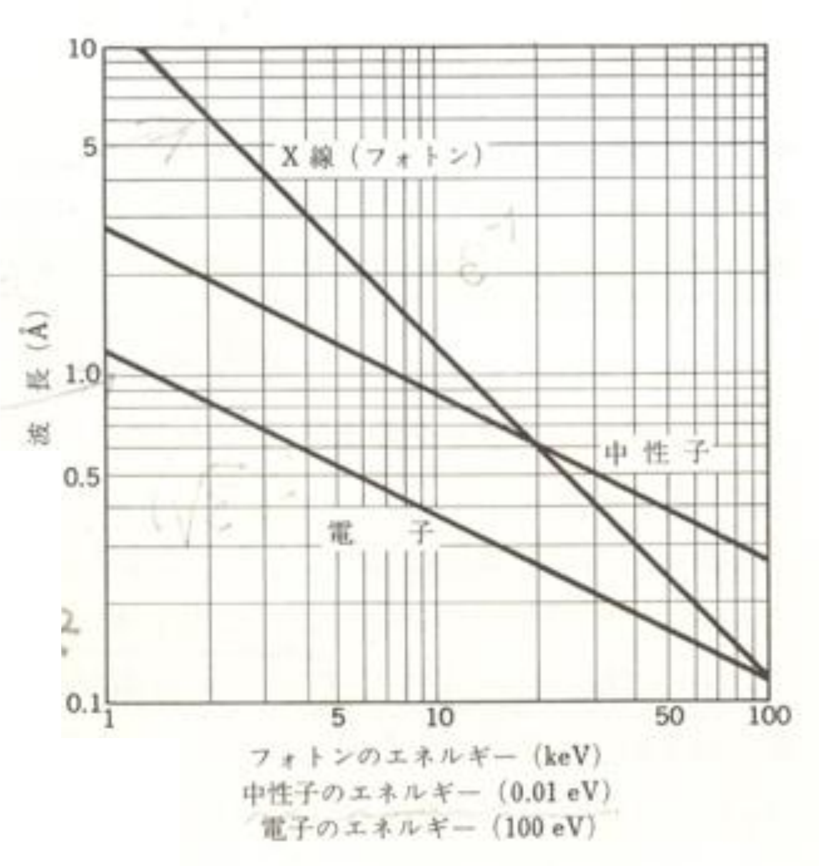
「固体物理学入門」　C. Kittel・（株)丸善
2023年度秋学期・大学院講義客員教授　田中基彦

第2章　波の回折と逆格子



[問題]
X線(フォトン), 中性子, 電子の
波長と光子のエネルギーの関係

各エネルギーの範囲は異なるが,
X線は中性子，電子などとは
直線の勾配が違う。

その理由はなぜか?
（質量の違いを考えよう）

[**答え**]　**質量が有限かゼロかが違う**

X線のとき　電磁波　質量はゼロ

$$\varepsilon = \frac{hc}{\lambda} = h\nu \quad \rightarrow \quad \lambda = \frac{hc}{\varepsilon}$$ ド・ブロイ波長

電子や中性子は　質量が有限である

$$p = \frac{h}{\lambda}$$ 「運動量は波長の逆数」<– 仮定として実は正しい！

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2} \qquad \therefore \ \lambda = \frac{h}{\sqrt{2m\varepsilon}}$$

傾きは，１乗，1/2 乗

◆ 波の回折

結晶構造と波長で決まる

- 長い波長のとき
  波の屈折
- 結晶と波長が同程度のとき
  ある波長のときだけ強めあう
  ブラッグの法則　$2d\sin\theta = n\lambda \quad \lambda \le 2d$ が条件

[**問題 図**3] CaF2の結晶で，波長1.16Aを使ってBraggの法則から層間の間隔，そして，n=1, 2でのBraggの法則を確かめよう。

[**問題 図**4] （図が分かりづらい）次のページ
Si粉末のとき，Braggの法則をn=1,2,3について確かめよう。
しかし，n=1の場合，どこを指しているのか？

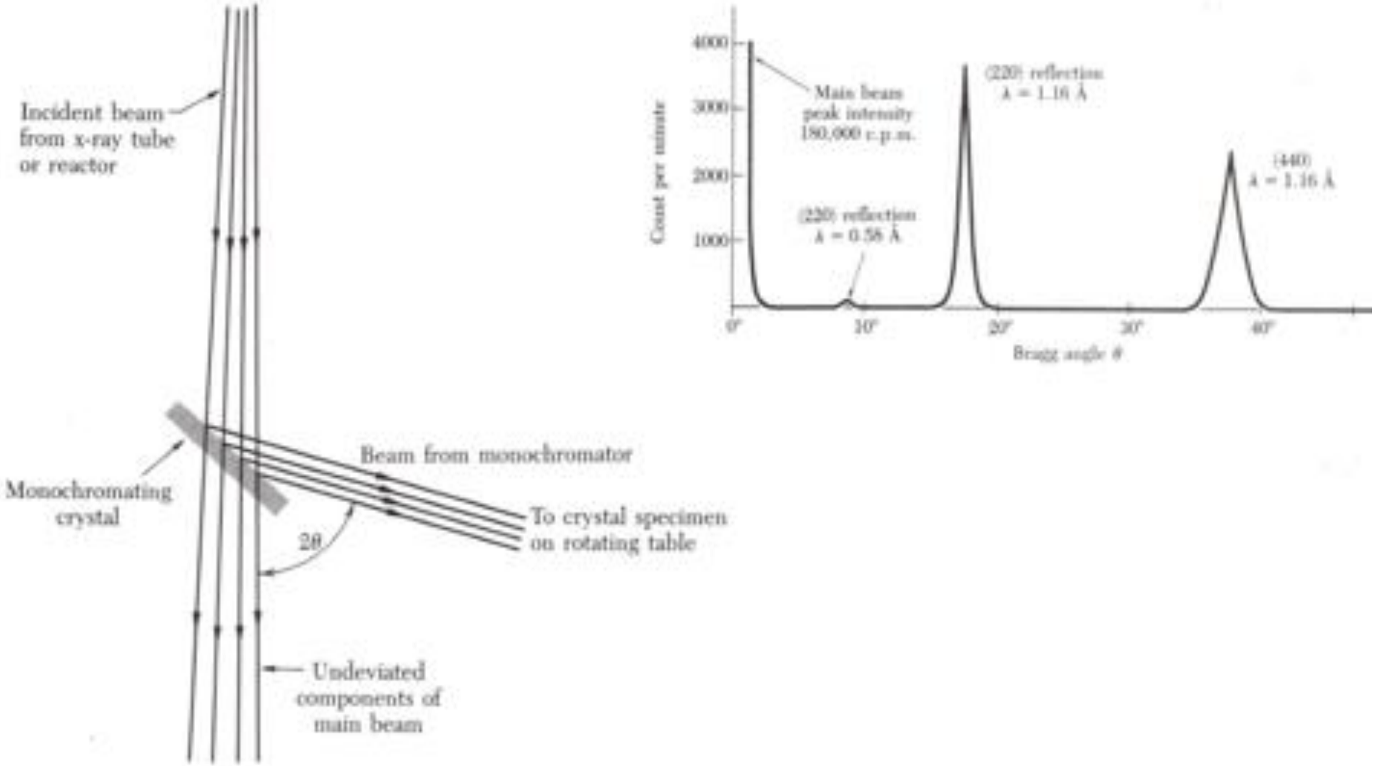


Figure 3 Sketch of a monochromator which by Bragg reflection selects a narrow spectrum of x-ray or neutron wavelengths from a broad spectrum incident beam. The upper part of the figure shows the analysis (obtained by reflection from a second crystal) of the purity of a 1.16 Å beam of neutrons from a calcium fluoride crystal monochromator. The main beam is that not reflected from the second crystal. (After G. Bacon.)

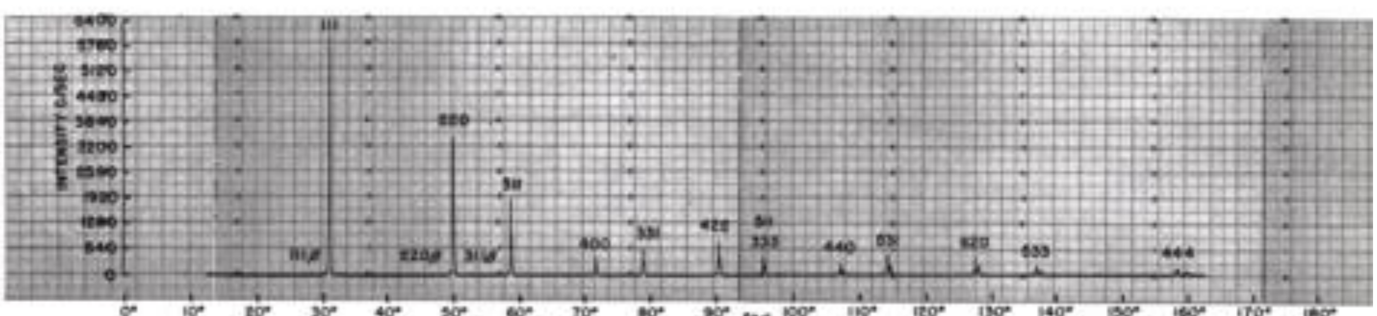


Figure 4 X-ray diffractometer recording of powdered silicon, showing a counter recording of the diffracted beams. (Courtesy of W. Parrish.)

図3　CaF$_2$の結晶　波長1.16Aを使い，Braggの法則から層の間隔，またn=1，2のときBraggの法則を確かめる。

$$\theta = 18^\circ \quad \sin\left(\frac{\pi 18}{180}\right) = \sin(0.31) = 0.31$$

$$d = \frac{\lambda}{2\sin\theta} = \frac{1.16}{2\times 0.31} = 1.9\mathrm{A}$$

$$\theta = 37^\circ \quad \sin\left(\frac{\pi 37}{180}\right) = \sin(0.65) = 0.60$$

図4　Siの粉末　n=1は紙の継ぎ目にあり，見えない。角度はn=1,2,3に対応。測定の中性子の波長は

$$\theta = 15^\circ \to \sin(\pi\theta/180) = \sin(0.26) = 0.26$$

$$d = 5.43\mathrm{A} = \lambda/2\sin\theta = \lambda/2\times 0.26 \to \lambda = 10\mathrm{A}$$

$$\theta = 31^\circ \to \sin(0.56) = 0.53$$

$$\theta = 51^\circ \to \sin(0.91) = 0.79$$

◆ フーリエ解析

$$n(x+a)=n(x)$$

$$n(x)=n_0+\sum_p (C_p \cos 2\pi px/a + S_p \sin 2\pi px/a)$$

pは正の整数，aは周期，$2\pi p/a$ は**結晶の逆格子**

複素数で表示する

$$n(x)=\sum_p n_p \exp(i\,2\pi px/a)$$

pは**整数**, n_p 複素数　実数とするため,

$$n^*_{-p}=n_p$$

3次元の場合は,　$n(r)=\sum_G n_G \exp(i\,\mathbf{G}\bullet\mathbf{r})$

$$n_G=\frac{1}{V_c}\int_{cell} n(\mathbf{r})\exp(-i\,\mathbf{G}\bullet\mathbf{r})\,dV$$

逆格子ベクトル　G

逆格子の軸ベクトル　格子ベクトルから

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \bullet (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \bullet (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}$$

$$\mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \bullet (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}$$

$$a_i b_j = 2\pi \delta_{ij}$$

$$\mathbf{G} = \mathbf{b}_1 \mathbf{v}_1 + \mathbf{b}_2 \mathbf{v}_2 + \mathbf{b}_3 \mathbf{v}_3$$

$$\exp(i\mathbf{G} \bullet \mathbf{T}) = 1$$

回折の条件

$$F = \int n(\mathbf{r}) \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \bullet \mathbf{r}]\, dV = \int n(\mathbf{r}) \exp[-i\, \Delta\mathbf{k} \bullet \mathbf{r}]$$

$$-\Delta k = \mathbf{k} - \mathbf{k}' \quad \to \quad \mathbf{k} + \Delta\mathbf{k} = \mathbf{k}'$$

これより，3次元の n_G を使うと，

$$F = \sum_G \int n_G \exp[i(\mathbf{G} - \Delta\mathbf{k}) \bullet \mathbf{r}]$$

$$\therefore \ 2\mathbf{k} \bullet \mathbf{G} + G^2 = 0$$

ブリルアン･ゾーン　Brillouin zone

使うとき：電子のエネルギーバンド理論
素励起過程

◆**単純立方格子(sc) の逆格子**

みずから逆格子

◆**体心立方格子(bcc) の逆格子**

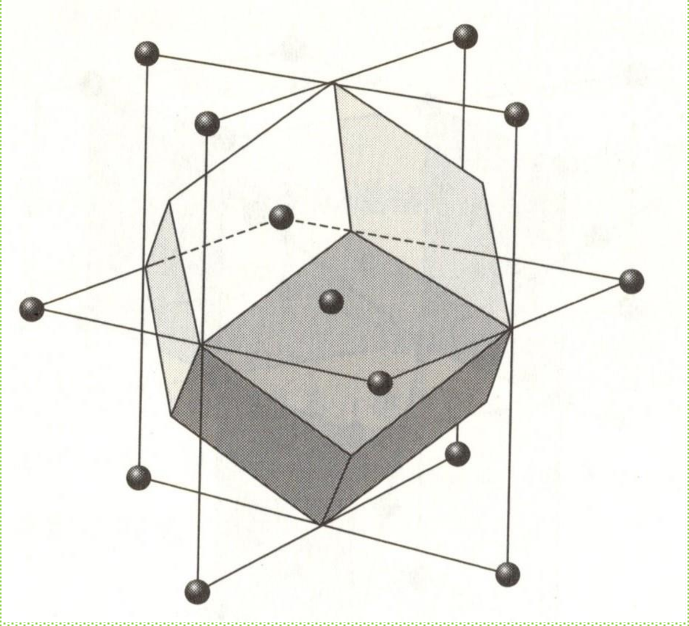
fcc格子は，bcc格子の逆格子

◆**面心立方格子(fcc) の逆格子**

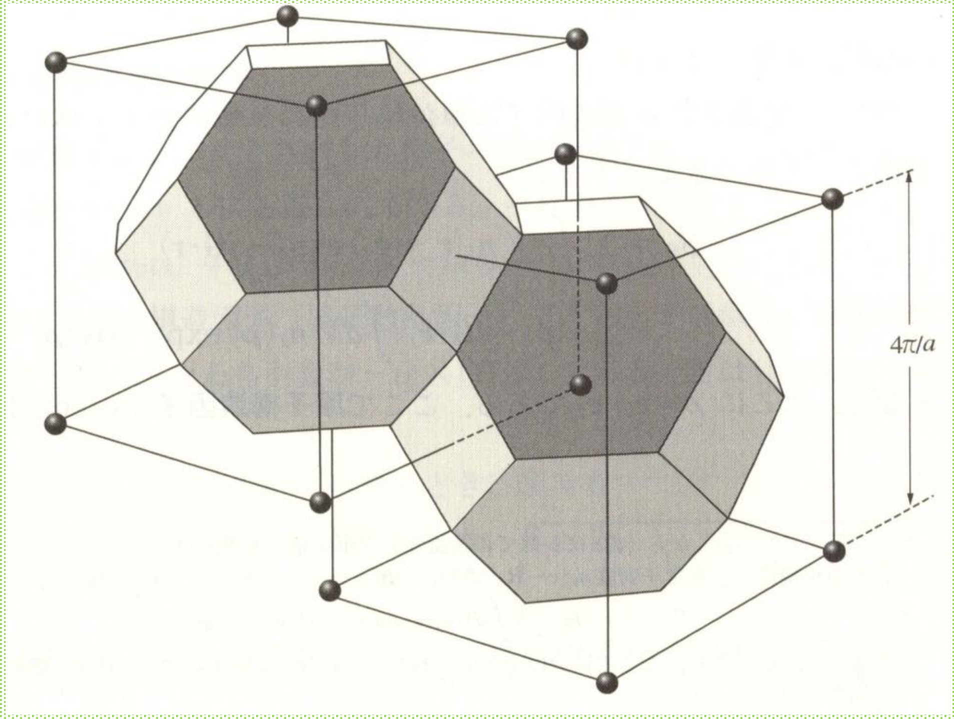
bcc格子は，fcc格子の逆格子

1^{st} Brillouin zone　閉じた面

bcc crystal　　　fcc crystal



12面体



8面体

この章まとめ

Braggの反射条件
逆格子の基本ベクトル
第1 Brillouinゾーン
結晶格子の逆格子の形