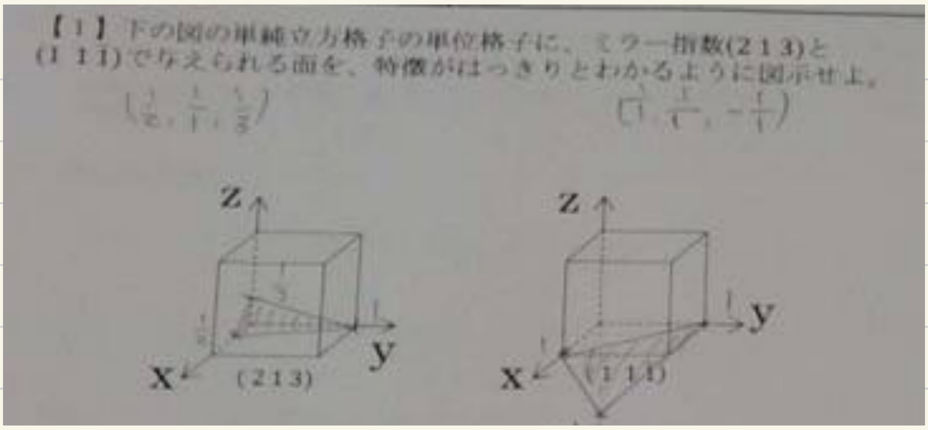
好評により第4版を発売します。アンキー株式会社をこれからもよろしくお願い致します。

カコモン解説

[1]



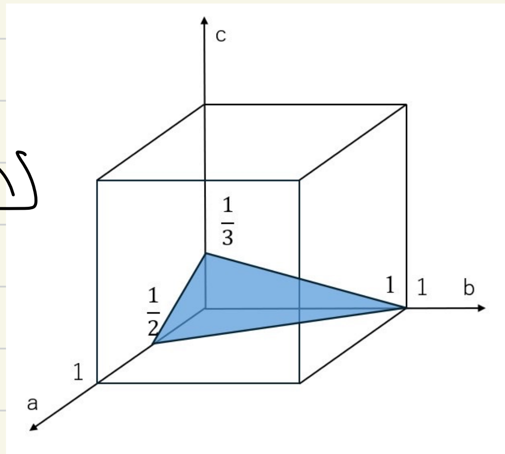
【1】下の図の単純立方格子の単位格子に、ミラー指数(2 1 3)と(1 1 1)で与えられる面を、特徴がはっきりとわかるように図示せよ。

ミラー指数

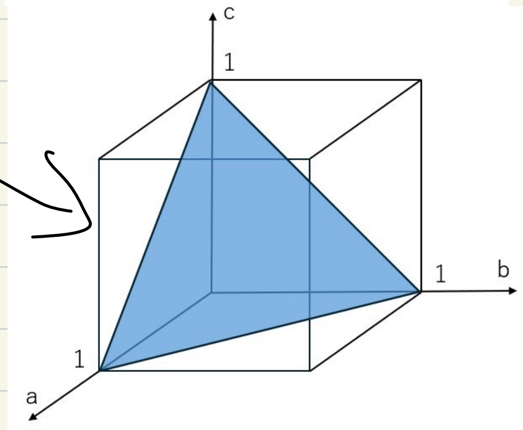
EASY

$(hkl) \rightarrow \left(\frac{1}{h}, \frac{1}{k}, \frac{1}{l}\right)$ で図示

$(2\ 1\ 3) \rightarrow \left(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{3}\right)$



$(1\ 1\ 1) \rightarrow (1, 1, 1)$



[2]

【２】以下の表は３次元格子（結晶軸の長さ a_1、a_2、a_3、各軸のなす角 α, β, γ）の７晶系と14種類のブラベー格子(P:単純格子、I:体心格子、C:底心格子、F:面心格子)について記述したものである。(1)~(10)を埋めなさい。

晶系	結晶軸と結晶角	ブラベー格子
(1) 三斜	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$、$\alpha \neq \beta \neq \gamma$	P
単斜晶	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$、(2)	(3) PC
立方晶	$a_1 = a_2 = a_3$、$\alpha = \beta = \gamma = 90°$	(4) PIF
(5) 正方	$a_1 = a_2 \neq a_3$、$\alpha = \beta = \gamma = 90°$	P,I
直方晶	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$、$\alpha = \beta = \gamma = 90°$	(6) PCIF
(7) 三方	$a_1 = a_2 = a_3$、$120° > \alpha = \beta = \gamma \neq 90°$	(8) P
(9) 六方	$a_1 = a_2 \neq a_3$、$\alpha = \beta = 90°$、$\gamma =$ (10)°	P

解答欄

(1) 三斜晶

(2) $\alpha \cdot \gamma = 90°$ $\beta \neq 90°$

(3) P, C

(4) P, I, F,

(5) 正方晶

(6) P, C, I, F

(7) 三方晶

(8) P,

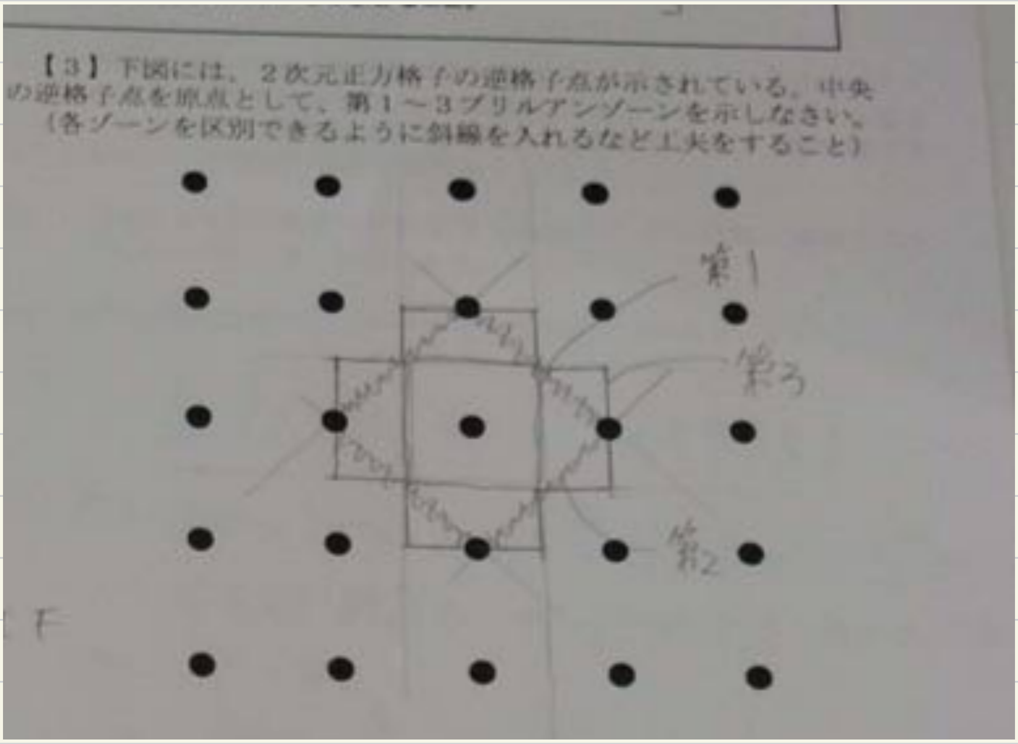
(9) 六方晶

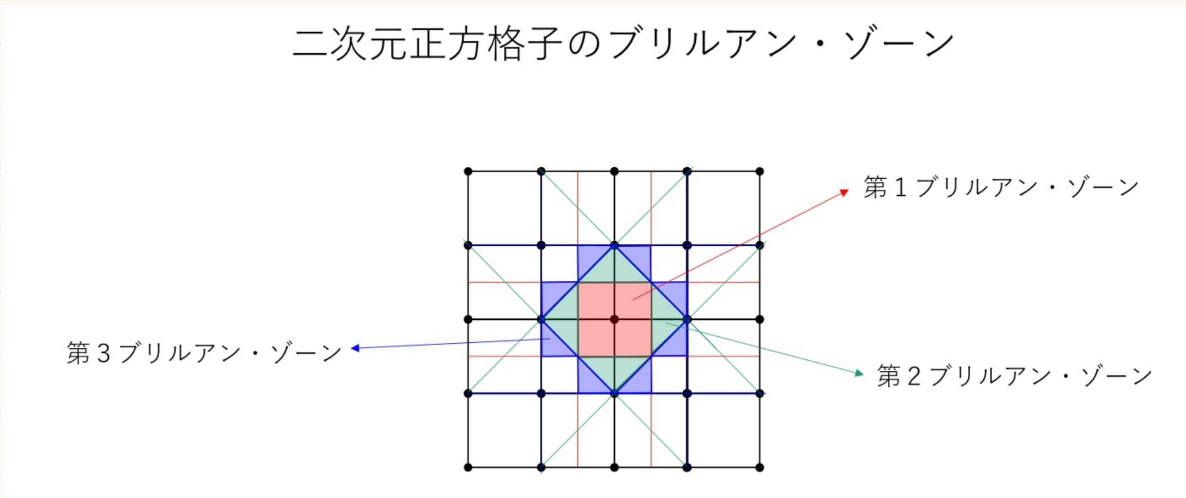
(10) 120°

結晶系	軸長および軸間角	Bravais 格子	格子記号
三斜晶 (Triclinic)	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$	単純	P
単斜晶 (Monoclinic)	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90° \neq \beta$	単純 一面心	P C
立方晶(Cubic)	$a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$	単純 体心 面心	P I F
正方晶(Tetragonal)	$a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$	単純 体心	P I

斜方晶 (Orthorhombic) 直方晶	a ≠ b ≠ c, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$	単純 体心 一面心 面心	P I C F
菱面晶 (Rhombohedral) 或いは 三方晶 (Trigonal)	a = b = c $\alpha = \beta = \gamma \neq 90°$	単純	P
六方晶 (Hexagonal)	a = b ≠ c $\alpha = \beta = 90°$, $\gamma = 120°$	単純	P

[3]





【4】以下に関係する用語について答えなさい。

(1) 原子が周期的な配列をした固体である結晶が必ず持っている対称操作で、単位格子（単位胞）の各結晶軸ベクトルの整数倍を線形結合したベクトル分だけ移動しても移動前と全く変わらない対称操作を何というか。

並進操作　並進操作

(2) (2)結晶によるX線などの波動の回折を逆格子空間上で幾何学的に理解するために用いられる図形。入射波の波数ベクトルの始点を中心に半径を波数ベクトルの長さに取った球を何というか。

エバルト球　エバルト球

(3) 波動（波）において、波数kと角周波数ωの間の関係を何というか。また、ωとkの間に比例関係がない場合の波束の伝わる速度は何というか。

$v_g = \frac{d\omega}{dk}$　位相速度

位相速度

関係　分散関係

分散関係

速度　群速度

相対速度

(4) 格子振動に関して角周波数ωに対して区間$[\omega, \omega + d\omega]$に存在する振動の基準モードの数を$D(\omega)d\omega$と表すとき、$D(\omega)$を何というか。また、$\frac{d\omega}{dk} = 0$のところでは$D(\omega) \to \infty$となる特異点となる。この特異点を何というか。

$D(\omega)$　格子状態密度

状態密度関数

特異点　ファン・ホーブ特異点

ファン・ホーブ特異点

$D(\omega) = \frac{L}{\pi} \frac{1}{\left(\frac{d\omega}{dk}\right)}$

分散関数

状態関数

絶対関数

分布関数

状態密度関数

【5】 体心立方格子と面心立方格子の構造因子 $S_G(v_1, v_2, v_3)$ を求めなさい。ただし、G は逆格子ベクトル $G = v_1 b_1 + v_2 b_2 +$ $v_3 b_3$ (v_1, v_2, v_3 は整数、b_1, b_2, b_3 は逆格子の軸ベクトル) であり、原子形状因子は f とする。

体心立方格子

[5] 体心立方格子と面心立方格子の構造因子 $S_G(v_1, v_2, v_3)$ を求めなさい。ただし、G は逆格子ベクトル $G = v_1 b_1 + v_2 b_2 + v_3 b_3$ (v_1, v_2, v_3) は整数, b_1, b_2, b_3 は逆格子の軸ベクトルであり原子形状因子は f とする。

体心立方構造(bcc)の構造因子

Bcc構造の単位構造

同じ原子　$x_1 = y_1 = z_1 = 0$ と $x_2 = y_2 = z_2 = \frac{1}{2}$

$$S_G(v_1, v_2, v_3) = \sum_{j=1,2} f_j \exp\left(-i2\pi\left(v_1 x_j + v_2 y_j + v_3 z_j\right)\right)$$

$$= f_1 \exp 0 + f_2 \exp\left(-i\pi(v_1 + v_2 + v_3)\right)$$

$$= f\left\{1 + \exp\left(-i\pi(v_1 + v_2 + v_3)\right)\right\}$$

$v_1 + v_2 + v_3 =$ 奇数の時

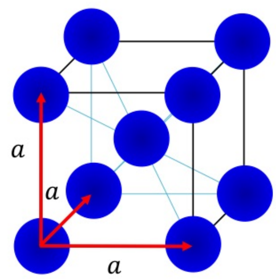
$$\exp(-i\pi \times \text{奇数}) = \cos(\pi \times \text{奇数}) = -1$$

$$\Longrightarrow S_G(v_1, v_2, v_3) = 0$$

$v_1 + v_2 + v_3 =$ 偶数の時

$$\exp(-i\pi \times \text{偶数}) = \cos(\pi \times \text{偶数}) = 1$$

$$\Longrightarrow S_G(v_1, v_2, v_3) = 2f$$



体心立方構造

面心立方格子の構造因子S_Gを求めなさい。

fcc 格子の単位構造

同じ原子　$(0,0,0)\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$

$$S_G(v_1,v_2,v_3)=\sum_{j=1}^{4} f_j\exp\left(-i2\pi\left(v_1x_j+v_2y_j+v_3z_j\right)\right)$$

$$=f_1\exp0+f_2\exp\left(-i\pi(+v_2+v_3)\right)+f_3\exp\left(-i\pi(+v_1+v_3)\right)$$
$$+f_4\exp\left(-i\pi(+v_1+v_2)\right)$$

$\Longrightarrow v_1,v_2,v_3$がすべて偶数or すべて奇数

$$S_G(v_1,v_2,v_3)=4f$$

v_1,v_2,v_3 の一つだけが偶数or奇数

$$\Longrightarrow S_G(v_1,v_2,v_3)=0$$

【6】無限に深い一次元井戸型ポテンシャル（$-\frac{a}{2} \le x \le +\frac{a}{2}$ではポテンシャルV(x)が0で、その外ではV(x)が無限大となる）の中で運動する量子力学にしたがう粒子の問題を解く。各問いに答えなさい。（解答欄が不足する場合はこの用紙の裏面を使用してよい。）

(i) $-\frac{a}{2} \le x \le +\frac{a}{2}$の領域で波動関数をφ(x)としての時間に依存しないシュレーディンガー方程式を示しなさい。

(ii) (i)の方程式を解いて、エネルギー固有値を求めなさい。

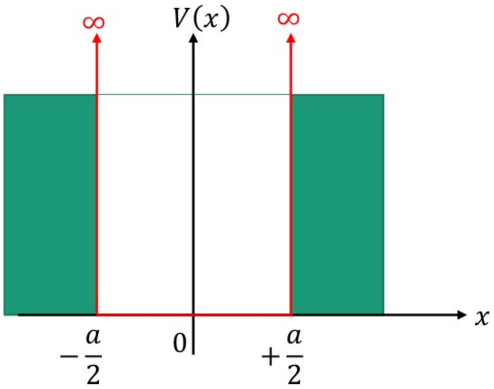
[6] 無限に近い一次元井戸型ポテンシャル($-\frac{a}{2} \leqq x \leqq \frac{a}{2}$ではポテンシャルV(x)が0で,その外ではV(x)が無限大となる)の中で運動する量子力学にしたがう粒子の問題を解く,各問いに答えよ。

(i) $-\frac{a}{2} \leqq x \leqq \frac{a}{2}$の領域で波動関数を$\varphi(x)$としての時間に依存しないシュレーディンガー方程式を示せ。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) = \varepsilon\,\varphi(x)\quad(\varepsilon\text{は固有値})\cdots☆$$

(ii) (i)の方程式を解いて,エネルギー固有値を求めよ。

5.6　無限に深い1次元の井戸型ポテンシャル



図のような無限に深い1次元の井戸型ポテンシャルの問題を考える。

$$V(x) = \begin{cases} 0 \ \left(-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}\right) \\ \infty \ \left(x < -\frac{a}{2}, x > \frac{a}{2}\right) \end{cases}$$

井戸の外側のポテンシャルは無限であるので、粒子は存在できず波動関数は0となる。
井戸の内側は、(5.15)の時間に依存しないシュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) = \mathcal{E}\varphi(x) \cdots (5.21)$$

を解くことにより求まる。

(5.21)の一般解は、$\varphi(x) = Ae^{i\frac{\sqrt{2m\mathcal{E}}}{\hbar}x} + Be^{-i\frac{\sqrt{2m\mathcal{E}}}{\hbar}x} \cdots (5.22)$となる。

$x = \frac{a}{2}$と$x = -\frac{a}{2}$における境界条件から、

$$\begin{aligned} \varphi\left(\frac{a}{2}\right) &= Ae^{i\frac{\sqrt{2m\mathcal{E}}}{\hbar}\cdot\frac{a}{2}} + Be^{-i\frac{\sqrt{2m\mathcal{E}}}{\hbar}\cdot\frac{a}{2}} = 0 \\ \varphi\left(-\frac{a}{2}\right) &= Ae^{-i\frac{\sqrt{2m\mathcal{E}}}{\hbar}\cdot\frac{a}{2}} + Be^{+i\frac{\sqrt{2m\mathcal{E}}}{\hbar}\cdot\frac{a}{2}} = 0 \end{aligned} \cdots (5.23)$$

でなければならない。

AとBがともに0でない解を持つには、

$$\begin{vmatrix} e^{i\frac{\sqrt{2m\mathcal{E}}}{\hbar}\frac{a}{2}} & e^{-i\frac{\sqrt{2m\mathcal{E}}}{\hbar}\frac{a}{2}} \\ e^{-i\frac{\sqrt{2m\mathcal{E}}}{\hbar}\frac{a}{2}} & e^{+i\frac{\sqrt{2m\mathcal{E}}}{\hbar}\frac{a}{2}} \end{vmatrix} = 0$$

でなければならい。これを解くと、

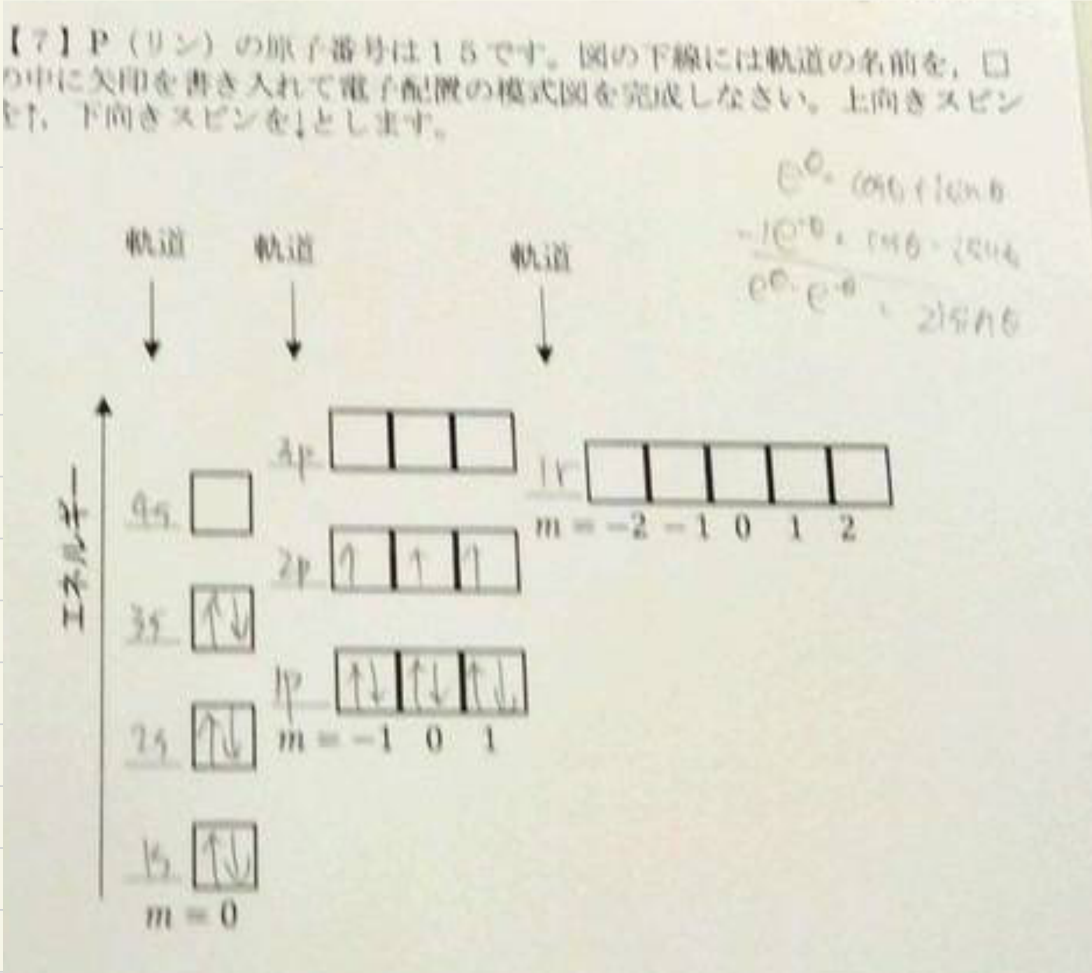
$$e^{i\frac{\sqrt{2m\mathcal{E}}}{\hbar}a} - e^{-i\frac{\sqrt{2m\mathcal{E}}}{\hbar}a} = 2i\sin\left(\frac{\sqrt{2m\mathcal{E}}}{\hbar}a\right) = 0$$

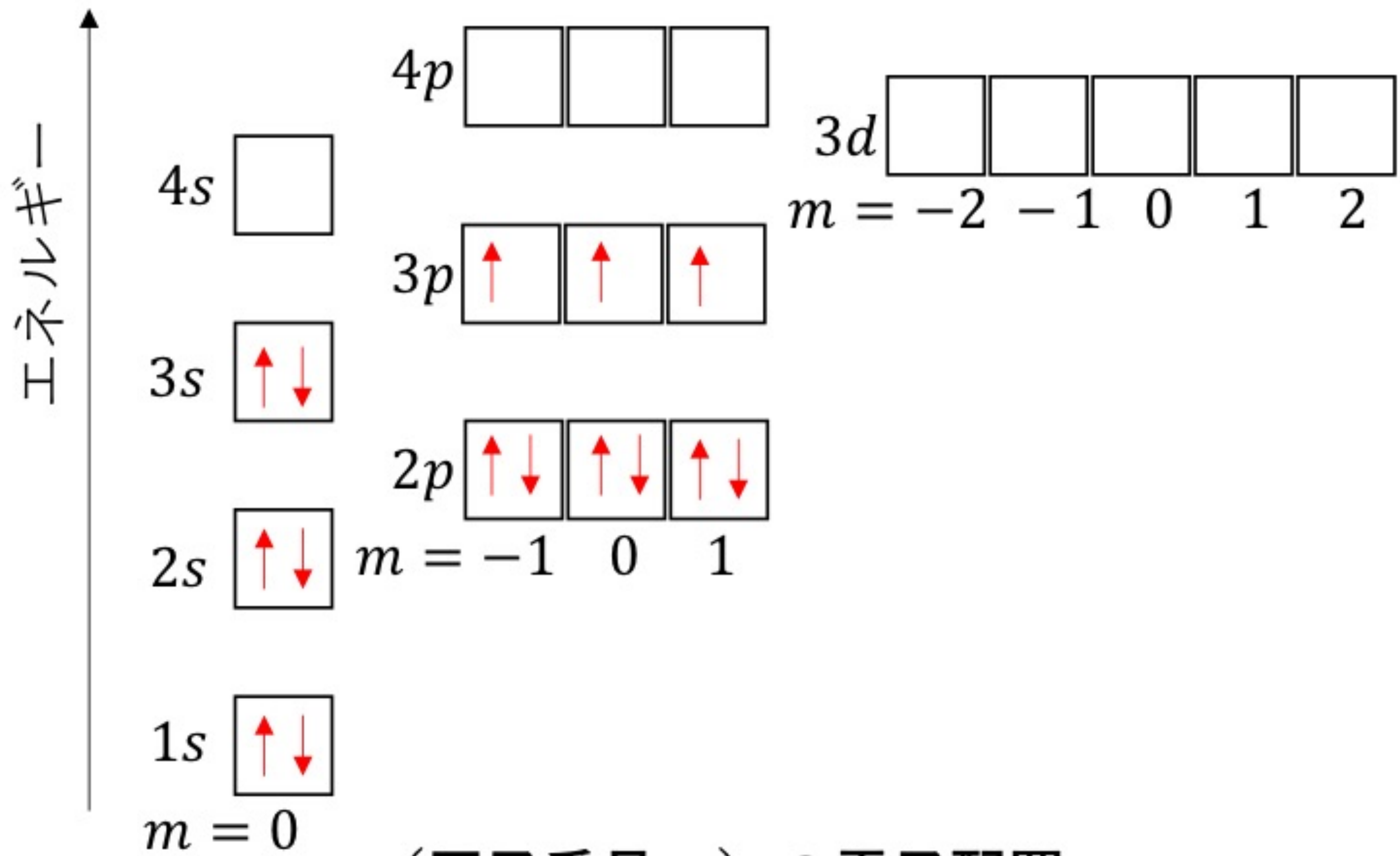
となる。$m, \mathcal{E}, \hbar, a > 0$より、

$$\frac{\sqrt{2m\mathcal{E}}}{\hbar}a = N\pi \quad (N\text{は、任意の自然数})$$

エネルギー$\mathcal{E}$について解くと、

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{N\pi}{a}\right)^2 \quad (N\text{は、任意の自然数}) \cdots (5.24)$$





P（原子番号15）の電子配置