固体物理学1

第5講

波動と結晶

~~ 波長が合うとき、合わぬとき ~~

広島大学　井野明洋

居室: 理D205、放射光セ408

話の流れ

古典的な原子の振動

↓ 離散化と量子統計

量子化した原子の振動

↓ 波動性と結晶格子

フォノン構造

古典電子気体

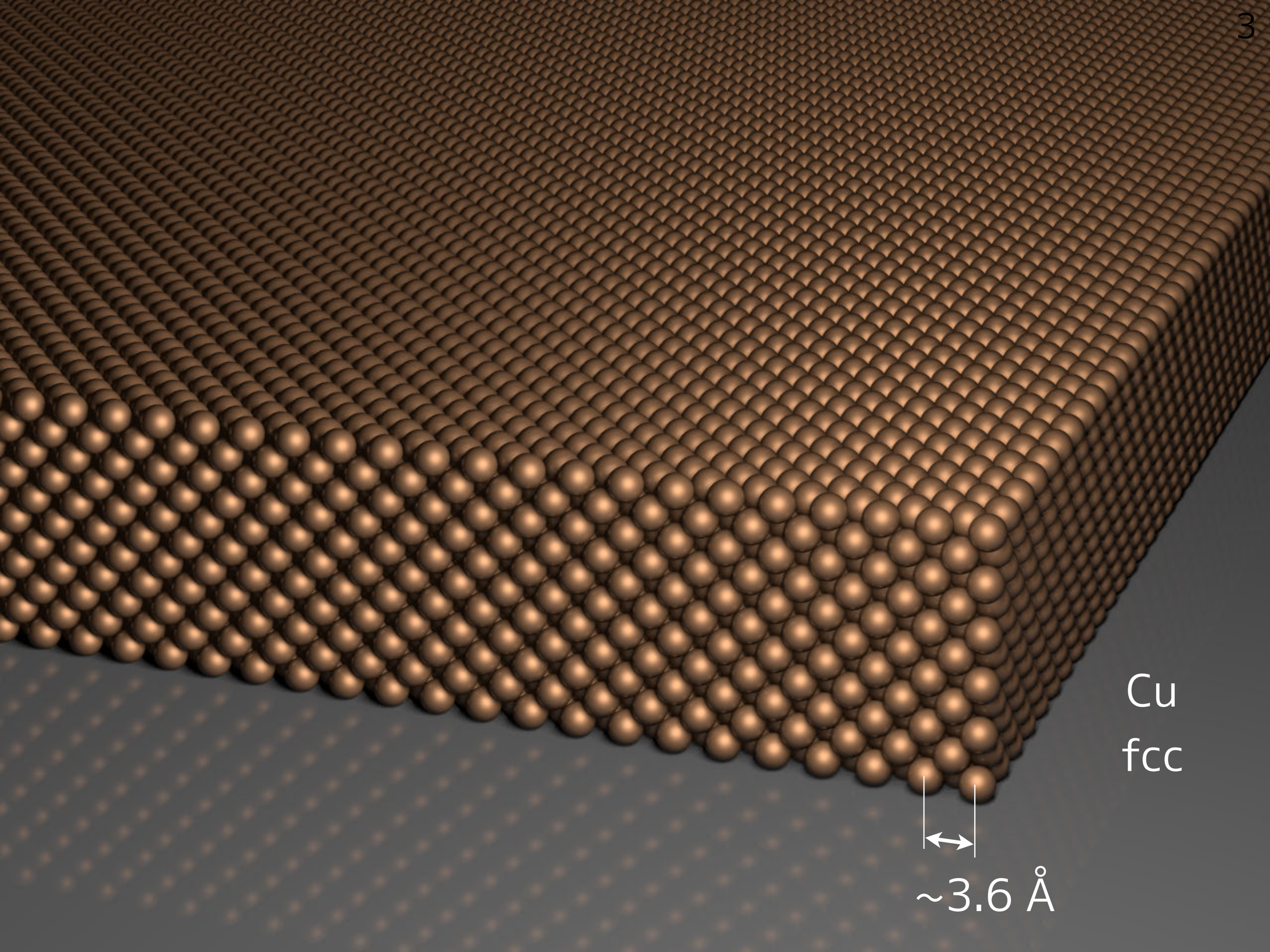
↓ 量子統計

電子フェルミ気体

↓ 波動性と結晶格子

電子構造？

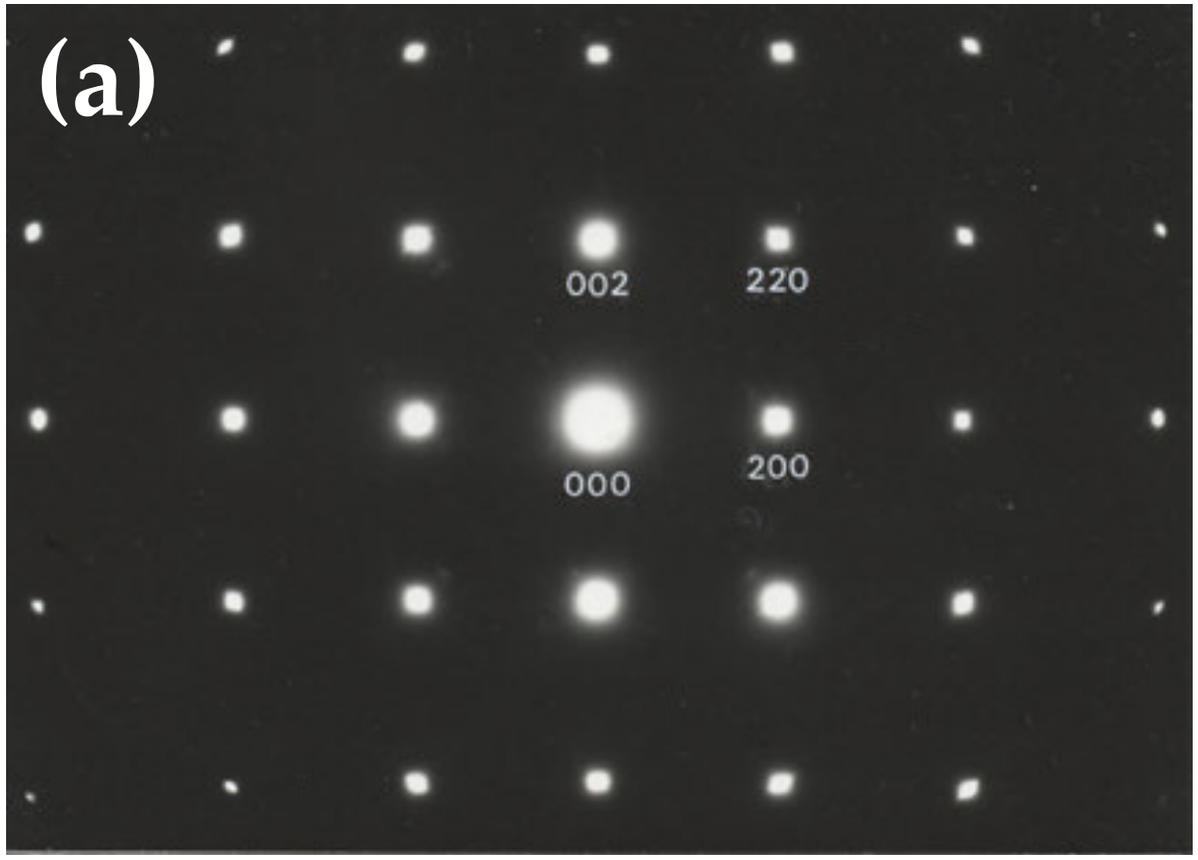
そして、電子くんは、結晶格子に出会う

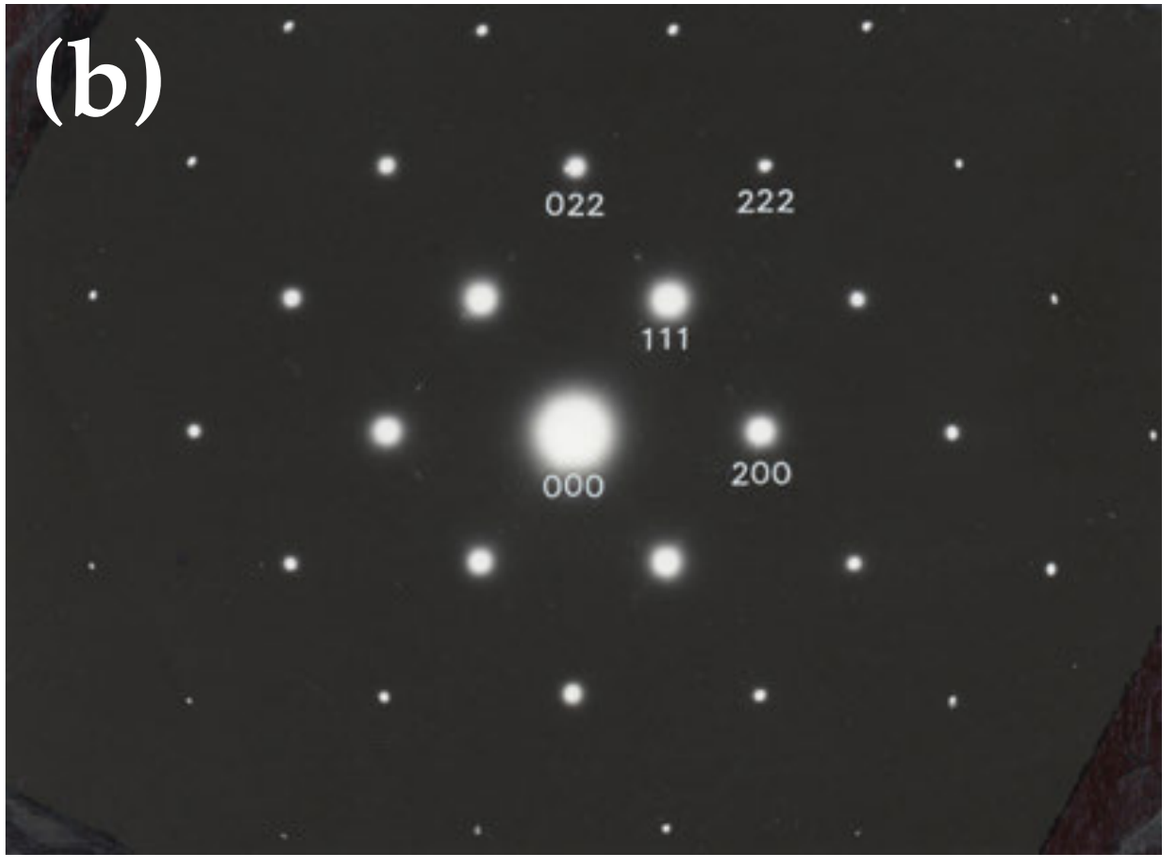

Cu
fcc
~3.6 Å

実験事実

Au の **電子線** 回折像

量子ビームを打て！





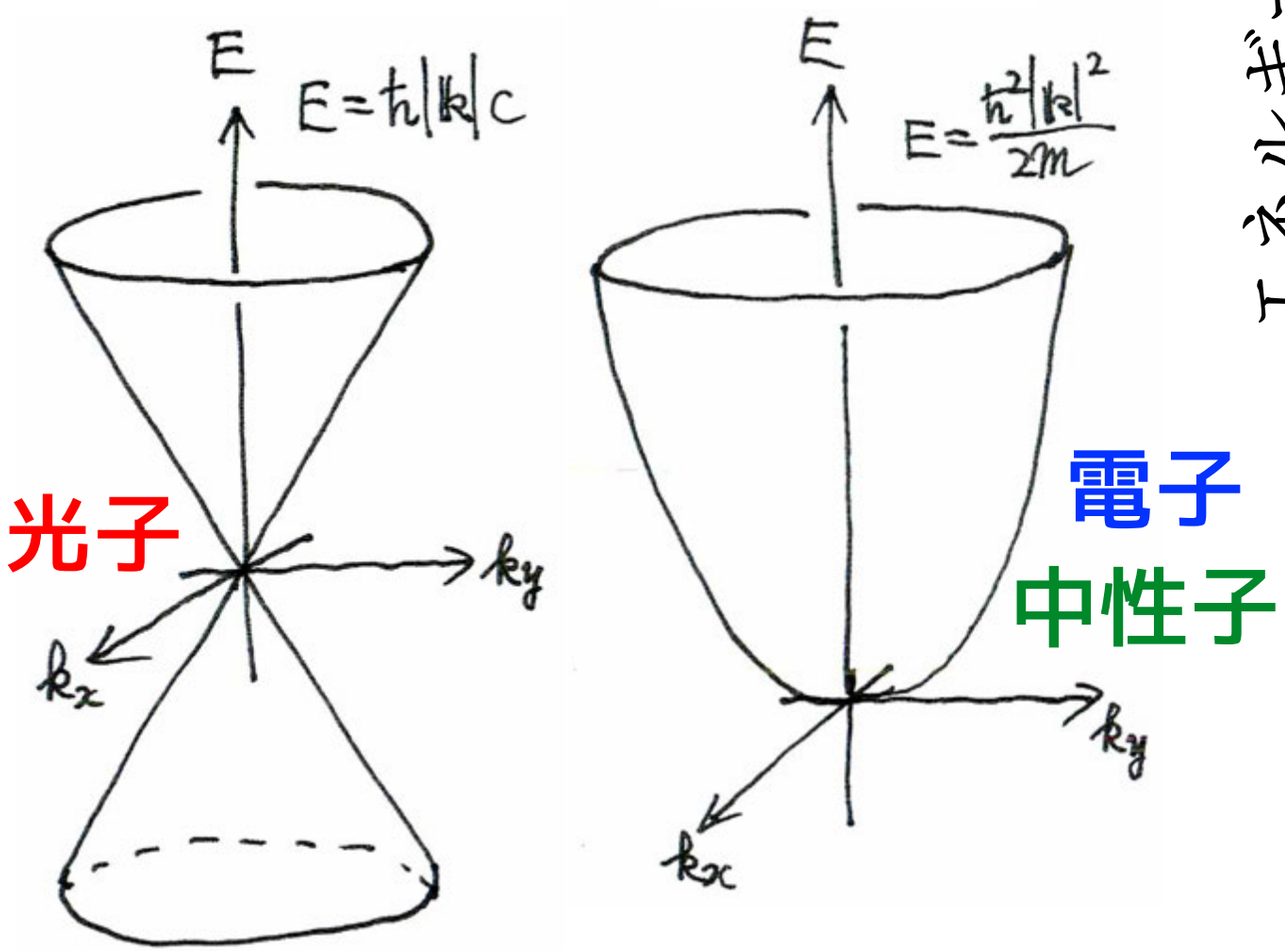
X線 や **中性子線** でも、

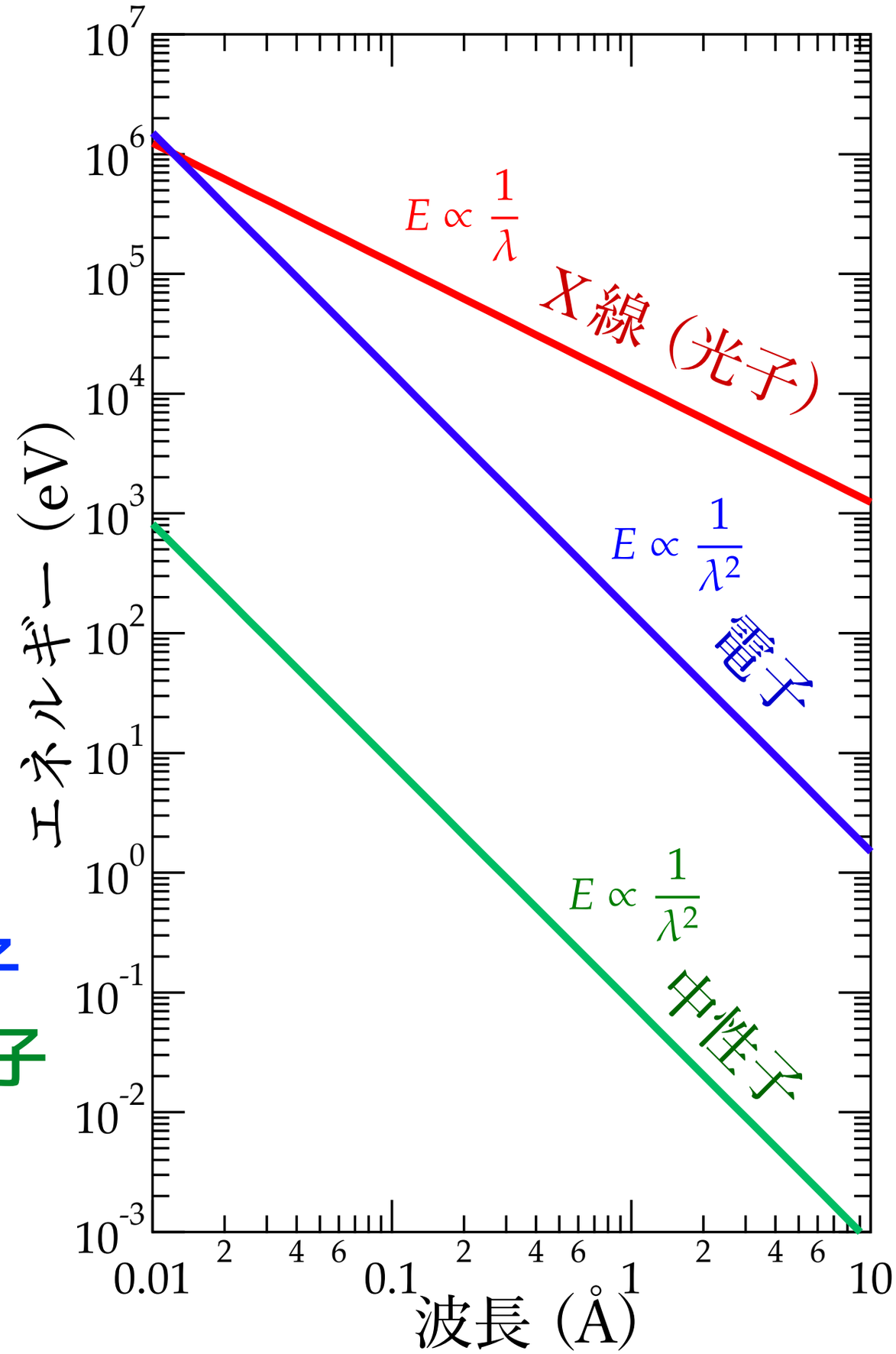
同様の回折現象が観測される。

量子ビームの波長

ツボQ1,Q2

無質量粒子　　**有質量粒子**





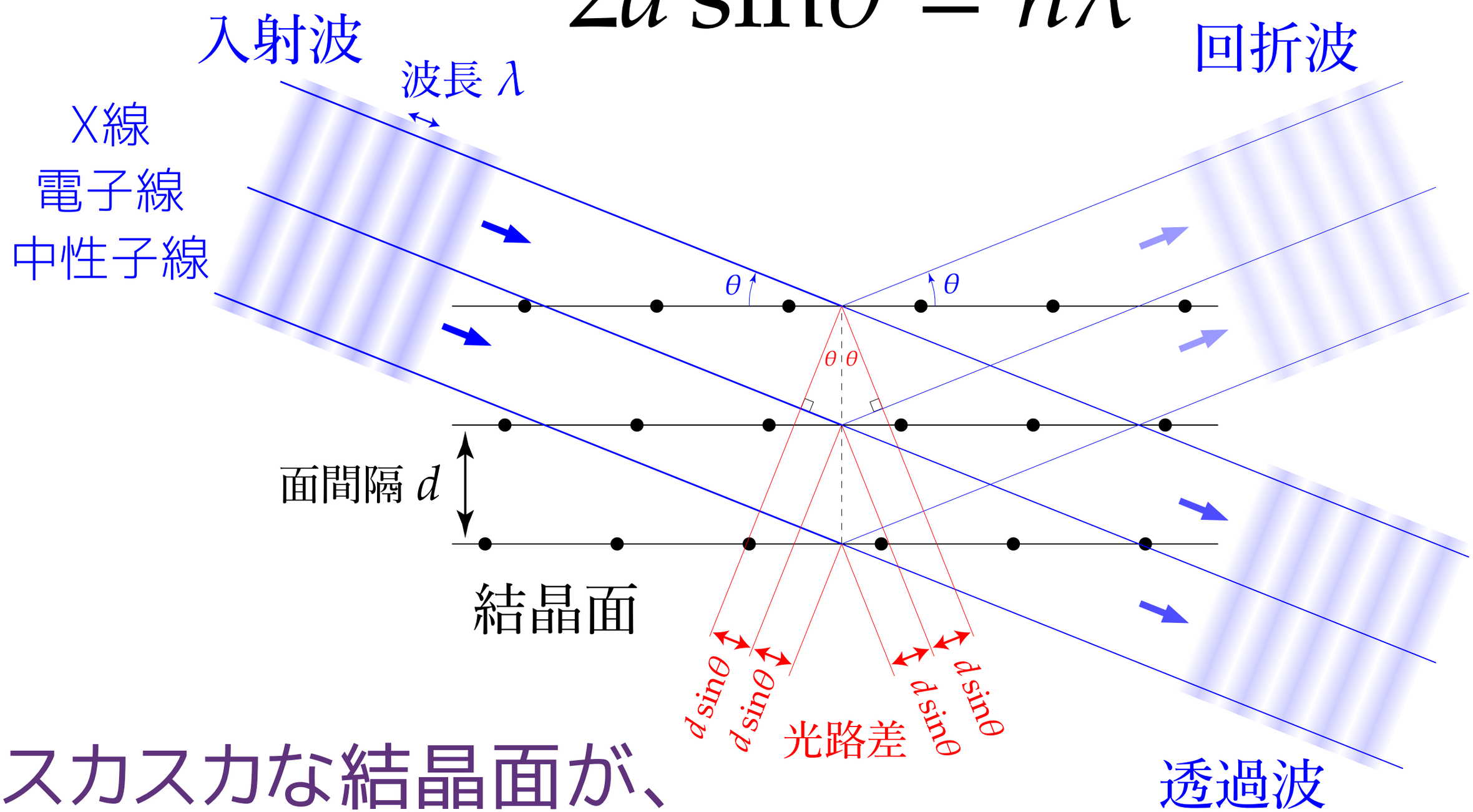
光、中性子、電子、それぞれの回折実験

入射線	波長 λ (Å)	線源	備考
X 線 (光子)	$\dfrac{12.4 \times 10^3}{E\ (\mathrm{eV})}$	Cu Kα (1.54 Å) Mo Kα (0.709 Å) 放射光 (波長可変)	**汎用的**。
中性子線	$\dfrac{0.28}{\sqrt{E\ (\mathrm{eV})}}$	原子炉 加速器	**磁気構造**の観測にも用いられる。
電子線	$\dfrac{1.2}{\sqrt{E\ (\mathrm{eV})}}$	電子銃	**表面分析**に向く。 電荷 $-e$ をもつので、よく散乱され、透過力が低い。

ブラッグ条件

ツボQ3

$$2d\sin\theta = n\lambda$$



スカスカな結晶面が、

なぜ、鏡のように反射するのか？

課題

回折点が決まる

「しくみ」を

知りたい！！！

方針

波の干渉と結晶の周期性を数式で表現

- Bravais格子
- 逆格子ベクトル

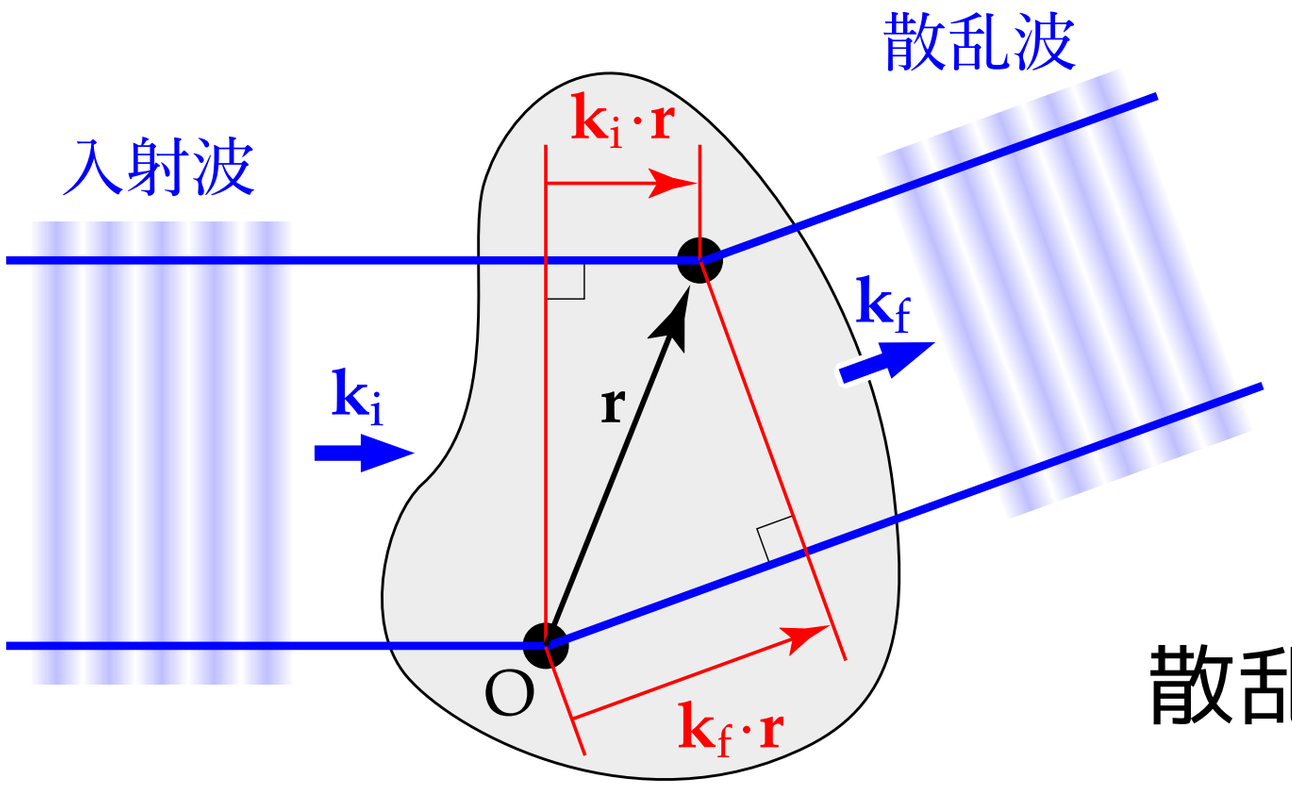
板書

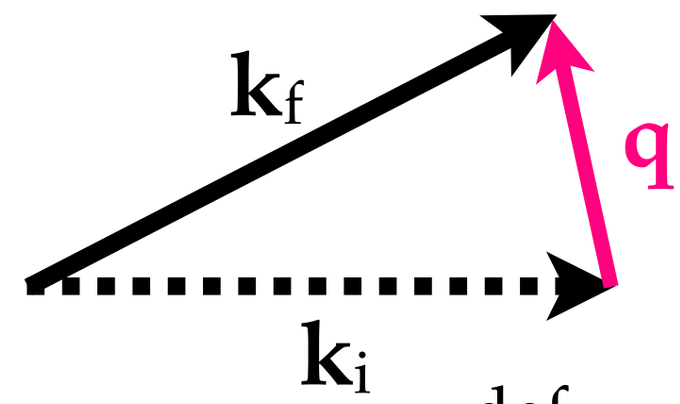
散乱振幅

ラウエ方程式

逆格子

散乱振幅





散乱ベクトル　$\mathbf{q} \overset{\text{def.}}{=} \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i$

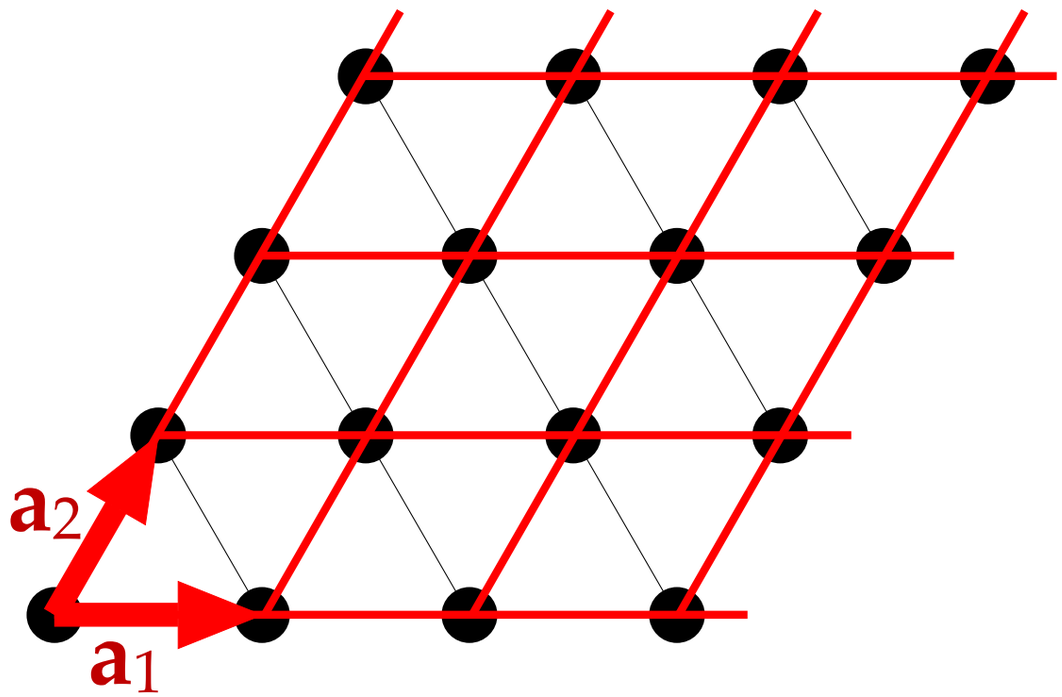
散乱振幅　$$F(\mathbf{q}) = \int_{\text{全空間}} f(\mathbf{r})\, e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\, d\mathbf{r}$$

要は、フーリエ変換。

散乱強度　$$I(\mathbf{q}) \propto \left| F(\mathbf{q}) \right|^2$$

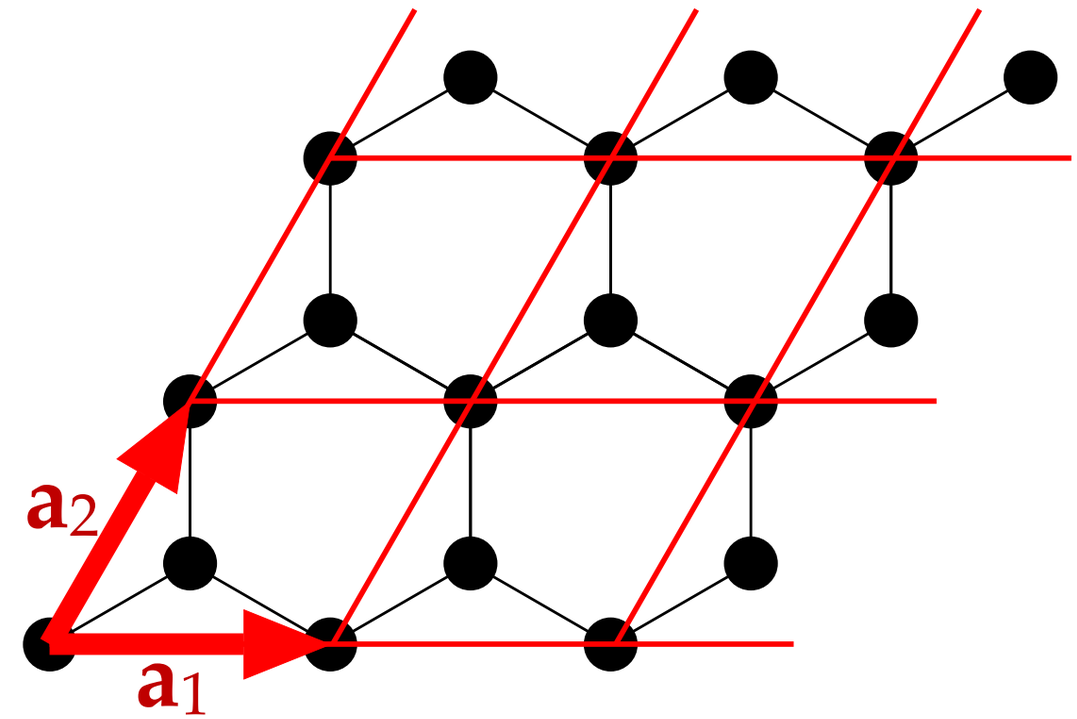
ブラベー格子

素のブラベー格子



- 二次元三角格子
- 面心立方(fcc)格子
- 体心立方(bcc)格子
- 単純立方(sc)格子

ブラベー格子 ＋ 内部構造



- 二次元蜂の巣格子
- 六方最密(hcp)格子
- ダイヤモンド格子
- 現実の結晶

実格子 と 逆格子

周期的な **電荷分布**

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} f_0(\mathbf{r} - \mathbf{R})$$

単位胞の構造

$$\xleftrightarrow{\text{FT}}$$

離散的な **散乱振幅**

$$F(\mathbf{q}) = \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \sum_{\mathbf{G}} F_0(\mathbf{G})\, \delta^3(\mathbf{q} - \mathbf{G})$$

構造因子

実格子

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$$

逆格子

$$\mathbf{G} = m_1\mathbf{g}_1 + m_2\mathbf{g}_2 + m_3\mathbf{g}_3$$

- 散乱が起きるのは、$\mathbf{q} = \mathbf{G}$ のとき。
- 各逆格子点の散乱振幅は $F_0(\mathbf{G})$ に比例。

逆格子ベクトル

正規直交性 $\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\,\delta_{ij}$

同位相条件 $e^{i\,\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}} = 1$

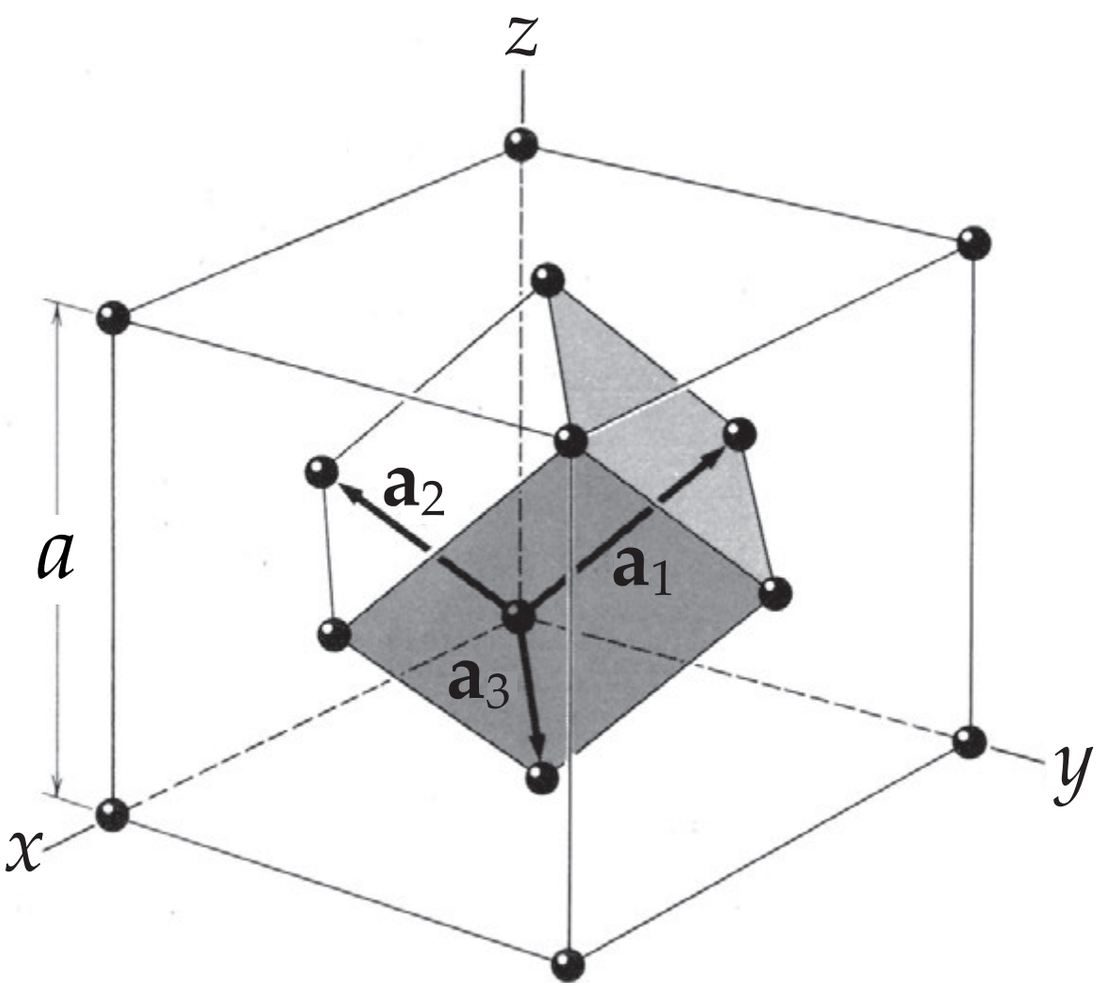
三次元の公式

$$\begin{cases} \mathbf{g}_1 = \frac{2\pi}{\Omega}\,(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)^t \\ \mathbf{g}_2 = \frac{2\pi}{\Omega}\,(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)^t \\ \mathbf{g}_3 = \frac{2\pi}{\Omega}\,(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)^t \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \Omega &= \left| \begin{array}{ccc} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_3 \end{array} \right| \\ &= (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)^t \cdot \mathbf{a}_3 \\ &= (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)^t \cdot \mathbf{a}_1 \\ &= (\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)^t \cdot \mathbf{a}_2 \end{aligned}$$

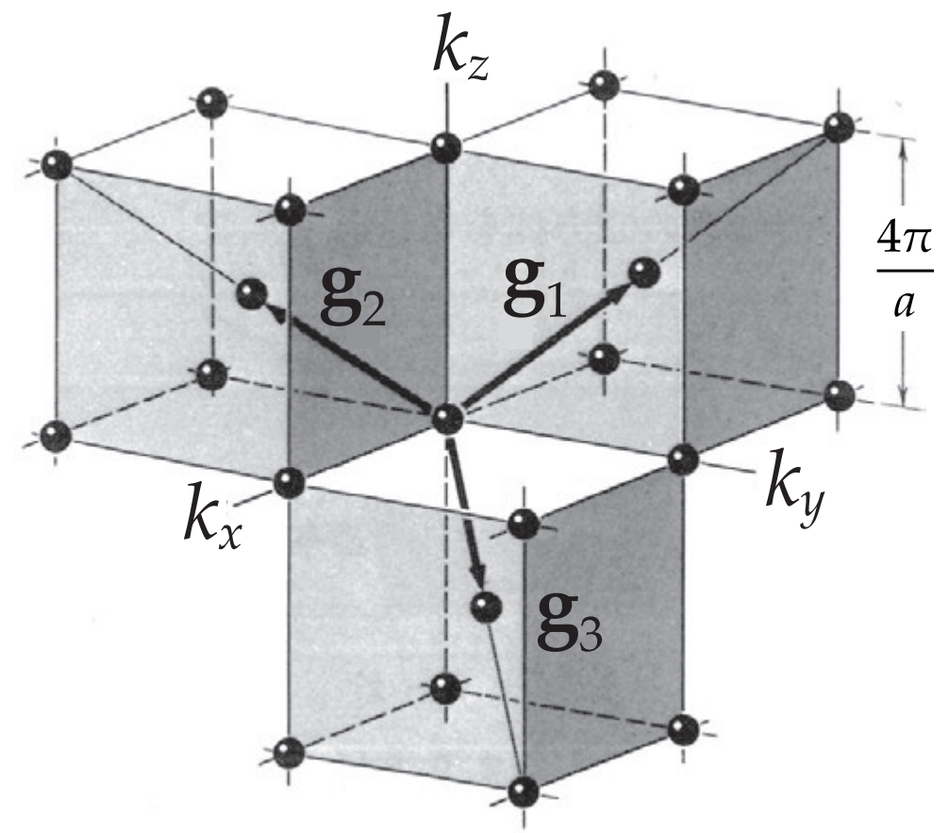
ただし、Ω は単位胞の体積。

面心立方格子 (fcc)



FT

体心立方格子 (bcc)



$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_3 \end{pmatrix} = \frac{a}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{g}_1 \\ \mathbf{g}_2 \\ \mathbf{g}_3 \end{pmatrix} = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

ツボQ4-Q7

回折条件

波長が合うとき、合わぬとき

運動量条件

ラウエ条件 $\mathbf{q} = \mathbf{G}$ より

$$\mathbf{k}_\mathrm{f} = \mathbf{k}_\mathrm{i} + \mathbf{G}$$

エネルギー条件

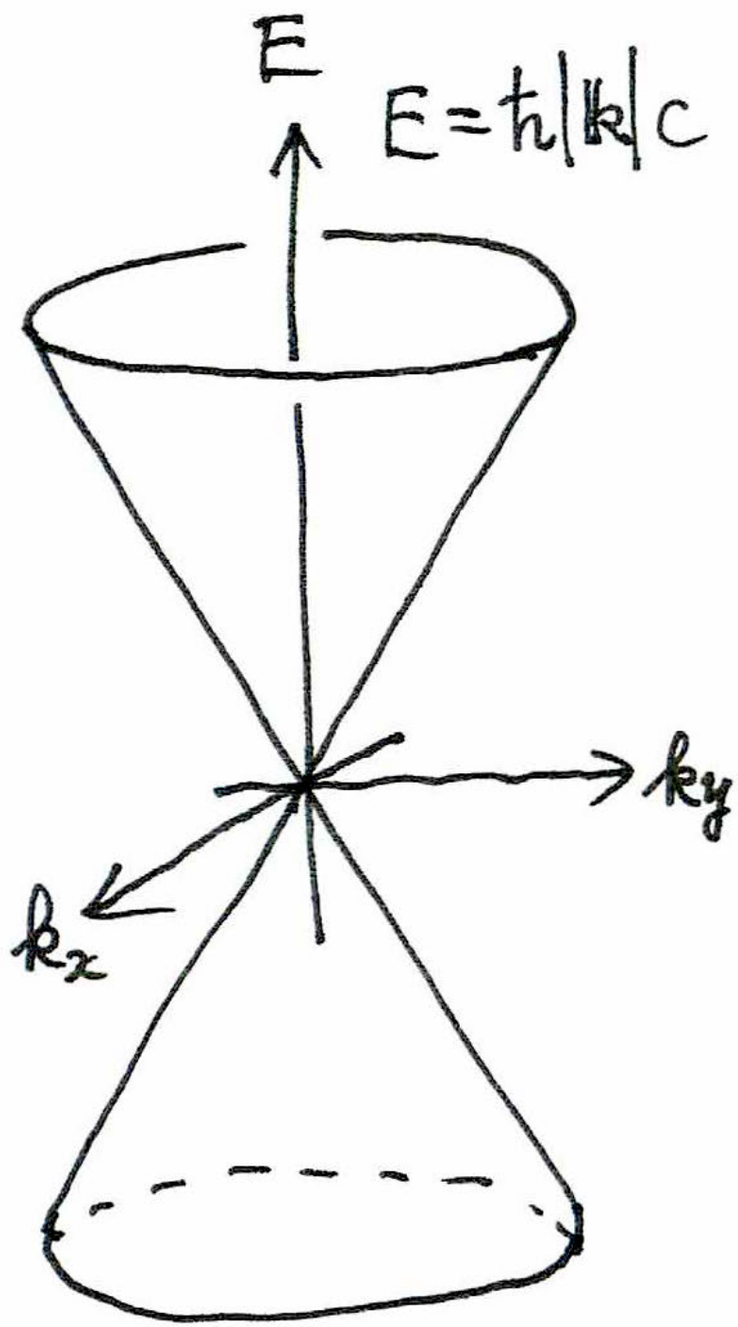
弾性散乱 $E_\mathrm{f} = E_\mathrm{i}$ より

$$\left|\mathbf{k}_\mathrm{f}\right| = \left|\mathbf{k}_\mathrm{i}\right|$$

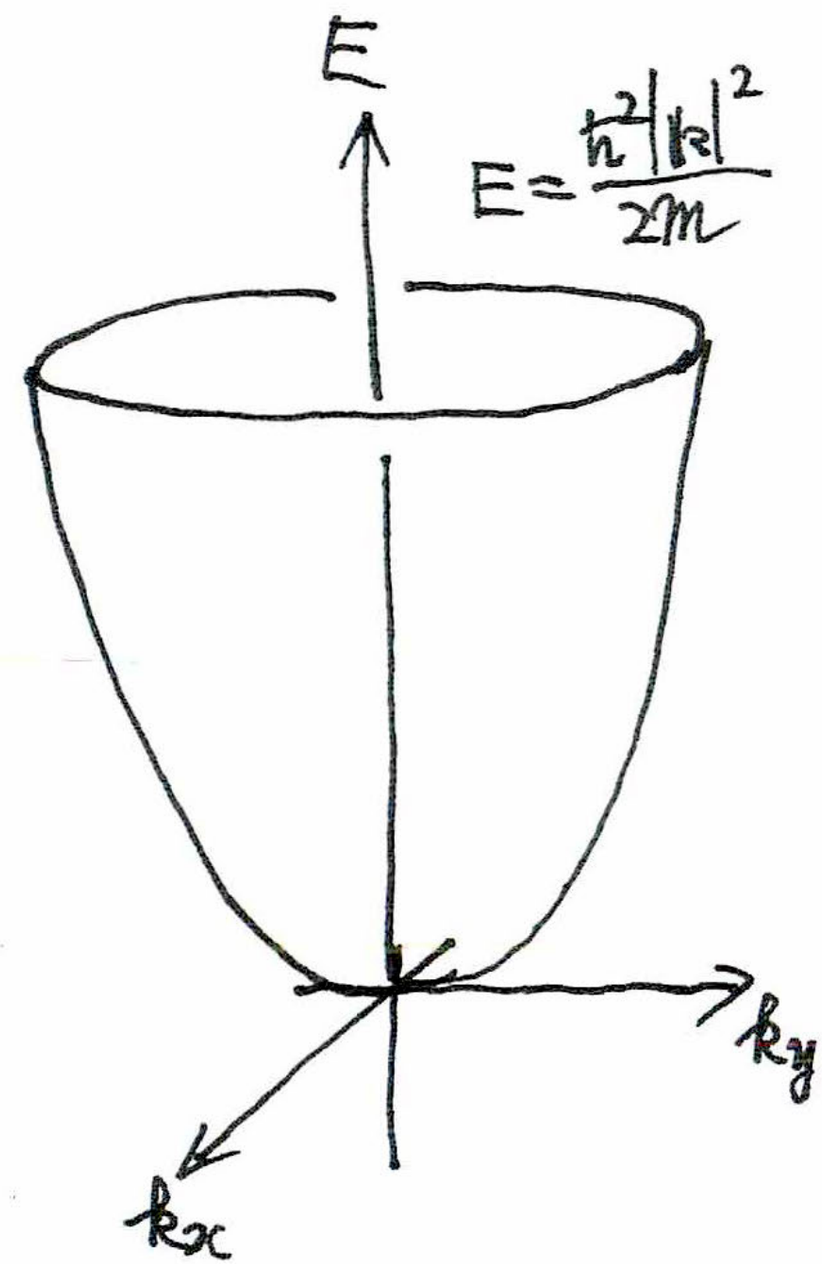
真空中の分散関係

ツボQ1,Q2

無質量粒子



有質量粒子



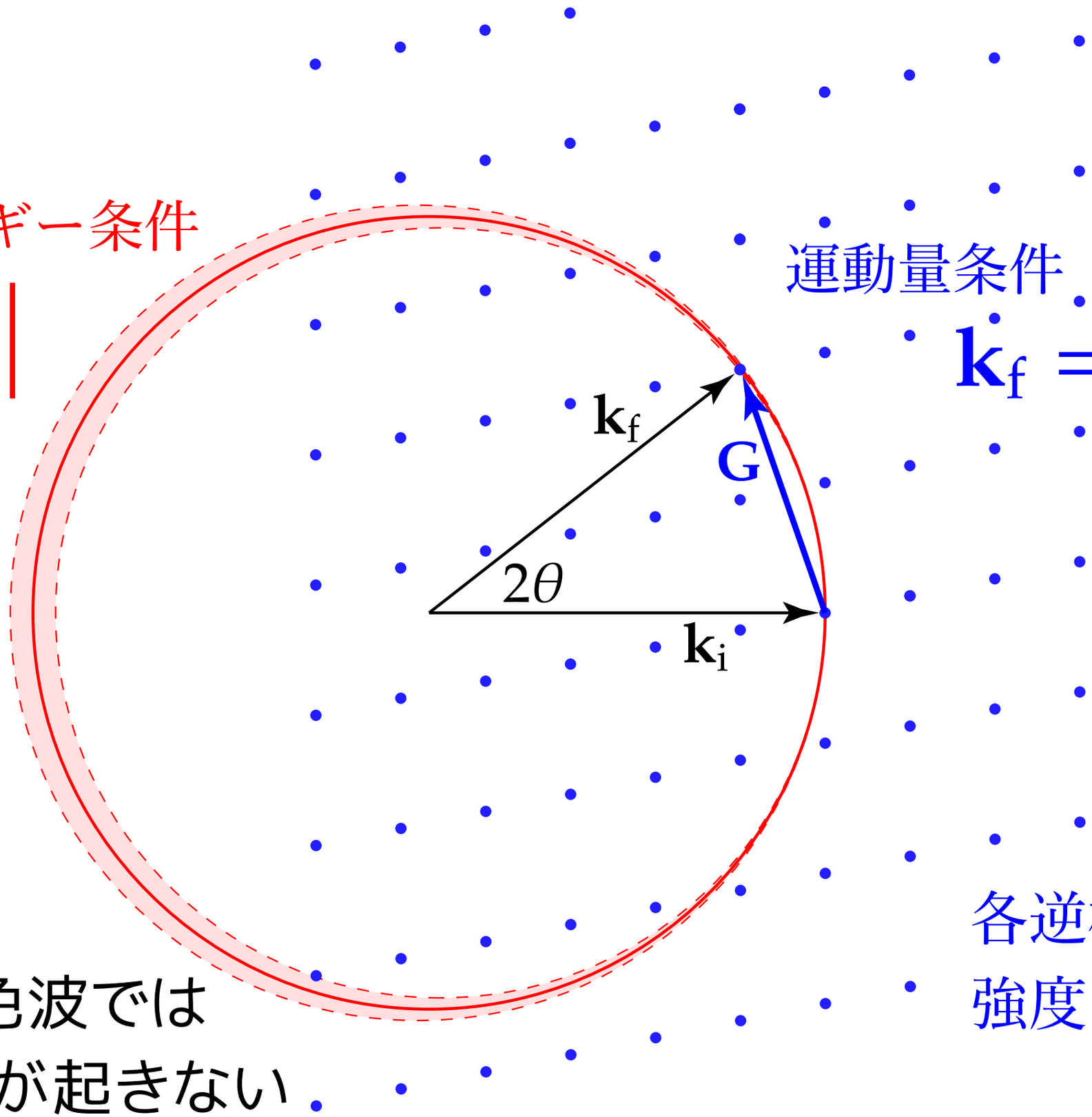
エバルトの作図

エネルギー条件

$$|\mathbf{k}_f| = |\mathbf{k}_i|$$

運動量条件

$$\mathbf{k}_f = \mathbf{k}_i + \mathbf{G}$$



各逆格子点の
強度は $F_0(\mathbf{G})$

単結晶・単色波では
滅多に回折が起きない

回折のしくみ

(x, y, z, t) (k_x, k_y, k_z, ω)

実格子 $\mathbf{R}$ $\xleftrightarrow{\text{ブラベー格子}}$ $\mathbf{G}$ 逆格子

実空間と逆空間をつなぐ直行便

$$\mathbf{k}_f = \mathbf{k}_i + \mathbf{G}$$

運動量

$$|\mathbf{k}_f| = |\mathbf{k}_i|$$

エネルギー

逆空間の壁

舞台は逆空間

残された謎

・ブラッグ条件との関係?　結晶面の正体?

・わかったような、わからんような。
理屈は結構だが、どうも実感が湧かない。

次回

逆空間の壁

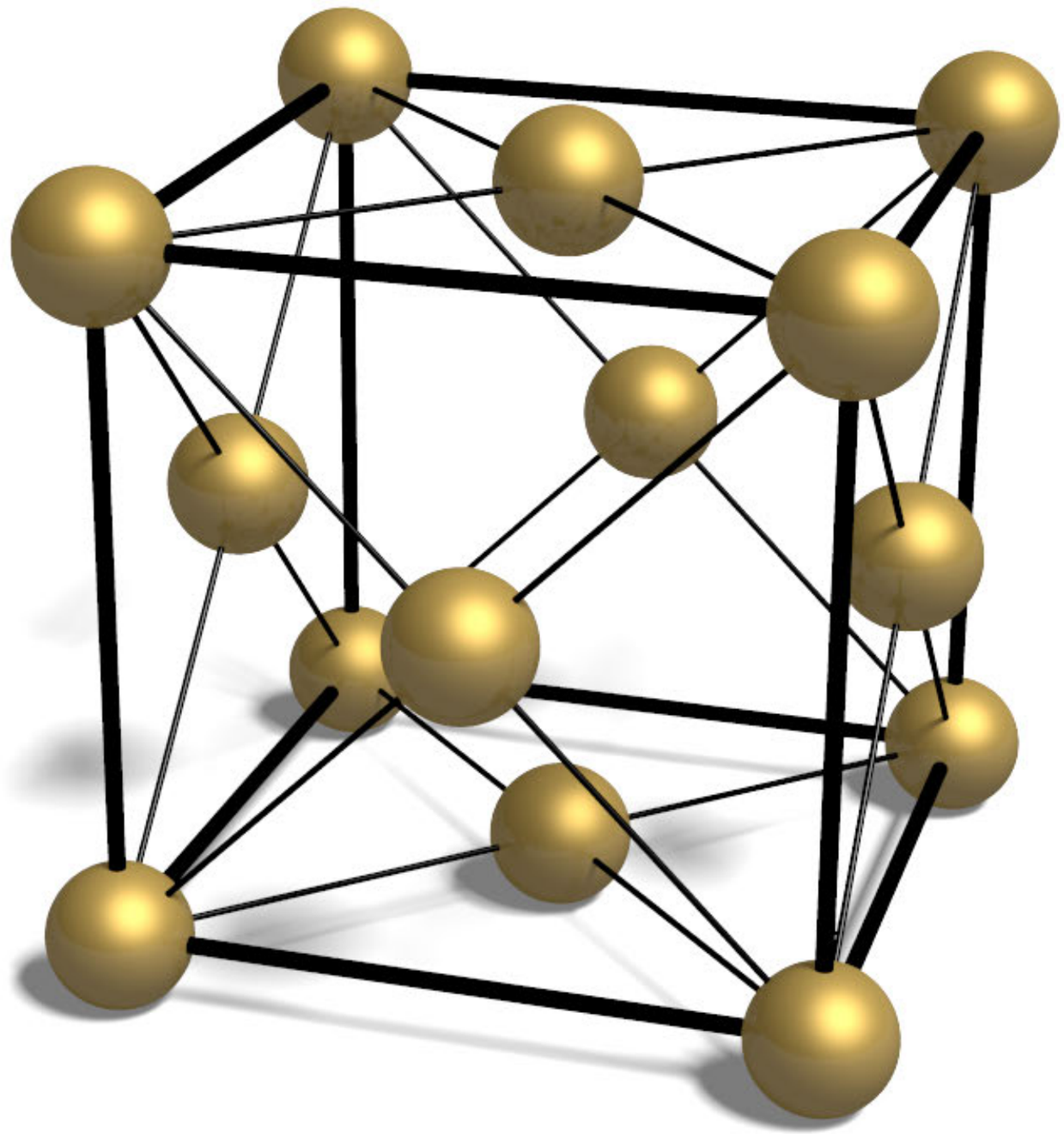
第6講　逆空間

次回

きみは突破できるか

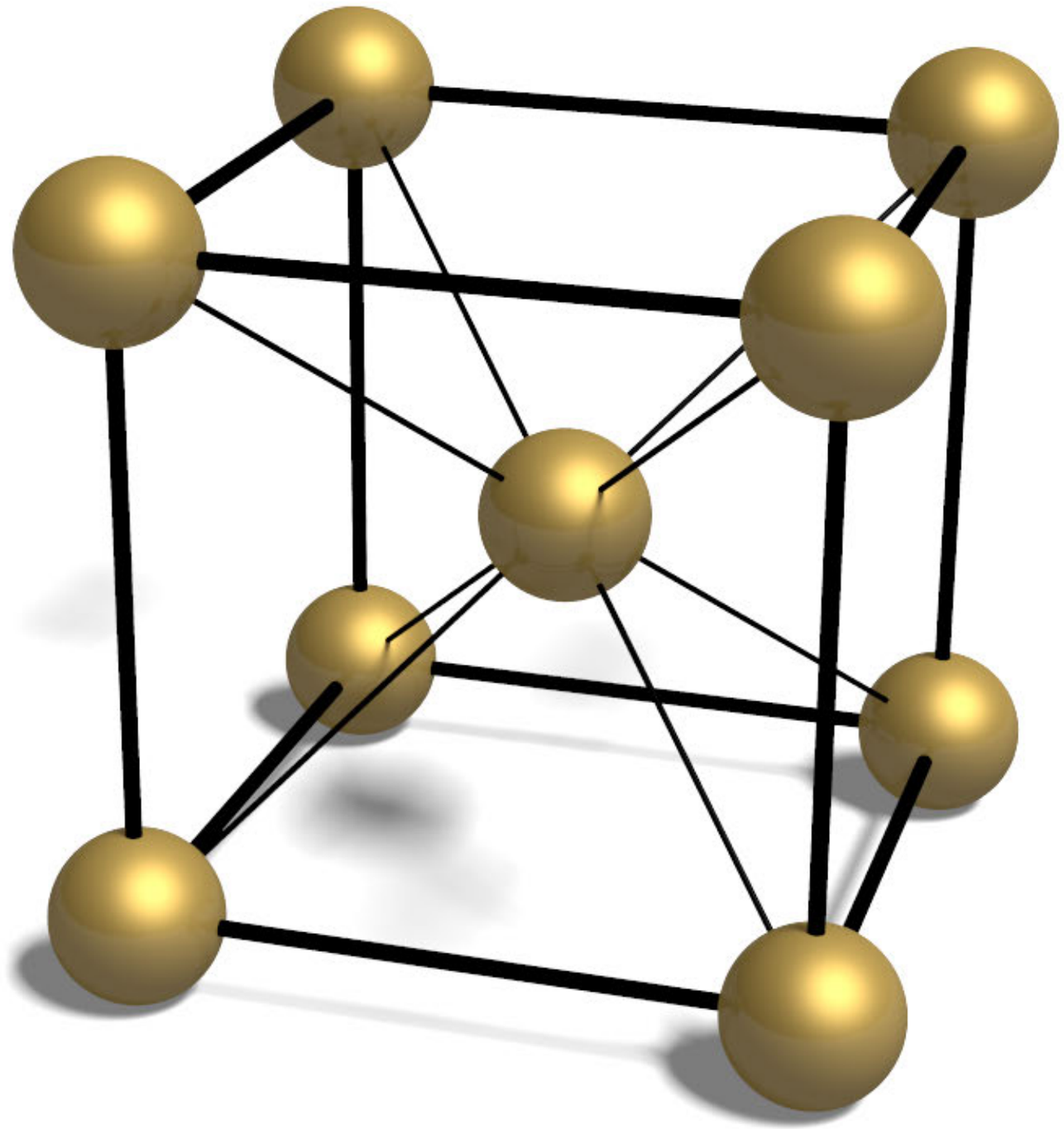
第6講　逆空間

face-
centered
cubic



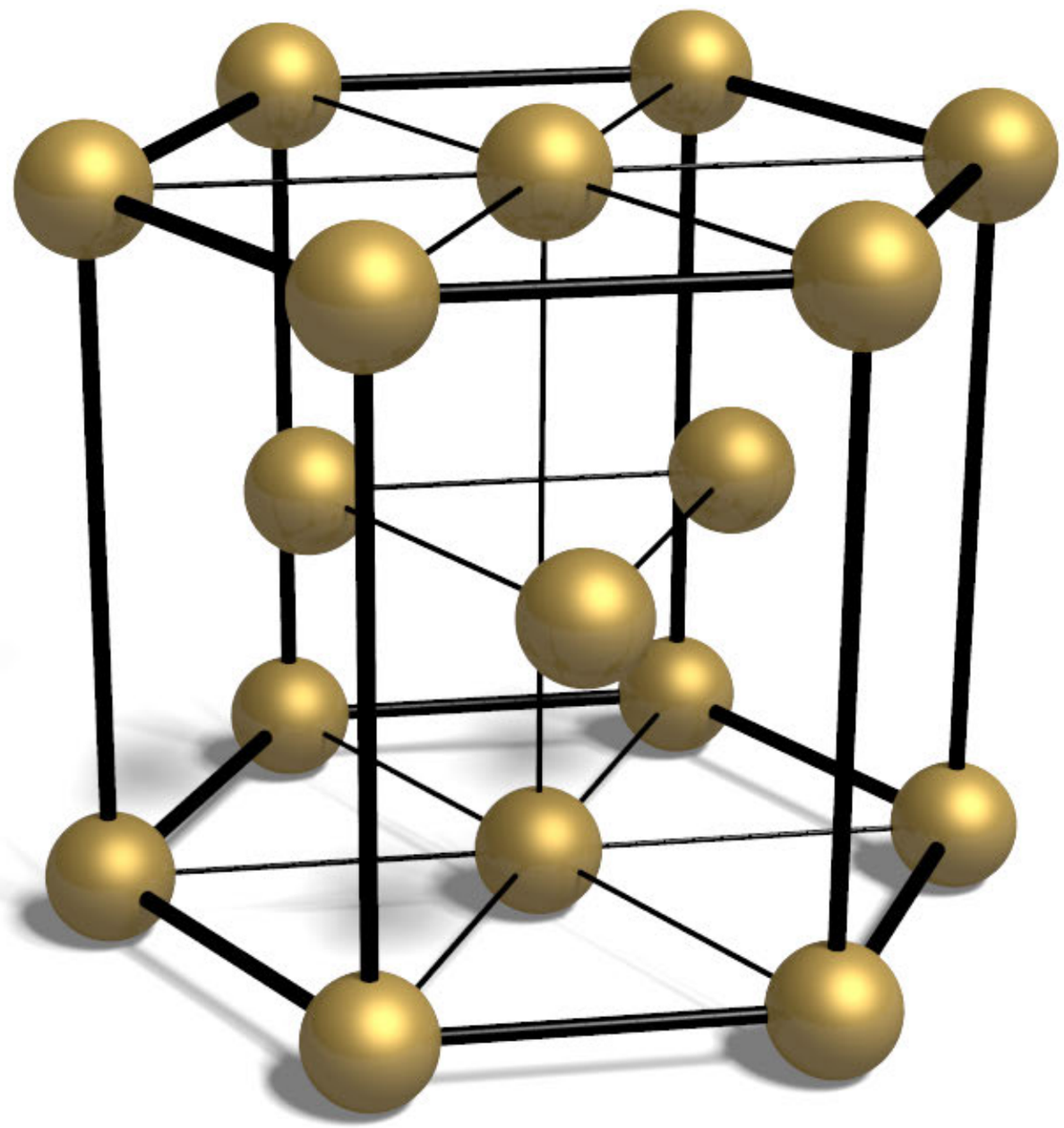
Cu, Ag, Au, Al, Ni, Pd, Pb, Pt, Ca など。

body-
centered
cubic



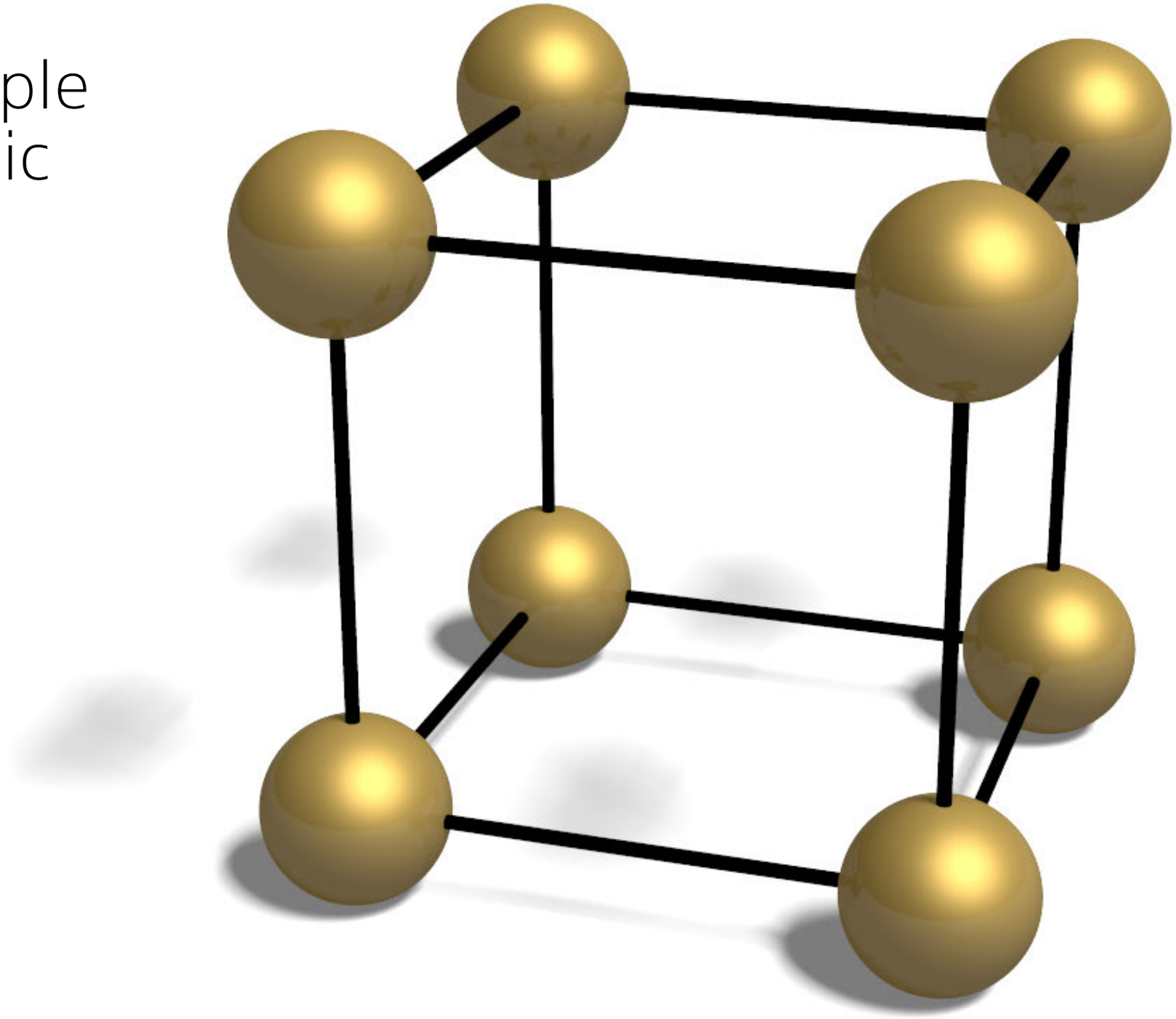
Fe, Cr, Mo, W, V, Ta, Na, K, Ba, Cs, Li など。

hexagonal
closed
packing

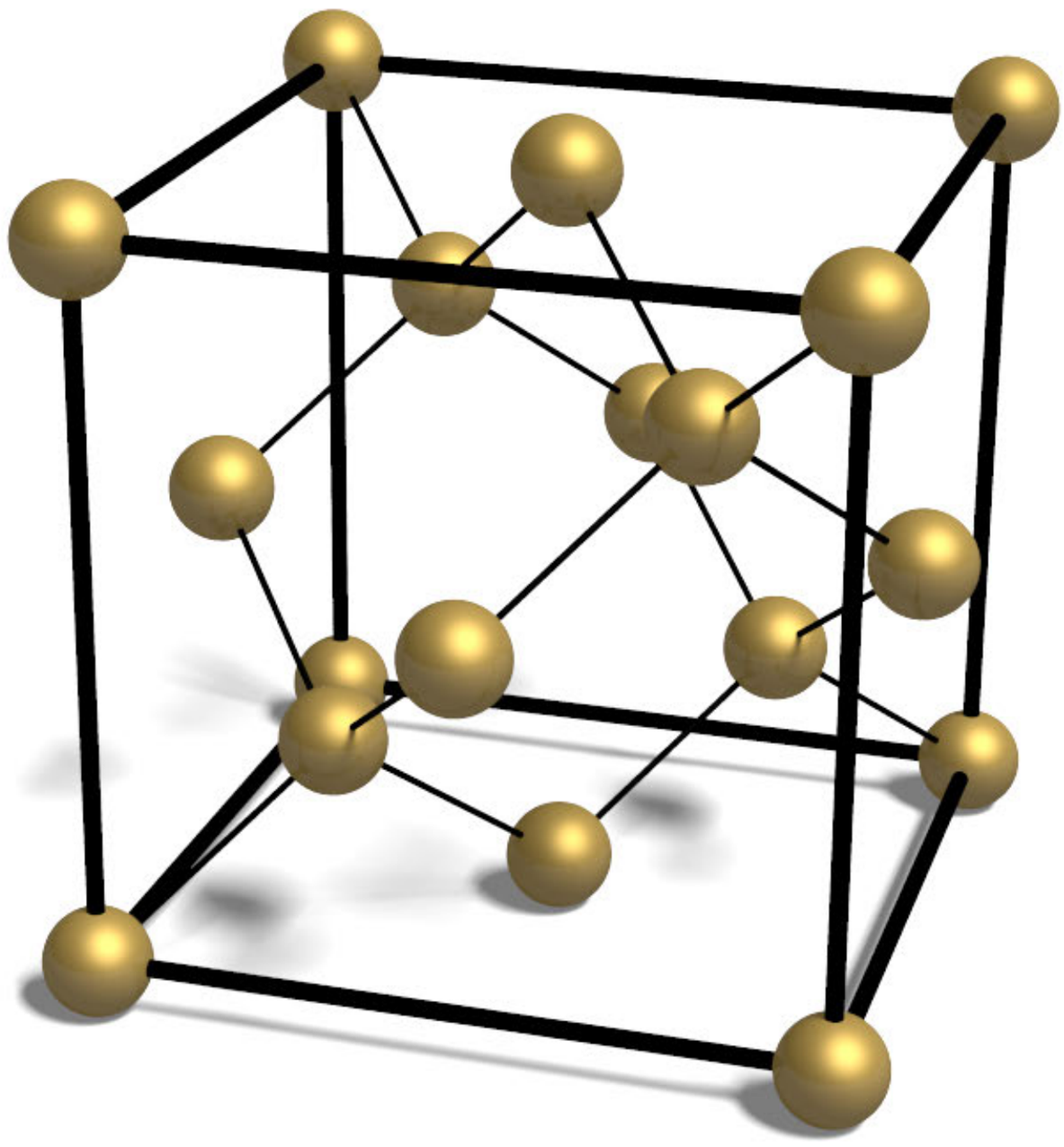


Be, Mg, Cd, Co, Zn, Ti, Zr, Hf など。

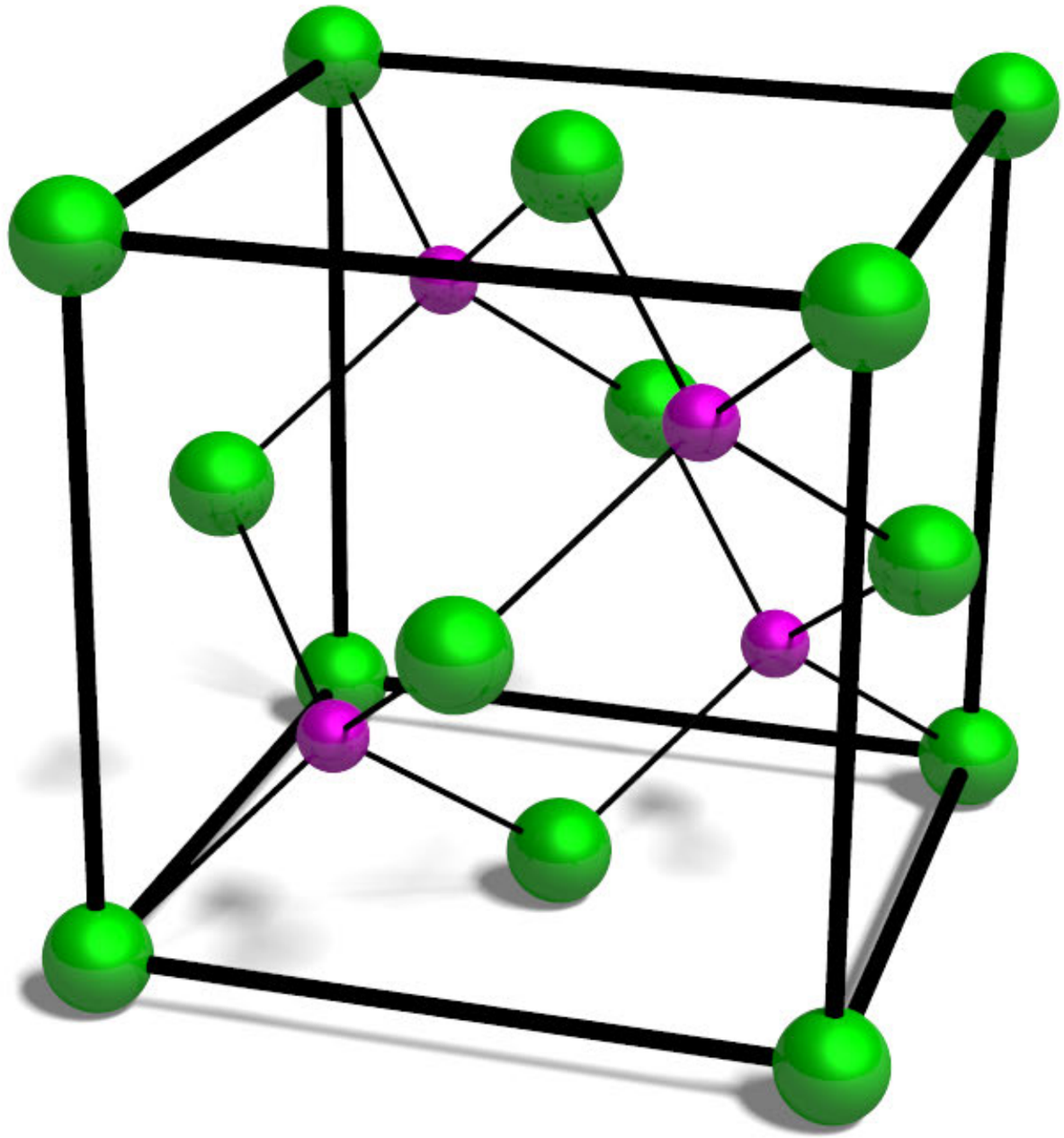
simple
cubic



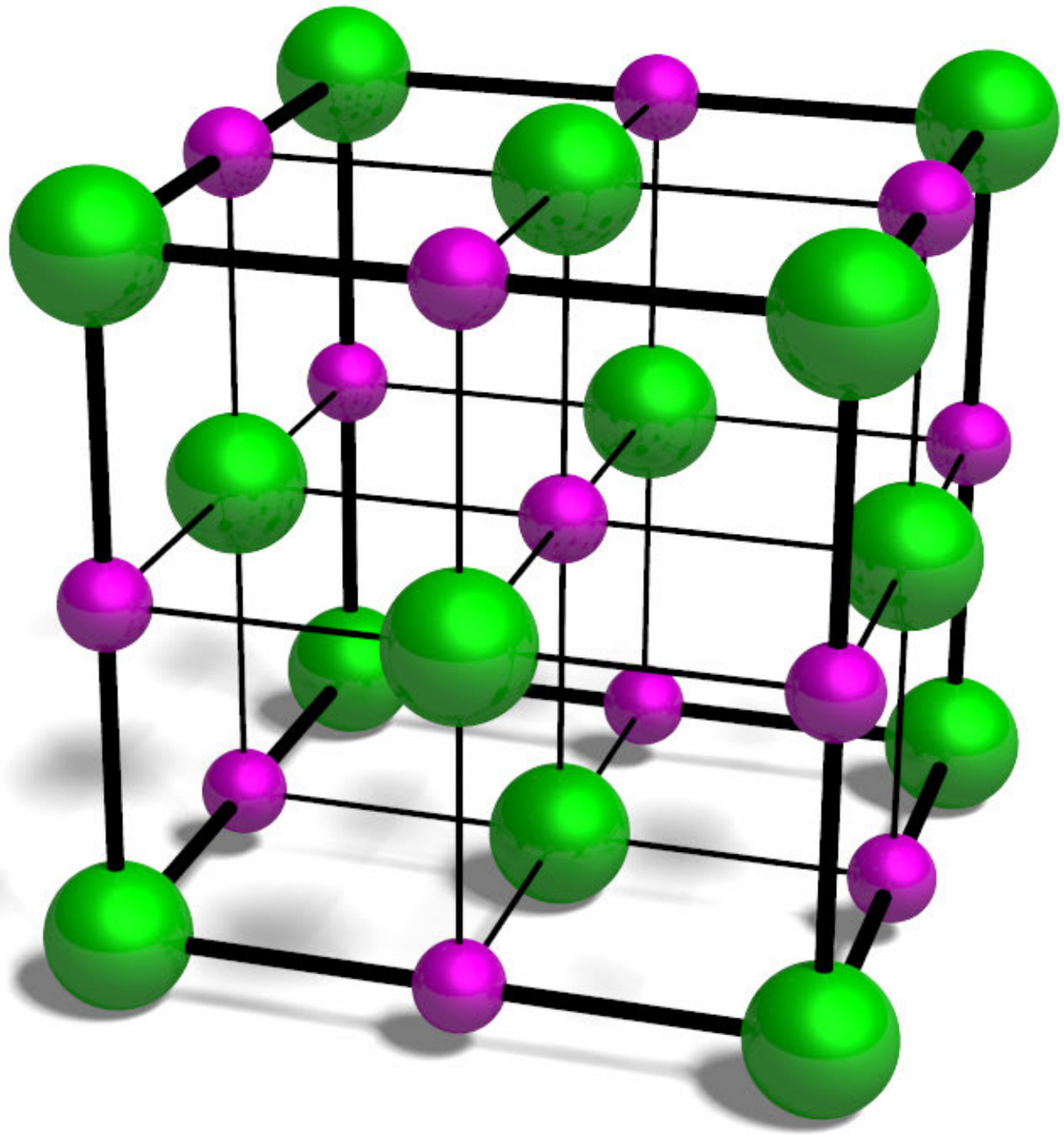
Po が知られている。



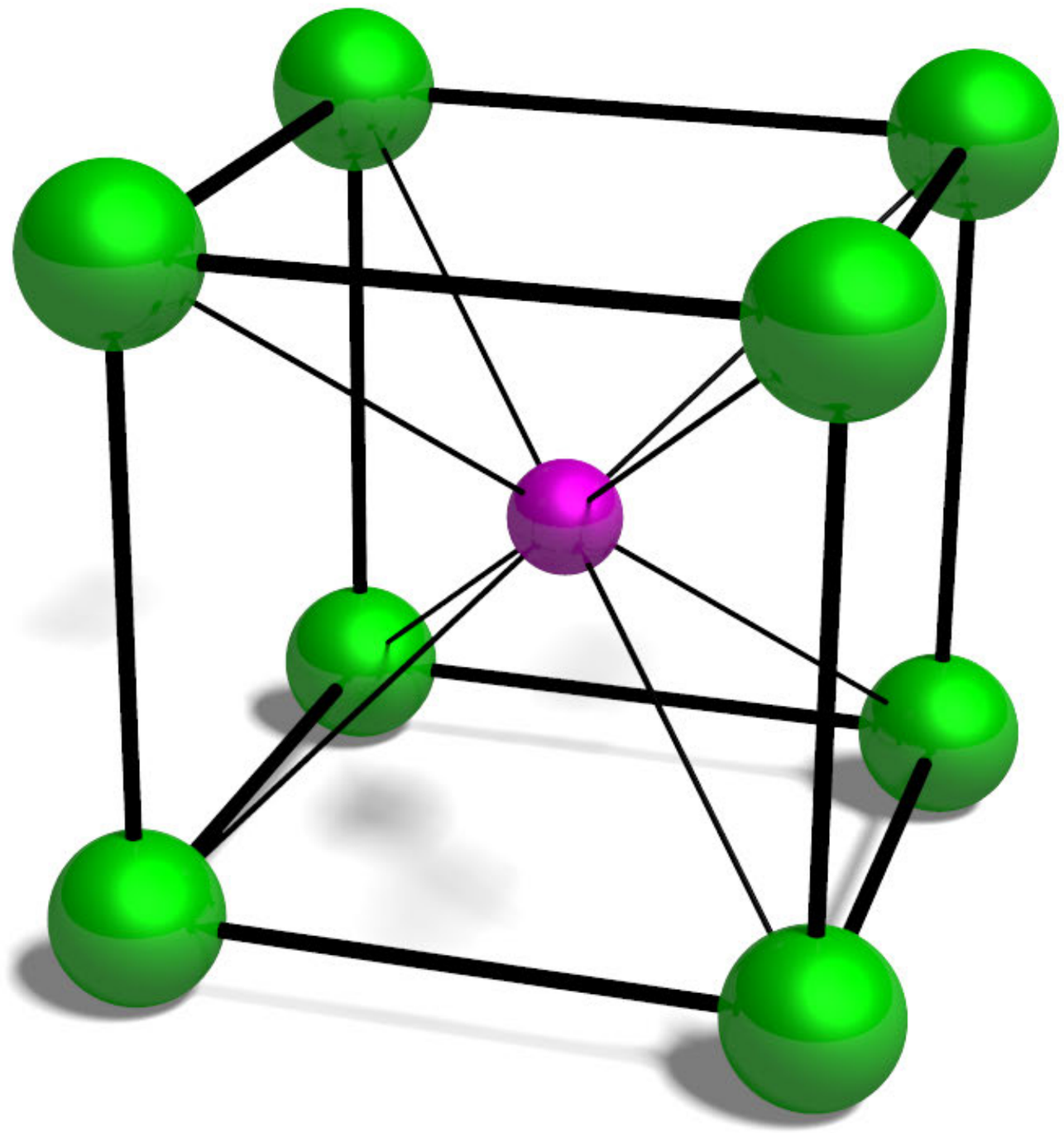
C, Si, Ge, Sn など。



SiC, BN, BP, BAs, AlP, AlAs, AlSb, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, InSb, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdS, CdTe, HgS, HgSe, HgTe, BeS, BeSe, BeTe, MnS, MnSe, CuF, CuCl, CuBr, CuI, AgI など。



LiF, LiCl, LiBr, LiI, NaF, NaCl, NaBr, NaI, KF, KCl, KBr, KI, RbF, RbCl, RbBr, RbI, CsF, AgF, AgCl, AgBr, MgO, MgS, MgSe, CaO, CaS, CaSe, CaTe, SrO, SrS, SrSe, SrTe, BaO, BaS, BaSe, BaTe など。



CsCl, CsBl, CsI, TlCl, TlBr, TlI など。