

結晶化学 課題 (2020/4/3)

CIFフォルダーに入っている以下の結晶について、CIFファイルとVESTAを使って以下のことを確認し、PowerPointのプレゼンテーションファイルにして提出
期限：今日の17:00までにできたところまでで可

1. BaTiO_3 にはいろいろなCIFファイルがある。
それぞれの構造の特徴がわかる絵を書くとともに、格子定数の関係を述べよ。
立方晶 BaTiO_3 について、結合距離とイオン半径の関係を表にせよ。
2. LaCuOSe と BaFe_2As_2 の結晶構造について、特徴がわかる絵を書き、類似点、相違点を述べよ。
また、結合距離とイオン半径の関係を表にせよ。
3. SnS と SnO の結晶構造について、特徴がわかる絵を書き、類似点、相違点を述べよ。
また、結合距離とイオン半径の関係を表にせよ。

結晶化学 課題 (2020/4/6)

CIFフォルダーに入っている以下の結晶について、Bond valence sumを計算し、それぞれの結晶中のBVSを比較せよ。

PowerPointのプレゼンテーションファイルにして提出
期限：今日の17:00までにできたところまでで可

1. 立方晶 BaTiO_3 と六方晶 BaTiO_3
2. LaCuOSe 、 LaFeOP 、 BaFe_2As_2
3. $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$
4. Fe_3O_4

結晶学 課題 (2020/4/7)

以下の空間群について、空間群名からわかる対称要素を述べ、点群対称要素についてステレオ投影図形を描け。ステレオ投影図形から読み取れる対称要素は何か。

PowerPointのプレゼンテーションファイルにして提出
期限：今日の17:00までにできたところまでで可

1. $P6/mmm$
2. $P4/mmm$

結晶学 課題 (2020/4/8)

ZnOの σ_V 面, $\sigma_{V'}$ 面, (0001)面について、以下について述べよ。

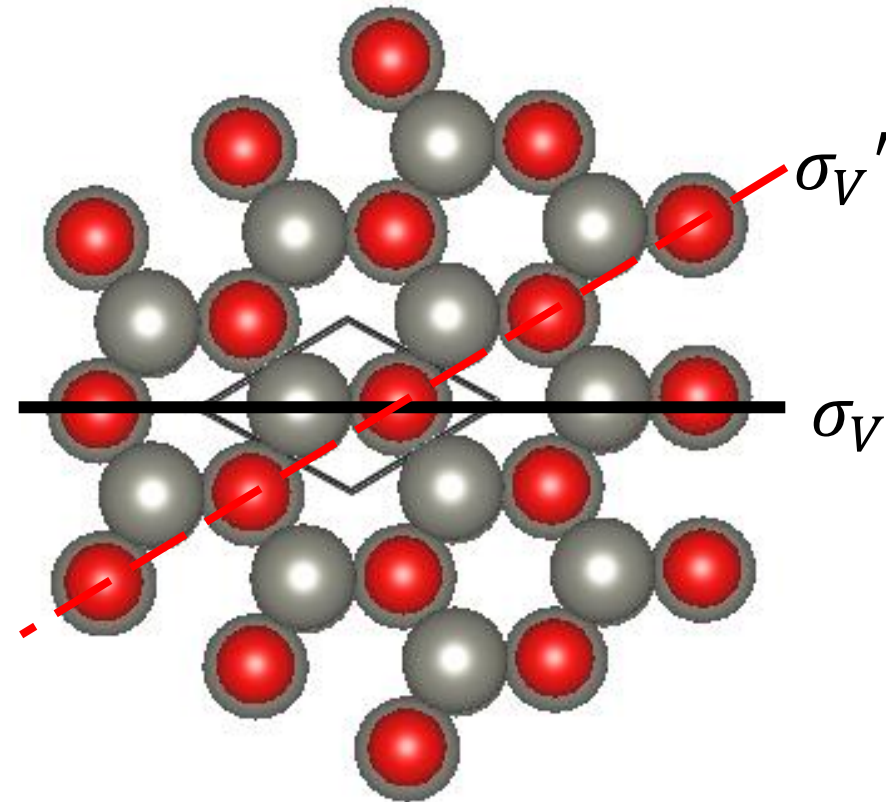
1. 面指数を求めよ
2. そのミラー指数をもつ方位ベクトルを描け
3. 原子配列が3次的にわかる絵をVESTAで描き、特徴を述べよ

PowerPointのプレゼンテーションファイルにして提出

期限: 今日の17:00までに
できたところまでで可

ZnOの a - b 面内の原子配列

赤い酸素原子の配列を見ると、 C_6 対称がはっきりわかる



Pythonプログラミング 課題 (2020/4/9)

<http://conf.msl.titech.ac.jp/Lecture/>

からみつかるpythonプログラムを3つ選び、以下の問題に答えよ。

ただし、解答に使うpythonプログラムは、各Webページの上から5つ目以降から選べ。

1. 選んだプログラムは何をするものか、説明せよ
2. プログラムを実行し、コンソールウインドウ画面と(もしあれば)GUIウインドウ画面のスクリーンショットを撮れ
3. 実行した結果、何がわかったか

PowerPointのプレゼンテーションファイルにして提出

期限: 今日の17:00までに
できたところまでで可

熱力学・相図 課題 (2020/4/13)

相状態図データベースなどを利用し、
研究テーマに関係のありそうな二成分系状態図 (組成－温度) を3つ検索し、
以下について説明せよ

1. 安定な相
2. 混合相
3. 高温から室温まで平衡状態を保って温度を下げた場合、どのような微構造になるか

PowerPointのプレゼンテーションファイルにして提出

期限: 今日の17:00までに
できたところまでで可

Pythonプログラミング 課題 (2020/4/14)

regular_solution.py を読み、ソースコードのうち、理解できない部分を書け。

「全然わからない」の解答も可とするが、努力はしてほしい

参考:

<http://conf.msl.titech.ac.jp/Lecture/>

- Pythonの基本変数型
- python豆知識
- matplotlib ノート

インターネットで“python キーワード”で検索すると、だいたいわかる。

例: python np.empty で検索

PowerPointのプレゼンテーションファイルにして提出

期限: 今日の17:00までに
できたところまでで可

最小二乗法 課題 (2020/4/17)

$f(x) = \exp(x) + x = 0$ の解を二分法を使って解け。

Excelなどを使ってもいいし、pythonなどのプログラムを作ってもよい。

余力があれば、Newton-Raphson法でも解いてみるといい。

参考:

<http://conf.msl.titech.ac.jp/Lecture/>

- 計算材料学特論 資料

PowerPointのプレゼンテーションファイルにして提出

期限: 今日の17:00までに
できたところまでで可

最小二乗法 課題 (2020/4/20)

MRxx.csv (MRxx.xlsx) のデータ (磁場 B - 抵抗率 ρ) について、

$$\rho(B) = \rho_0 + aB^2$$

を仮定し、定数 ρ_0 と a を求めよ。マニュアルフィッティングしてもよいし、pythonプログラム lsq1.py や csvplot.csv などを参考に線形最小二乗法などで求めてもよい。

参考:

<http://conf.msl.titech.ac.jp/Lecture/>

- 計算材料学特論 資料

PowerPoint 等のプレゼンテーションファイルにして提出

期限: 今日の17:00までに
できたところまでで可

BMシフト 課題 (2020/4/21)

バースタイン・モスシフト (縮退半導体の E_F) ΔE_g をキャリア濃度 N_e の関数としてグラフに描け。有効質量は自由電子の質量とし、横軸 N_e は対数プロットせよ

$$\Delta E_g^{BM} = \frac{h^2}{m_{de}} \left(\frac{3N_e}{16\sqrt{2}\pi} \right)^{2/3}$$

PowerPoint 等のプレゼンテーションファイルにして提出

期限: 今日の17:00までに
できたところまでで可

有効質量 課題 (2020/4/22)

バンド構造 band.csv から、数値微分により $d^2E(k)/dk^2$ を求め、有効質量 m_e^* と k の関係をグラフに描け。

格子定数は $a = 4.0 \text{ \AA}$ とする。

異なる精度の数値微分をし、有効質量の精度の比較をするとbetter。

PowerPoint 等のプレゼンテーションファイルにして提出
期限: 今日の17:00までに
できたところまでで可

TFT電界効果移動度 課題 (2020/4/23)

1. 厚さ 100 nmの a-SiO₂ の単位面積当たり静電容量 C_{OX} を求めよ。
a-SiO₂ の 比誘電率は $\epsilon_r = 11.9$ とする。
2. TransferCurve.xlsxのデータから、飽和移動度を求めよ
電極幅 $W = 300 \mu\text{m}$, $L = 50 \mu\text{m}$ とする。
飽和移動度を求める際の V_g , V_d は各自で選ぶこと。
その値を選んだ理由も説明せよ。

PowerPoint 等のプレゼンテーションファイルにして提出
期限: 今日の17:00までに
できたところまでで可

TFT電界効果移動度 課題 (2020/4/24)

以下の4/23の課題について、解答が違っていた人は、理由も含めて解答せよ

1. 厚さ 100 nmの a-SiO₂ の単位面積当たり静電容量 C_{OX} を求めよ。
a-SiO₂ の 比誘電率は $\epsilon_r = 11.9$ とする。
2. TransferCurve.xlsxのデータから、飽和移動度を求めよ
電極幅 $W = 300 \mu\text{m}$, $L = 50 \mu\text{m}$ とする。
飽和移動度を求める際の V_g , V_d は各自で選ぶこと。
その値を選んだ理由も説明せよ。

PowerPoint 等のプレゼンテーションファイルにして提出
期限: 今日の17:00までに
できたところまでで可

解析力学 課題 (2020/4/27)

極座標 (r, φ, θ) におけるラグランジ方程式の具体的な式を導出せよ。
 r, φ, θ は互いに依存しないこととする。

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta$$

1. 極座標における運動エネルギーは次の式であらわされる。右辺の各項目について説明せよ。

$$T = \frac{1}{2} m \left[\left(\frac{dr}{dt} \right)^2 + (r \sin \theta)^2 \left(\frac{d\varphi}{dt} \right)^2 + r^2 \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 \right]$$

2. ポテンシャル $V(r, \varphi, \theta)$ におけるラグランジアン L を (r, φ, θ) を用いて表せ
3. 一般化運動量を導出せよ
4. ラグランジ方程式から一般化座標 (r, φ, θ) に対応する運動方程式を導け

PowerPoint 等のプレゼンテーションファイルにして提出

期限: 今日の17:00までに
できたところまで可

バンド理論 課題 (2020/4/28)

1. $N \times N$ 行列の固有方程式

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{1s} & h_{12} & 0 & \cdots & 0 & h_{12} \\ h_{12} & \varepsilon_{1s} & h_{12} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & h_{12} & \varepsilon_{1s} & h_{12} & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & h_{12} & \varepsilon_{1s} & h_{12} \\ h_{12} & 0 & 0 & \cdots & h_{12} & \varepsilon_{1s} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_{N-1} \\ c_N \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_{N-1} \\ c_N \end{pmatrix}$$

において、 $l=0, 1, 2, \dots, N-1$ の l に対して $c_i = \exp(ik_l x_i)$ ($k_l = \frac{2\pi}{Na} l$) ($x_i = ia$, a は格子定数, $i=0, 1, 2, \dots, N-1$) が固有ベクトルになっていることを確かめよ。また、その時の固有値 ε を求めよ。

2. Naのような1族元素金属の伝導帯は、自由電子モデルでは、一原子あたり一電子を供給しているため、バンドの半分までを電子が占めて金属的な電子構造を取っている。

Mgのような2族元素金属では、一原子あたり二電子を供給しているため、バンドは完全に占有され、絶縁体になると予想されてしまうが、実際には金属である。なぜか。

PowerPoint 等のファイルで提出

期限: 今日の17:00までにできたところまで可

バンド理論 課題 (2020/4/30)

1. 緩やかに変化するポテンシャル $V(x)$ 中の電子の状態を、波数 k を持つ平面波の重ね合わせとしてあらわす。 x を小さい幅 h の区間に区切り、位置 $x_i \sim x_{i+1} = x_i + h$ の範囲ではポテンシャルは $V(x_i)$ で一定と近似する。転送行列法の以下の関係式を導け。

$$\Psi_i(x) = A_i \exp(ik_i x) + B_i \exp(-ik_i x) \quad k_i = \sqrt{\frac{2m_i}{\hbar^2} (E - V_i)}$$

境界条件

$$\Psi_i(x_{i+1}) = \Psi_{i+1}(x_{i+1}) \quad m_i^{-1} \Psi'_i(x_{i+1}) = m_{i+1}^{-1} \Psi'_{i+1}(x_{i+1})$$

$$\begin{pmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha^+ P_i & \alpha^- / Q_i \\ \alpha^- Q_i & \alpha^+ / P_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_i \\ B_i \end{pmatrix}$$

$$\alpha^\pm_i = \frac{1}{2} \left[1 \pm (m_{i+1} / m_i) (k_i / k_{i+1}) \right]$$

$$P_i = \exp[i(k_i - k_{i+1})x_{i+1}]$$

$$Q_i = \exp[i(k_i + k_{i+1})x_{i+1}]$$

PowerPoint 等のファイルで提出

期限: 今日の17:00までにできたところまで可