第2回の演習問題

1．シリコン Si は原子番号14の原子である。シリコンの原子軌道を記せ。

2．近似的波動関数 ψ を用いて見積もった基底状態エネルギー

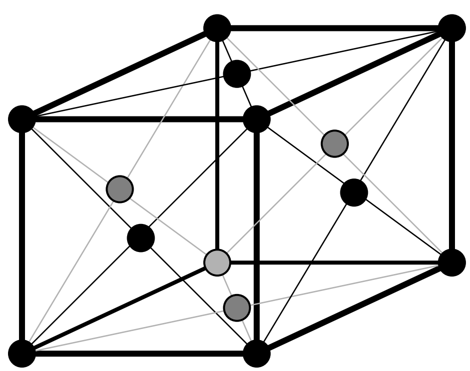
$$E = \frac{\int \psi^* H \psi d\vec{r}}{\int \psi^* \psi d\vec{r}}$$

と厳密な基底状態エネルギー E_0 を比べるとき、常に $E \geqq E_0$ となることを証明せよ.

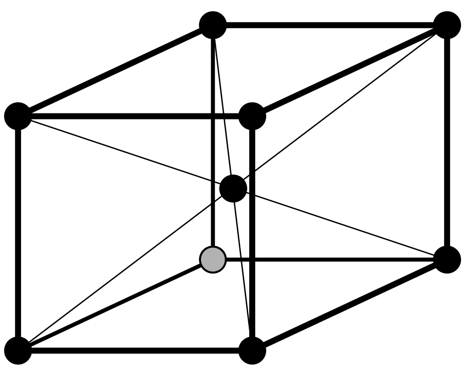
3．酸素分子の電子配列について論じよ. 化学的二重結合のときに、結合強度が最大になるのはなぜか？酸素分子が常磁性的に振る舞う理由は？また、酸素分子イオンO_2^+が安定なイオンである理由についても述べよ。

4．右の図 は面心立方格子 fcc と体心立方格子 bcc 構造を示したものである。fcc 構造を剛体球モデルによって考えたとき、原子の間のすきまは何%になるか。bcc 結晶ではどうか。

剛体球モデル：原子を半径 r の球として取り扱う。このとき半径 r はとりうる最大の半径とする。



fcc 構造



bcc 構造

第3回の演習問題

1. a) 等間隔 a で正負のイオンを直線上に並べたイオン鎖のMardelung定数 A の値を求めよ.
   b) 次の方法で、NaCl型結晶格子のMardelung定数 (A=1.7476) の値を近似的に計算せよ. 中心イオンを取り囲む一辺 2ma（a は最隣接イオン間距離）の立方体を考え、隅のイオンはこの立方体に 1/8 だけ属しているとしてその電荷を 1/8 とし、陵の上のイオンは 1/4、面上のイオンは 1/2 とする. このとき立方体内の電荷の総量は0となる. この立方体に対しMardelung定数を求めよ.

2. NaCl 型結晶の格子エネルギーの表式

$$U\left(r\right)=N\left(-\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 r}A+\frac{B}{r^n}\sum_{i\neq j}\frac{1}{p_{ij}^n}\right)$$

   を用いて、この格子の等温体積弾性率

$$\kappa=V\left(\partial p/\partial V\right)_T$$

   およびイオン対あたりの格子エネルギーを決定せよ. また、n=9 という値に対して U(r) が平衡間隔 r = a で最小をとる条件からBの値を決定せよ

3. よく知られているように、食塩(NaCl)は容易に水に溶け、溶液中で Na と Cl は正または負のイオンとして存在する. 水は大きな誘電率をもち、クーロンポテンシャルをよく遮蔽する. 水中で NaCl が結晶として存在しうるとすれば、その結合エネルギーは、自由イオンの平均熱エネルギーよりも小さくなることを示せ. また、このような仮想的な「水中の NaCl 結晶」の平衡イオン間隔を求め、これが水分子の van der Waals 半径よりも大きいことを示せ. 同時に、NaCl の溶解度の議論のためにここで用いた近似の妥当性について述べよ.

4. CsCl 構造で、陰イオンの半径を一定に保ちつつ、陽イオン半径を小さくするとき、結合エネルギーに生じる変化について述べ、ある限度以下にイオン半径が小さくなると、NaCl構造の方が安定になることを示せ. 陽イオン半径をさらに小さくすると、ZnS 構造（ Mardelung 定数 A=1.638)の結合エネルギーが最大となることを、例をあげて説明せよ.

5. 次のことに基づいて、氷の零点エントロピーを近似的に計算せよ. 氷の結晶構造では、酸素原子が六方晶構造を形成し、最近接酸素原子同士は水素結合で結ばれている. 酸素原子1つあたりに2個ある水素原子を、4つの最近接酸素原子へのびた4本のボンドに分配する方法がいくつあるかによって、零点エントロピーが決定されることに注意せよ.

第4回の演習問題

1．格子ベクトルを $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ とするとき、単位胞の体積は

$$\vec{a}\cdot\left(\vec{b}\times\vec{c}\right)$$

で与えられることを示せ。

2．図１は面心立方格子(fcc)、図２は体心立方格子(bcc)の慣用単位胞（実線）と基本単位胞（点線）を示したものである。

(1) 基本単位胞の格子ベクトルを慣用単位胞の格子ベクトル $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ で表せ。
(2) 基本単位胞を囲む面のミラー指数を慣用単位胞の格子ベクトルをもとに表せ。
(3) 慣用単位胞を囲む面のミラー指数を基本単位胞の格子ベクトルをもとに表せ。
(4) 基本単位胞の体積を慣用単位胞の体積と比較せよ。
(5) fcc, bcc 格子のウィグナー・ザイツ胞の多面体を構成する面の形を調べ、各稜の長さを計算せよ。

3．図３は六方晶を示したものである。

(1) ミラー指数 $(h\ k\ j\ l)$ をもつ格子面の面間隔を求めよ。
(2) 最密六方構造(hcp)における格子定数 a と c の関係を求めよ。

4．格子定数 a の立方晶の x, y, z 軸をそれぞれ $20a, 25a, 15a$ および $16a, 20a, 12a$ で切る平行な2つの格子面を考える。これらの格子面のミラー指数を記せ。この２つの面の間に何枚の平行な格子面が介在するか。

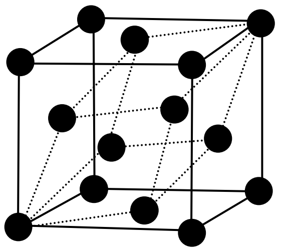


図1

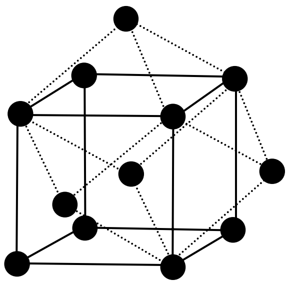


図2

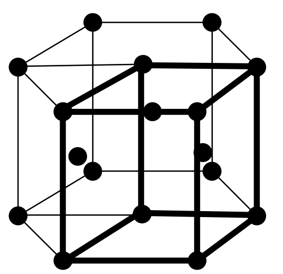


図3

第5回の演習問題

１. 2, 3, 4 及び 6 回軸に対する2次元行列表現を与えよ。また、どの表現が可約であるかについても述べよ。

２. （１）結晶に外部から応力を加えると誘導分極が生じる効果をピエゾ(piezo) 効果と言う。また、反転中心を持つことを中心対称性を持つという。432 を除いた中心対称性を持たない点群に属する結晶はすべてピエゾ効果を示す。ピエゾ効果を示す結晶の対称性（３２点群の要素）を列記せよ。
（２）ある温度以下で自発分極を持つ結晶を焦電気(pyroelectric)結晶 と呼ぶ。中心対称性を持たない点群において、ステレオ投影図で北半球（あるいは南半球）のみにしか一般点が存在しない点群を極性を持つ点群と呼ぶ。極性を持つ点群に属する結晶は焦電気結晶であることから、焦電気結晶の可能な対称性（３２点群の要素）を列記せよ。

３. 反転中心も鏡映面も存在せず、右手系と左手系とが混在していない点群をエンアンチモーフィック (enantimorphic) な点群と言う。エンアンチモーフィック な点群を列記せよ。

第6回の演習問題

１. (a) 面心立方格子の基本ベクトルを次のようにとったとき、逆格子の基本ベクトルを求めよ。

$$\vec{a_1} = \left(\frac{a}{2}, \quad \frac{a}{2}, \quad 0 \right) \qquad \vec{a_2} = \left(0, \quad \frac{a}{2}, \quad \frac{a}{2} \right) \qquad \vec{a_3} = \left(\frac{a}{2}, \quad 0, \quad \frac{a}{2} \right)$$

(b) 面心立方格子の構造因子 S_{hkl} を求めよ。S_{hkl} が0となる場合はどのようなときか。
また、慣用単位胞の逆格子点との対応を調べよ。

２. 六方最密構造(hcp) の構造因子 S_{hkl} を求めよ。

３. ダイヤモンド構造の構造因子 S_{hkl} を求めよ。

４. ブラッグ反射の起こる条件 $\vec{G} = \vec{k} - \vec{k_0}$ を満足するすべてのベクトル対 $\vec{k}, \vec{k_0}$ の始点はブリルアン・ゾーンの境界面上にあることを示せ。

第7回の演習問題

１. 電子の運動が2次元、１次元に限定されたときの状態密度を求めよ。

２. (a) 電子密度が一定である自由電子気体に対する化学ポテンシャルの温度依存性を近似的に計算せよ。なお、$x \geqq 1.5$ で次の近似式が成り立つ。

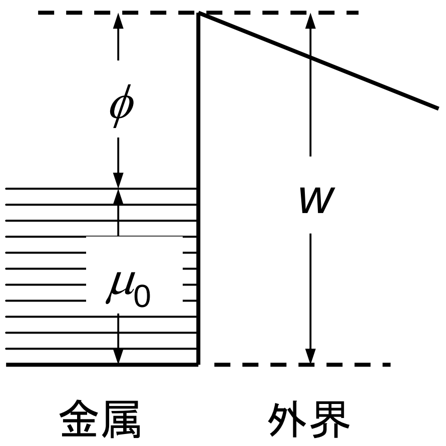
$$\int_0^\infty \frac{\sqrt{y}}{1+e^{y-x}}dy \cong \frac{2}{3}x^{3/2}\left(1+\frac{\pi^2}{8x^2}\right)$$

(b) 同様に電子の運動が2次元、１次元に限定されたときの化学ポテンシャルの温度依存性を近似的に計算せよ。

３. 金属中の自由電子は外界に対して $-w$ の位置エネルギーをもつとし、0°K におけるフェルミ準位 μ_0 は外界より ϕ だけ低いとする。有限な温度では、フェルミ分布にしたがい高いエネルギーをもつ電子は表面から逃れ出ることができる。この金属を陰極とし適当に電位差を与え、それらの電子をすべて陽極に引き付ける場合、この熱電子流（単位面積あたり）が

$$I = AT^2 e^{-\phi/k_B T} \quad \text{(Richardsonの式)}$$

であたえられることを示せ。（ ϕ はふつう 1eV の程度で k_BT に比べて１桁から2桁大きい。）



第8回の演習問題

１.（大きな数）N 個の原子からなる1次元格子（原子間距離 a、ばね定数 f、原子の質量 m)に対する運動方程式を書き下し、変位 $s_n(t)$ を $s_n(t)=u(q)\exp\left[i(qna-\omega t)\right]$ とおいてこの方程式を解け。

a) 得られた分散式 $\omega(q)$ を2原子1次元格子に対する式と比較せよ。

b) フォノンの全運動量 $\sum_{n=1}^{N} m\frac{d}{d}s_n(t)$

がゼロになることを示せ。

c) 長波長 ($q << a^{-1}$) に対して、この1次元格子に対する運動方程式を、変位 $s_n(t) = s(x = na, t)$, $s_{n+1}(t)$, $s_{n\text{-}1}(t)$ を a でテーラー展開すると、弾性波に対する波動方程式になることを示せ。

d) 得られた波の速度を長い棒を伝わる音波の速度と比較し、実効弾性率を求めよ。（長い棒の音速は、弾性率を E、密度を ρ とすると $c=\sqrt{E/\rho}$ で表わされる。

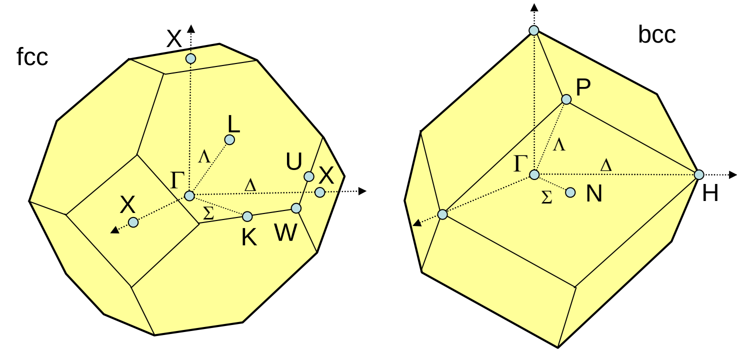
２. 問題１の1次元格子において、位置 $n = 0$ の原子の質量 M が他の原子の質量 m と異なる場合の固有振動数を、変位を $s_n(t)=s_0\exp\left[-\kappa(\omega)|n|-i\omega t\right]$ と表わすことにより計算せよ。どのような M の範囲に対して、局在振動が存在するか。

３. 各原子が最近接原子とばねで結合している fcc 結晶を考え、この [100] 方向に沿った縦および横モードフォノンに対する分散関係を計算せよ。

４. fcc 結晶の [100] 方向に伝わる縦および横音響モードの音速を計算せよ。結晶の弾性理論によると、密度を ρ として、音速は $c_l = (c_{11}/\rho)^{1/2}$, $c_t = (c_{44}/\rho)^{1/2}$ で表わされる。最近接原子間のばね定数を用いて、弾性定数 c_{11}, c_{44} を計算せよ。最大振動周波数が 8.85THz （ニッケルの値）となるばね定数を用い、音速の数値を計算せよ。実験値は縦波、横波に対してそれぞれ 5300m/s と 3800m/s である。

第9回の演習問題

1．fcc および bcc 結晶の第1ブリルアンゾーン（右図）において、原点 Γ より X, K, L または H, N, P までの距離を求めよ。それらの点までの距離を半径とする k 空間の球内に含まれる軌道数を求めよ。



2．bcc 結晶の空格子近似による自由電子のエネルギーを還元ゾーン形式で描け。単位胞あたり z 個の伝導電子があるときのフェルミ準位を書き込め。

3．クローニッヒ-ペニーのモデルと呼ばれる周期的な1次元井戸型ポテンシャルを考える。N を整数として区間 $N(a+b) \sim N(a+b)+a$ のポテンシャルは 0、$N(a+b)+a \sim (N+1)(a+b)$ の間のポテンシャルを U とし、波動方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+U(x)\psi(x)=\varepsilon\psi(x)$$

の解を求めたい。解の形をそれぞれの領域で $\psi = A\exp(iKx)+B\exp(-iKx)$ の形にとって、境界で ψ, $d\psi/dx$ が連続であるという条件を課する。このとき解が存在する条件として

$$\frac{Q^2-K^2}{2QK}\sinh Qb\cdot\sin Ka+\cosh Qb\cdot\cos Ka=\cos k(a+b)$$

となることを示せ。ただし、k はブロッホ関数の波数ベクトルで $Q^2=\frac{2m}{\hbar^2}(U-\varepsilon)$ である。 $P=\frac{Q^2ab}{2}$ を一定として、$b\to 0, U\to\infty$ とした場合、解の存在条件は

$$\frac{P}{Ka}\sin Ka+\cos Ka=\cos ka$$

となる。これにより許される K の値を求め、 $\varepsilon=\frac{\hbar^2K^2}{2m}$ によって許されるエネルギー ε の範囲と、$k=n\pi/a$ のところでエネルギーギャップが生じることを示せ。$P=3\pi/2$ の場合のエネルギー ε と波数 k の関係を図示せよ。

第10回の演習問題

１. Siにおける伝導帯の電子の等エネルギー面は楕円体をしており、楕円体の中心に波数の原点をとると

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_l}k_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m_t}\left(k_y^2 + k_z^2\right)$$

と表わすことができる。伝導帯の電子の状態密度を求め、これを自由電子の状態密度と比べ、状態密度に対する有効質量が $\left(m_l m_t^2\right)^{1/3}$ で与えられることを示せ。

２. ドナー濃度10^{17} cm^{-3} のN型Si半導体 における伝導電子とホールの密度を温度の関数としてプロットせよ。

３. アクセプタ濃度 10^{17} cm^{-3}のP型Si半導体とドナー濃度 10^{21} cm^{-3} のN型Si半導体による PN 接合がある。室温における真性キャリヤ密度を $1.45\text{x}10^{10}$cm^{-3} として以下に答えよ。

(1) P型半導体、N型半導体のフェルミ準位を真性フェルミ準位を基準にして求めよ

(2) このPN接合のビルトイン・ポテンシャルの値を求めよ

(3) 空乏層はキャパシタと見ることができる。単位面積当たりのキャパシタを求め、PN接合に加える電圧によりどのように変化するか図示せよ。

第１１回の演習問題

１.
(a) 電場 E = 100 V/cm, 格子定数 a = 3 Åとして、ブロッホ振動の周期を計算せよ。
(b) Cu の室温での電気伝導度は $5.88\times10^5\ \Omega\mathrm{cm}^{-1}$ である。$m^* = m_0$ (自由電子の質量）とし、電子濃度 $n = 8.45 \times 10^{22}\ \mathrm{cm}^{-3}$ を用いて緩和時間 τ を求めよ。
(c) 上の結果を比較してどのようなことがわかるか。

２. pn接合にかかる電圧が低いとき、空乏層領域では電子・ホールの濃度はほとんど０と見なすことができる。Shockley-Read-Hall 再結合において、この領域では電子・ホールの生成を表す。エネルギー・ギャップの中央付近にエネルギーをもつトラップが、電子・ホールの生成に最も寄与することを示せ。この電子・ホールの生成はpn接合の電流にどのような影響を及ぼすか。

３. 有効質量 m^* の電子において緩和時間 $\tau\rightarrow\infty$と考えた運動方程式

$$m^* \frac{d^2x}{dt^2} = -eE$$

において交流電場 $E = E_0 e^{i\omega t}$ を加えたとき、単位体積あたりの分極 P が $P = -nex$ と与えられることを考慮して、比誘電率が

$$\varepsilon = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \qquad \omega_p^2 = \frac{ne^2}{\varepsilon_0 m^*}$$

で与えられることを示せ。(ω_p :プラズマ振動数） $n = 5\times10^{22}\ \mathrm{cm}^{-3}$ として、ω_p に対する光の波長はどのくらいか。更に緩和時間を考慮したときどのようになるか。

第12回の演習問題

１．半無限空間を占める金属を考え、表面上の２点に大きさが無視できる小さなコンタクトを設ける。磁場 B を表面に平行に、かつ２つのコンタクトを結ぶ線に垂直にかける。一方のコンタクトは、金属へ電子を注入することに用いられ、第２のコンタクトは検出器として用いる。電子の運動が散乱を受けないと仮定して、その軌跡を描け。
どのような磁場 B の値に対して、検出器に達する信号が最大になるのか？
この信号強度を B の関数として計算せよ。

２．次の手順で、サイクロトロン共鳴実験の半古典的モデルを考えよ。ただし、固体中のほとんど自由な粒子（すなわち電子とホール）は有効質量 m^* と緩和時間 τ で記述されるものとする。

a) サイクロトロン振動数 ω_c を求めよ

b) 磁場 $(0, 0, B)$ と高周波電場 $E = (Ae^{i\omega t}, Ae^{i\omega t+i\pi/2}, 0)$ が同時に存在する場合に、この中を運動する電子の運動方程式を導け。ただし E に付随する高周波磁場の効果は無視しうるものとする。

c) x 方向の電流密度から、伝導度 $\sigma = j_x / E_x$ を求めよ。

d) 伝導度 σ の実部は電場の減衰率を表わす。$\omega\tau = 0.2, 1, 3$ の各場合に、伝導度 σ の実部を ω_c / ω の関数としてプロットし、結果を吟味せよ。

e) 電子の共鳴とホールの共鳴を区別するにはどうしたらよいか。

f) 2.4×10^{10} Hz の高周波を発生するクライオストロンがある。磁場 $B_z = 8.6 \times 10^{-2}$ T に対して、最大振幅の共鳴が観測された。この共鳴に関与しているキャリアの質量比 m^* / m_0 を求めよ（ m_0 は自由な電子の質量）。緩和時間 τ と移動度 μ のどの範囲で共鳴が観測されるだろうか。