

第7問

図1に示す格子定数 a の2次元正方格子につき、以下の問いに答えよ。

- (1) 基本格子ベクトルを $\mathbf{a}_1=(a, 0)$, $\mathbf{a}_2=(0, a)$ として逆格子の基本格子ベクトル $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ を求め、逆格子ベクトル \mathbf{G} の一般的な表式を求めよ。
- (2) 逆格子と第一ブリルアン帯を図示せよ。
- (3) 空格子近似とは、自由電子に結晶中の原子配列による周期的ポテンシャルを与えてそのポテンシャルの大きさを 0 とする近似であり、これを用いて2次元正方格子のバンド構造を求めたい。空格子近似においては、電子のエネルギーは $E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} - \mathbf{G})^2$ で表される。ここで、 m は電子の質量、 \mathbf{k} は波数ベクトルである。空格子近似における2次元正方格子のバンド構造を求め、第一ブリルアン帯内の $[1,0]$ 方向について $E(\mathbf{k})$ のグラフを図示せよ。ただし、 $A = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$ として $E=5A$ までの範囲で示せばよい。
- (4) 格子による周期的なポテンシャルが存在する (0 でない) とき、(3)のバンド構造はどうか、簡潔に述べよ。また、 $E(\mathbf{k})$ の概略をグラフで示せ。
- (5) (3)と(4)のバンド構造の違いはなぜ生じるか、その物理的理由を説明せよ。

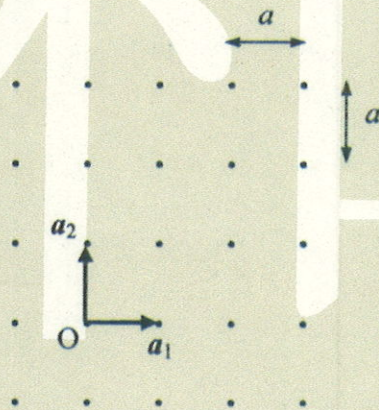


図1

Problem 7

Let us consider a two-dimensional square lattice with a lattice constant of a , as shown in Fig. 1. Answer the following questions.

- (1) The primitive lattice vectors are $\mathbf{a}_1=(a, 0)$ and $\mathbf{a}_2=(0, a)$. Obtain the primitive reciprocal lattice vectors \mathbf{b}_1 and \mathbf{b}_2 , and the general expression of the reciprocal lattice vector \mathbf{G} .
- (2) Depict the reciprocal lattice and the first Brillouin zone.
- (3) In the empty lattice approximation, we assume a free electron in a periodic potential due to the crystal lattice but the potential is infinitely close to zero. Here, using this approximation, we want to obtain the band structure of the lattice. In the empty lattice approximation, the electron energy is given by $E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} - \mathbf{G})^2$, where m is the electron mass and \mathbf{k} is the wave vector.

Using this approximation, obtain the band structure of the two-dimensional square lattice, and depict the graph of $E(\mathbf{k})$ along the $[1,0]$ direction. Plot the graph only in the first Brillouin zone and in the range of E up to $5A$, where $A = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$.

- (4) When a non-zero periodic potential due to the crystal lattice exists, briefly explain how the band structure of (3) is modified. Show the outline of the graph of $E(\mathbf{k})$.
- (5) What makes the difference in the band structure between (3) and (4)? Explain the physical reason.

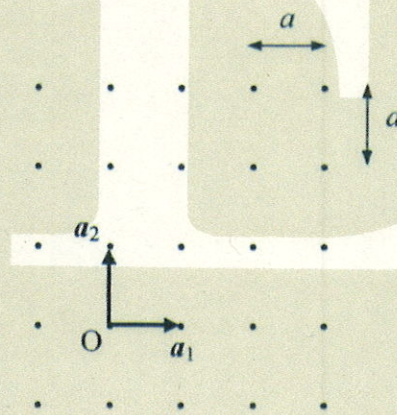


Fig. 1