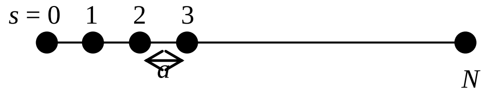
固体物理学Ⅰ　演習問題 2012.6.25　　　　　主専攻　学籍番号　　　　　　　　氏名

１．直線（長さ L ）上に、両端を固定して $N+1$ 個の原子を等間隔 a で並べる。この原子列において定常振動波が形成されているとき、単位波数内にいくつの振動モードが存在するか答えよ。



両端が固定端の定常波となるためには、定常波の波長を λ とすると、直線の長さ L が $\lambda/2$ の自然数倍になっていないといけない。すなわち、自然数 n を用いて、$L=(\lambda/2)\cdot n$ となる必要がある。これより $\lambda_n=2L/n$。波数に変換して考えると、$K_n=2\pi/\lambda_n=(\pi/L)n$ となり、K_n は $\Delta K=\pi/L$ の等間隔で存在していることが分かる。従って、単位波数あたりには、$1/(\Delta K)=L/\pi$ 個の異なる値の K_n （異なる振動モード）が存在する。
ここで、n の取りうる範囲について考える。無限に続く原子列においては、その振動として意味のある最短の波長の最小は $2a$ （隣接する原子が互いに逆位相で運動する場合）であり、これより $\lambda_{\min}=2a=2L/n_{\max}=2(Na)/n_{\max}$ となって $n_{\max}=N$ と求まる。しかしながら、有限の長さの原子列でかつ両端が固定されている場合では、$\lambda_{\min}=2a$ とするとすべての原子が振動出来なくなってしまう（隣接する原子が互いに逆位相で運動しなければいけないのに両端は動かないため）。そのため、n の最大値として N は不適である。よって n が取りうる範囲は1から $n_{\max}=N-1$ までとなる。別の考え方として、動きうる原子の数は固定した両端の原子２個を除いた $N+1-2=N-1$ （隣接する原子の間隔の数に等しい）であるので、その自由度から考えて $n_{\max}=N-1$ となる。

２．上で求めた結果を元にして、格子定数 a の単純立方格子結晶（全原子数 N>>1、一辺の長さ L の直方体で体積 V とする）を連続体と見なしたときの格子振動に対する状態密度を求めよ（振動の偏りは１つのみとして取り扱って良い）。

三次元空間における格子振動に対する任意の波数ベクトルは、x,y,z 方向の波数ベクトルの一次結合として $\vec{K}=\vec{K}_x+\vec{K}_y+\vec{K}_z$ と表わされる。ここで、上の一次元での結果から、自然数の組 n_x,n_y,n_z と x,y,z 方向の単位ベクトル $\vec{e}_x,\vec{e}_y,\vec{e}_z$ を用いて、$\vec{K}_{n_n n_y n_z}=\dfrac{\pi}{L}\left(n_x\vec{e}_x+n_y\vec{e}_y+n_z\vec{e}_z\right)$ と表わすことができる。このようにして表わされる $\vec{K}_{n_n n_y n_z}$ は、$\vec{K}$ 空間において体積 $(\pi/L)^3$ につき１個存在することになるので、単位体積当たりで考えると $(L/\pi)^3=V/\pi^3$ 個の異なる $\vec{K}_{n_n n_y n_z}$ （すなわち異なる振動モード）が存在する。終端固定の場合に取りうる n_x,n_y,n_z は零または正の数であることに注意して、半径 K の球で x,y,z が正の領域の体積内に存在するモードの数を求めると、$\dfrac{1}{8}\dfrac{4\pi}{3}K^3\left(\dfrac{V}{\pi^3}\right)=\dfrac{VK^3}{6\pi^2}$ となる。これが振動の自由度の数に相当する。上の両端固定の一次元の場合が示すように、振動の自由度は動きうる原子の数に等しい。終端固定した三次元では表面を除いた原子の数に等しいが、N>>1 なので表面の原子の数も含めて N と近似する。ゆえに、$N=\dfrac{VK^3}{6\pi^2}$。連続体近似では格子振動の位相速度 v_p を用いて波数と角振動数 ω の関係が $K=\omega/v_p$ となるので、$N=\dfrac{V}{6\pi^2}\left(\dfrac{\omega}{v_p}\right)^3$ （この関係式を変形すると、$\omega_D=\left(\dfrac{6\pi^2 N}{V}\right)^{1/3}v_p$ とデバイの遮断周波数が定められる）。従って、$D(\omega)=\dfrac{dN}{d\omega}=\dfrac{V\omega^2}{2\pi^2 {v_p}^3}$。