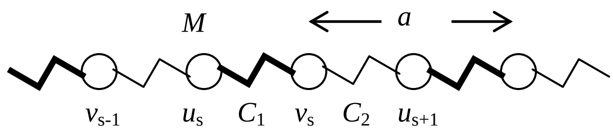
固体物理学Ⅰ　演習問題 2012.6.11　　　　　主専攻　学籍番号　　　　　　　　氏名

１．同種原子にバネ定数 C_1, C_2 のバネを交互につないだ一次元格子（右図）が、角振動数ω、波数 K で定常振動しているとき、ωと K の間に成り立つ関係式を導け。ヒント：s 番目バネの両端で変位 u_s、v_s となる 2 原子について運動方程式を考え、定常振動解を代入。



$$M\frac{d^2u_s}{dt^2}=C_2(v_{s-1}-u_s)+C_1(v_s-u_s)$$

$$M\frac{d^2v_s}{dt^2}=C_1(u_s-v_s)+C_2(u_{s+1}-v_s)$$

定常状態の振動解として、$u_s=u\exp\bigl(i(sKa-\omega t)\bigr)$、$v_s=v\exp\bigl(i(sKa-\omega t)\bigr)$を仮定して上式に代入すると、

$$-\omega^2Mu=(C_2e^{-iKa}+C_1)v-(C_1+C_2)u$$
$$-\omega^2Mv=(C_1+C_2e^{iKa})u-(C_1+C_2)v$$

これらはu,vに関する連立方程式であり、u,vに対して自明な解とならないようにするためには

$$\begin{vmatrix}(C_2+C_1)-M\omega^2 & -(C_2e^{-iKa}+C_1)\\ -(C_1+C_2e^{iKa}) & (C_2+C_1)-M\omega^2\end{vmatrix}=0$$

$$\therefore M^2\omega^4-2M\omega^2(C_2+C_1)+2C_1C_2(1-\cos Ka)=0$$

上式をC_1C_2で割ったものに$M/C_1=M_1/C$、$M/C_2=M_2/C$の変換を施すと、教科書 P.106(22)と同じ式となる。

２．上の一次元格子において、K=0 付近とゾーン境界付近での音響モードと光学モードの振動の様子を図示せよ。

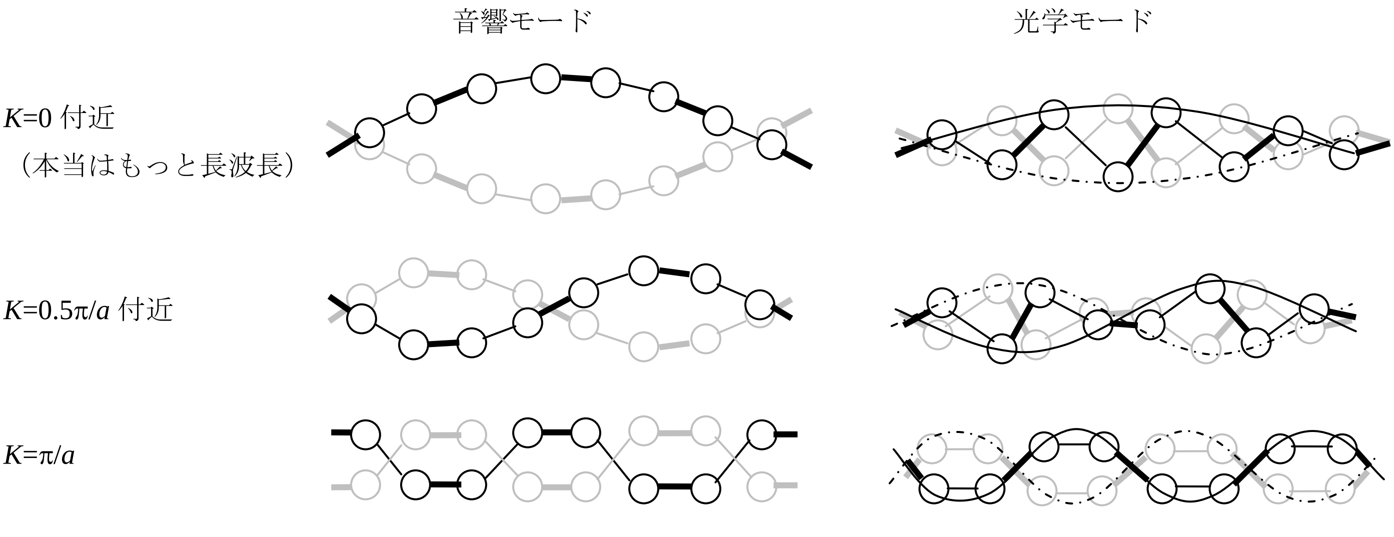
K=0 付近：格子振動の波長>>結晶周期となり、結晶は連続体と見なせる

ゾーン境界付近：格子振動の波長～結晶周期となり、不連続性（結晶周期性）の影響が際立ってくる

音響モード：隣接する原子（イオン）が同位相で変位

光学モード：隣接する原子（イオン）が逆位相で変位

これらのことを踏まえて、横波として図示すると（バネは太線と細線に簡略化）、



Ge 結晶ではすべての原子の質量は同じであるにも関わらず、音響モードと光学モードが存在する（教科書 P.105 の図 8a 参照）。ダイヤモンド構造の[111]方位に注目すると、[111]方位と平行となる共有結合で結ばれる(111)面間と[111]方位と 120° の角度をなす共有結合で結ばれる(111)面間が交互に存在する（教科書 p.20 図 23 参照）。従って、ゲルマニウム結晶の[111]方位は隣接する(111)面が１．で考えたように異なる二つのバネでつながれたものと見なすことができるため、音響モードと光学モードが存在する。ちなみに音響モードは隣接する面間の対称（並進あるいは重心）運動、光学モードは反対称（相対）運動に対応する。