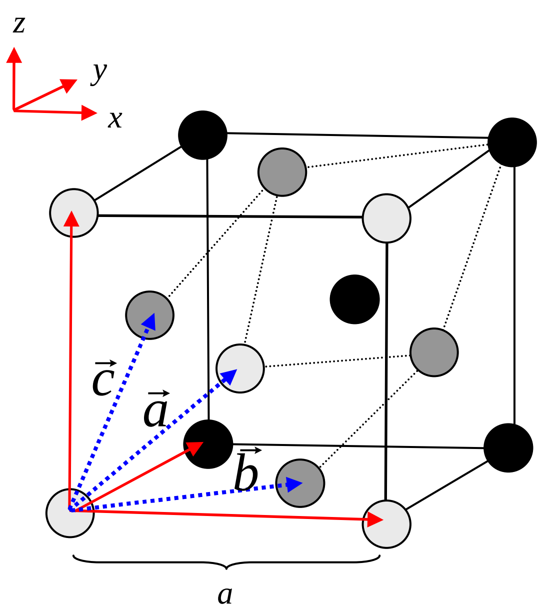


図3　fcc 格子

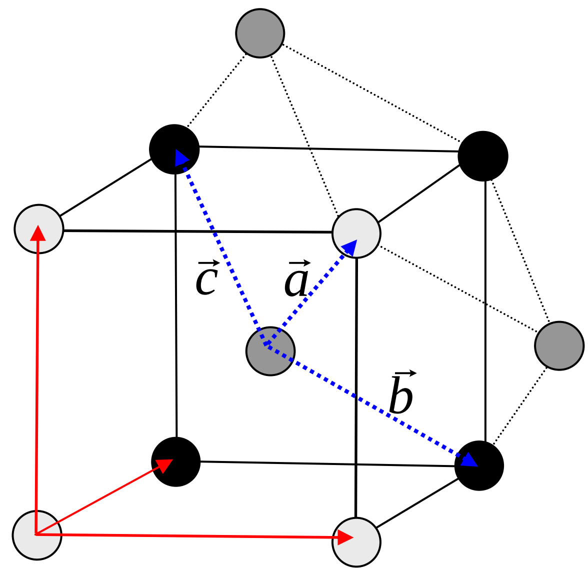


図4　bcc 格子

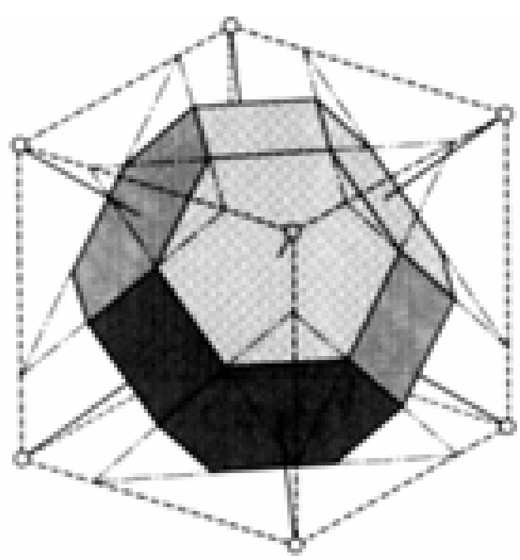


図5　bcc 格子のウィグナー・ザイツ胞

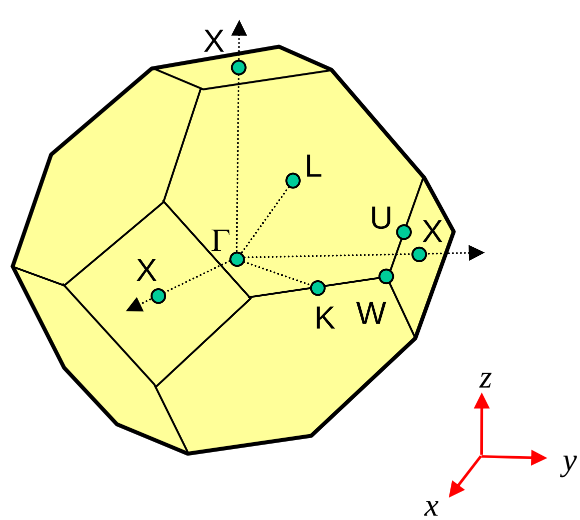


図6　fcc格子の第1ブリルアン・ゾーン