物性工学

問題１．図１のように，質量Mの原子が３：１の間隔（$a, \frac{a}{3}, a, \frac{a}{3}, \cdots$ の間隔）で交互に並んだ一次元格子の格子振動について考える．最近接原子間にのみ相互作用があり，フックの法則が成り立つものとする．また，ばね定数fは各原子間で等しいとする．$2n$番目の原子の平衡位置からのずれをu_{2n}，$2n+1$番目の原子の平衡位置からのずれをu_{2n+1}として，以下の問に答えなさい．

1) 原子$2n$及び$2n+1$の運動方程式を書きなさい．
2) この方程式の解として，

$$u_{2n} = A_1 \exp\left(iq2n\frac{2}{3}a - i\omega t\right) = A_1 \exp\left\{i\left(\frac{4}{3}nqa - \omega t\right)\right\}$$

$$u_{2n+1} = A_2 \exp\left[iq\left\{(2n+1)\frac{2}{3}a - \frac{1}{3}a\right\} - i\omega t\right] = A_2 \exp\left[i\left\{\left(\frac{4}{3}n + \frac{1}{3}\right)qa - \omega t\right\}\right]$$

を仮定する．ここで，tは時間，ωは角周波数，qは波数である．これらの式を問 1)の運動方程式に代入することにより，A_1，A_2に対する連立方程式を求めなさい．
3) A_1，A_2がともに０でない解を持つための条件を示しなさい．
4) 問 3)で求めた式をω^2について解くと，

$$\omega^2 = \frac{2f}{M} \pm \frac{f}{M}\sqrt{2 + 2\cos\frac{4}{3}qa} \qquad (1)$$

が得られる．

4-a) 式(1)の分散関係（ωとqの関係）を，第一ブリユアンゾーンの範囲で図示しなさい．
4-b) 図中にゾーン端におけるqの値を書きなさい．
4-c) 図中に，$q = 0$ 及びゾーン端における ωの値を書きなさい．
4-d) 式(1)の２つの分散関係は，音響モードと光学モードに対応する．光学モードについて，$q = 0$における$2n$番目の原子と$2n+1$番目の原子の振幅の比を求めなさい．

次に，図１において，偶数番目の原子の質量をM_1，奇数番目の原子の質量をM_2とする（$M_1 \neq M_2$）．

5) 分散関係の概要を図示し，$M_1 = M_2$の場合との違いを定性的に説明しなさい．

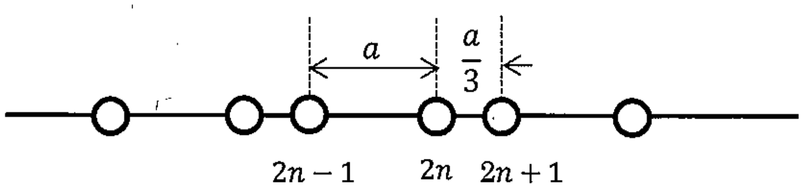

図１　一次元格子のモデル

2022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

問題 2. 以下の問に答えなさい.

面心立方格子の単位胞を図２の立方体（格子定数a）にとる．格子ベクトルを$\mathbf{R} = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3$（$n_1$，$n_2$，$n_3$：整数)としたとき，$\mathbf{G}\cdot\mathbf{R} = 2\pi n$ (n：整数)となるようなベクトル$\mathbf{G} = h\boldsymbol{g}_1 + k\boldsymbol{g}_2 + l\boldsymbol{g}_3$（$h$，$k$，$l$：整数)を逆格子ベクトル呼ぶ.

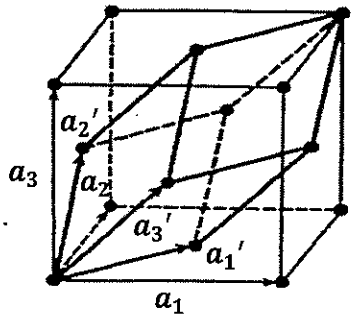

図２　面心立方格子

1)　$\boldsymbol{g}_2$を$\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，$\boldsymbol{a}_3$を用いて表しなさい.

2)　整数h,k,lの組は$(h\,k\,l)$面のミラー指数と呼ばれ，$\mathbf{G}_{hkl}$ は$(h\,k\,l)$面と垂直に交わる．$(h\,k\,l)$面の面間隔d_{hkl}と$\mathbf{G}_{hkl}$の関係を示しなさい.

図２の立方体内には４個の原子が存在しており，これは基本単位格子（Primitive cell）ではない．$\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，$\boldsymbol{a}_3$方向の単位ベクトルを$\boldsymbol{i}$，$\boldsymbol{j}$，$\boldsymbol{k}$で表し，$\boldsymbol{a}_1' = \frac{a}{2}(\boldsymbol{i}+\boldsymbol{j})$，$\boldsymbol{a}_2' = \frac{a}{2}(\boldsymbol{j}+\boldsymbol{k})$，$\boldsymbol{a}_3' = \frac{a}{2}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{i})$を基本ベクトルととると，単位胞あたり１個の原子が存在する基本単位胞が得られる.

3)　$\boldsymbol{a}_1'$，$\boldsymbol{a}_2'$，$\boldsymbol{a}_3'$の長さと互いのなす角度を求めなさい.

4)　$\boldsymbol{a}_1'$，$\boldsymbol{a}_2'$，$\boldsymbol{a}_3'$の逆格子ベクトルを$\boldsymbol{i}$，$\boldsymbol{j}$，$\boldsymbol{k}$で表すことにより，面心立方格子の逆格子ベクトルが体心立方格子であることを示しなさい.

$(h\,k\,l)$面に波数ベクトル$\boldsymbol{k}_0$のＸ線を入射し，回折パターンを調べると，$\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_0 = \mathbf{G}_{hkl}$を満たす$\boldsymbol{k}$の方向に回折が起きる．実際のＸ線回折では，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，単位格子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で表される．いずれの原子も同じ原子散乱因子fを持つとすると，面心立方格子の構造因子は，$S_{FCC} = f\{1 + \exp[-i\pi(h+k)] + \exp[-i\pi(k+l)] + \exp[-i\pi(l+h)]\}$　となる.

5)　面心立方格子で観測される Ｘ 線回折のピークのミラー指数を回折角が小さい順に４つ述べなさい.

次に，塩化ナトリウム型構造のＸ線回折について考える．塩化ナトリウム結晶の場合，構造因子は，

$$S_{NaCl} = \{f_{Na} + f_{Cl}\exp[-i\pi(h+k+l)]\}\{1 + \exp[-i\pi(h+k)] + \exp[-i\pi(k+l)] + \exp[-i\pi(l+h)]\}$$

となる．ここで，f_{Na}とf_{Cl}は，それぞれナトリウムイオンと塩化物イオンの原子散乱因子である.

6)　塩化ナトリウム結晶では，問 5)と同じミラー指数のピークがＸ線回折に現れる．その理由を塩化ナトリウム型構造の原子配置から説明しなさい.

7)　塩化ナトリウム結晶と同じ結晶構造の塩化カリウム結晶では，問 5)で観測される Ｘ 線回折ピークのうち，いくつかのミラー指数のピークが現れない．どのミラー指数のピークが現れないか述べなさい．また，その理由を説明しなさい.