平成 26 年度神戸大学大学院工学研究科博士課程前期課程入学試験

物性工学

問題１．次の文章中の(i)～（xiv）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に示すように，質量M_1とM_2の原子が交互に間隔aで並んだ一次元格子を考え，格子振動について考察する。最近接原子からの影響のみを考慮し，ばね定数をgとする。$2n$番目の原子の平衡位置からのずれをu_{2n}とすると，原子$2n+1$及び$2n$の運動方程式は，

$$M_1\frac{d^2u_{2n+1}}{dt^2} = \boxed{\text{(i)}}. \qquad (1)$$

$$M_2\frac{d^2u_{2n}}{dt^2} = \boxed{\text{(ii)}} \qquad (2)$$

となる。この方程式の解として，

$$u_{2n+1} = A_1\exp\{i[(2n+1)qa - \omega t]\} \qquad (3)$$

$$u_{2n} = A_2\exp\{i[2nqa - \omega t]\} \qquad (4)$$

を仮定する。但し，ωは角周波数，tは時間である。また，qは格子振動の$\boxed{\text{(iii)}}$であり，波長λと $q = \boxed{\text{(iv)}}$の関係がある。(3)，(4)を(1)，(2)に代入すると，

$$(M_1\omega^2 - 2g)A_1 + (2g\cos qa)A_2 = 0 \qquad (5)$$

$$(M_2\omega^2 - 2g)A_2 + (2g\cos qa)A_1 = 0 \qquad (6)$$

が得られる。A_1，A_2がともに０でない解を持つためには、$\boxed{\text{(v)}} = 0$の条件が満たされなければならない。これをω^2について解くと

$$\omega_\pm{}^2 = \frac{g(M_1+M_2)}{M_1M_2}\left\{1 \pm \left[1 - \frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2}\sin^2 qa\right]^{1/2}\right\} \qquad (7)$$

が得られる。ω_-のモードは，長波長極限で$\omega_- \to \boxed{\text{(vi)}}$となり，$\boxed{\text{(vii)}}$ モードと呼ばれる。一方，ω_+のモードは，長波長極限で$\omega_+ \to \boxed{\text{(viii)}}$となる。$\omega_+ = \boxed{\text{(viii)}}$を（５），（６）に代入すると，$\frac{A_2}{A_1} = \boxed{\text{(ix)}}$ となり，隣り合った原子は$\boxed{\text{(x)}}$ 方向に変位する。もし２種類の原子が正負のイオンであれば，分極を誘起して電磁波と相互作用する。そのため，ω_+のモードは $\boxed{\text{(xi)}}$ モードと呼ばれる。ブリュアンゾーンの端（$q = \boxed{\text{(xii)}}$）では、$\omega_- = \boxed{\text{(xiii)}}$，$\omega_+ = \boxed{\text{(xiv)}}$となり、$M_1$と$M_2$が等しい場合は周波数が一致する。$M_1$と$M_2$が異なる場合は，$\boxed{\text{(vii)}}$ モードと$\boxed{\text{(xi)}}$ モードの間に、格子振動が存在しない周波数領域が存在する。

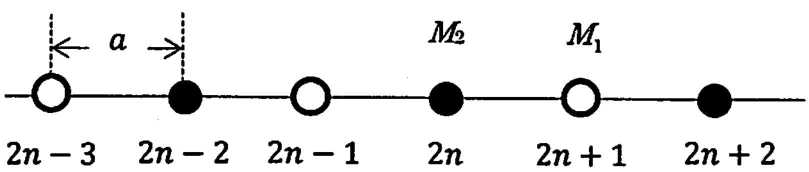

図１　２種原子の一次元格子。原子は等間隔で並んでいる。

問題２．次の文章中の(a)～（n）に当てはまる，言葉，数式，記号等を対応する解答欄に書け。

3 次元結晶格子の基本ベクトルを$\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$とすると，逆格子の基本ベクトルは，$\vec{a}^* =$ $\boxed{\text{(a)}}$, $\vec{b}^* =$ $\boxed{\text{(b)}}$, $\vec{c}^* =$ $\boxed{\text{(c)}}$となり，逆格子ベクトルは，$\vec{G}_{hkl} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$と定義される。整数$h, k, l$の組は$(h\,k\,l)$面の$\boxed{\text{(d)}}$と呼ばれ，$\vec{G}_{hkl}$ は$(h\,k\,l)$面と$\boxed{\text{(e)}}$に交わる。また，$(h\,k\,l)$面の面間隔d_{hkl}は$G_{hkl} = |\vec{G}_{hkl}|$を用いて$\boxed{\text{(f)}}$と表せる。

$(h\,k\,l)$面に波数ベクトル$\vec{k}_0$の X 線を入射し，回折パターンを調べる。ラウエ条件より，

$$\vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{G} \tag{8}$$

を満たす$\vec{k}$の方向に回折が起きる。$(h\,k\,l)$面と$\vec{k}_0$のなす角度をθとすると，回折の前後で X 線の波長は変わらないので，(8)より，

$$2|\vec{k}_0|\sin\theta = 2\pi/d_{hkl} \tag{9}$$

が得られる。$|\vec{k}_0|$を波長λで表すと，(9)は$\boxed{\text{(g)}}$　となる。これは、回折に関する$\boxed{\text{(h)}}$ の法則である。

実際の X 線回折では、(9)の回折条件が満たされていても，その方向に回折線が現れない場合がある。これは，単位胞内の異なる原子から散乱される波の間の干渉の効果であり，その効果は構造因子

$$S_{hkl} = \sum_\alpha f_\alpha \exp(-i\vec{G}_{hkl}\cdot\vec{r}_\alpha) \tag{10}$$

で表される。$\vec{r}_\alpha$は単位格子内の各原子の位置を決めるベクトル，f_αは原子散乱因子である。S_{hkl}が 0 であると回折線は現れない。$\vec{r}_\alpha$を格子の基本ベクトルを用いて，

$$\vec{r}_\alpha = u_\alpha\vec{a} + v_\alpha\vec{b} + w_\alpha\vec{c} \tag{11}$$

と表し(10)に代入すると，

$$S_{hkl} = \sum_\alpha f_\alpha \exp[-2\pi i(hu_\alpha + kv_\alpha + lw_\alpha)] \tag{12}$$

となる。体心立方格子の場合，単位胞内の 2 個の原子は，$r_1 = (0,0,0)$と$r_2 = \left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$の位置を占め，どちらも同じ原子散乱因子$f$を持つ。このとき$S_{hkl}$は，

$$S_{hkl} = \quad \boxed{\text{(i)}} \tag{13}$$

となり，$h + k + l$が奇数の場合に$\boxed{\text{(j)}}$，偶数の場合に$\boxed{\text{(k)}}$となる。面心立方格子の場合，単位胞内の 4 個の原子は，$r_1 = (0,0,0)$，$r_2 = \left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$，$r_3 = \left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right)$，$r_4 = \left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$の位置を占め，いずれも同じ原子散乱因子$f$を持つ。このとき$S_{hkl}$は，

$$S_{hkl} = \quad \boxed{\text{(l)}} \tag{14}$$

となる。S_{hkl}の値は，h, k, lがすべて偶数もしくは奇数の場合は$\boxed{\text{(m)}}$，一つが偶数で他が奇数の場合は$\boxed{\text{(n)}}$，一つが奇数で他が偶数の場合は 0 となる。例えば、面心立方格子では，(100)反射がない。