

計算物理学 第五单元レポート

61908697 佐々木良輔

1 6-A.

1.1 プログラムについて

数値計算プログラムにはサンプルプログラムである eigen1.f90 を用いた。また単種原子のときの固有モードの厳密解を計算するプログラムを作成した。プログラムの PAD 図を図 1 に示す。またソースコードは補遺に示す。このプログラムではまず粒子数 N を ndim に格納した後, (1) 式に基づいて固有モードを計算している。ここで $N = 2n$ である。

$$\frac{\omega_j}{\omega_0} = \left| 2 \sin \frac{\pi j}{N} \right|, \quad j = -n+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, n \quad (1)$$

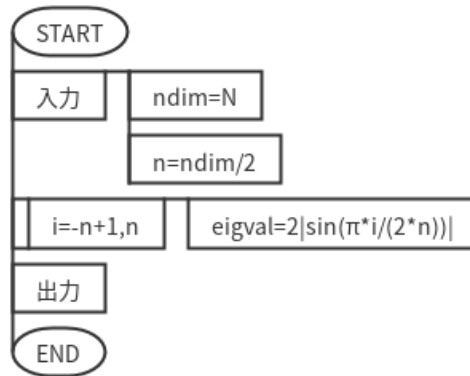


図 1 厳密解の計算プログラム

また状態密度の厳密解は (2) 式で与えられる。状態密度の図示においてはこの関数を gnuplot で直接描画した。

$$\frac{N(\omega)\omega_0}{N} = \frac{1}{\pi \sqrt{1 - x^2/4}} \quad (2)$$

1.2 結果

1.2.1 動作確認

$N = 10$ のとき各 j に対する固有モードは表 1 の通りである. 一方で数値計算によって得られた固有値は表 2 の通りである.

j	固有モード ω_j/ω_0
-4	1.902
-3	1.618
-2	1.175
-1	0.6180
0	0.000
1	0.6180
2	1.175
3	1.618
4	1.902
5	2.000

表 1 厳密解の結果

固有値 ω_j/ω
0.0000
0.6180
0.6180
1.175
1.175
1.618
1.618
1.902
1.902
2.000

表 2 数値計算の結果

1.2.2 状態密度の計算

図 2 から図 4 に数値計算及び厳密解によって得られた固有モードの状態密度を示す．それぞれヒストグラムの分割数を 20, 30, 40 とし, 数値計算は $N = 200$ で行った．

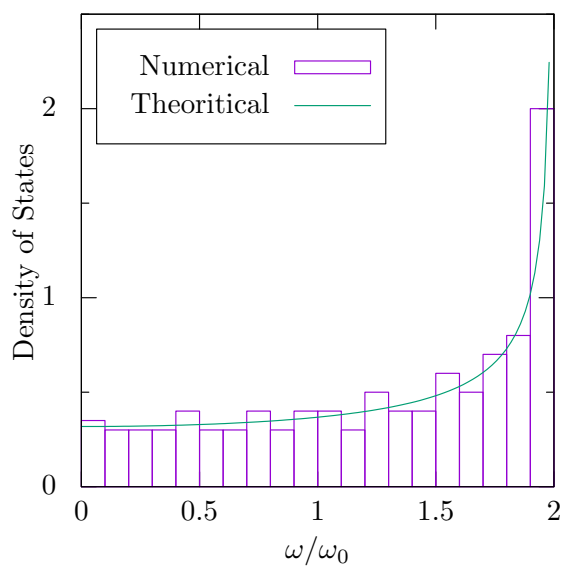


図 2 固有モードの度数分布 (分割数 20)

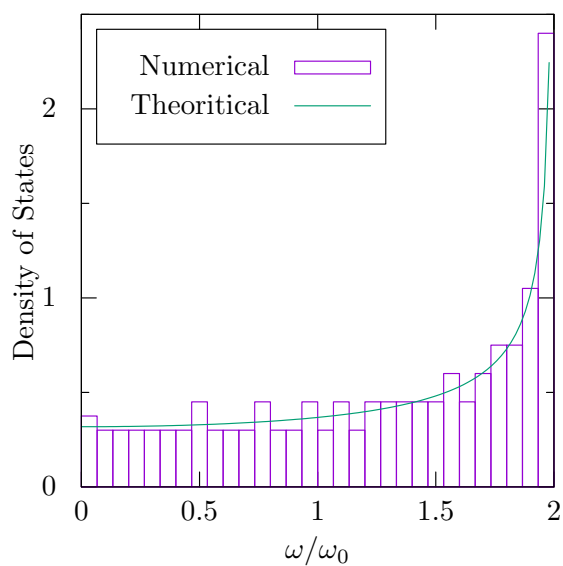


図 3 固有モードの度数分布 (分割数 30)

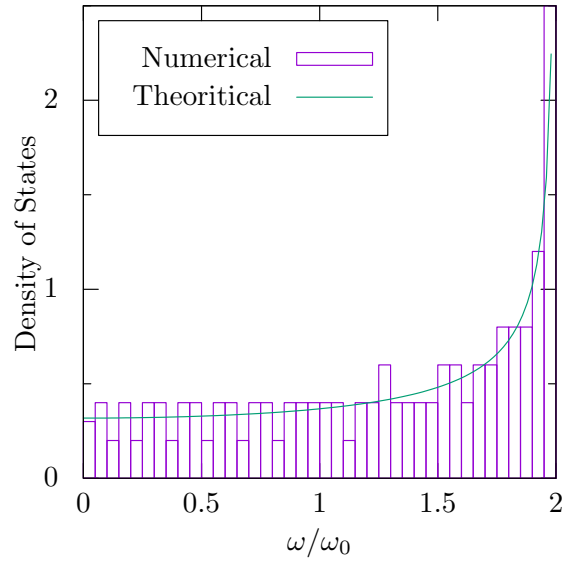


図 4 固有モードの度数分布 (分割数 40)

1.3 考察

1.3.1 動作確認

表 1 と表 2 を比較すると計算された固有値の順番は昇順にソートされているが得られた固有モードの値は一致している。このことから数値計算プログラムは正常に動作していると考えられる。固有値はソートされて出力されているため、直接分散関係を計算することは出来ないが度数分布を計算する上では問題ないと考えられる。

1.3.2 状態密度の計算

図 2 から図 4 より、数値計算により得られた状態密度と厳密解により得られた状態密度は同様の傾向を示していることがわかる。その傾向とは振動数の小さいところでは状態密度が小さく、振動数が上限に近づくにつれて急激に増大している。このことは図 5 の分散関係からも直感的に理解できる。図 5 は厳密解の計算プログラムを用いて $N = 30$ の場合に計算したものである。分散関係は (1) 式のような \sin 関数型であり 0 付近では急進に変化するが $\pi j/N \simeq \pm\pi/2$ となるに従ってその変化は緩やかになる。したがって k 空間を等間隔に離散化した時に $k \simeq 0$ では状態密度が小さくなり $k \simeq \pm\pi/a$ では状態密度が大きくなると理解できる。図 5 では $k \simeq 0$ のときほど点の間隔が広く、 $k \simeq \pm\pi/a$ では狭い様子がわかる。

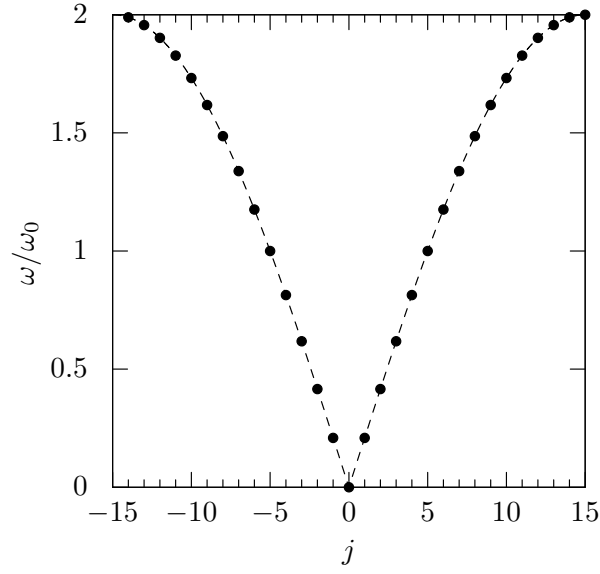


図 5 分散関係 ($N = 30$)

2 6-B.

2.1 プログラムについて

もともと単種原子の数値計算プログラムだった `eigen1.f90` を質量の異なる交互に並ぶ 2 種原子の場合に拡張した. プログラムの修正部分をソースコード A.2 に示す. 基本的にはサンプルプログラムと同様だが粒子の質量比 γ を変数 `gamma` に格納する点と, 係数行列の計算方法が

$$\begin{aligned}
 A_{ij} &= (2\delta_{i,j} - \delta_{i+1,j} - \delta_{i-1,j})b_i b_j \\
 b_i, b_j &= \begin{cases} 1 & (i, j : \text{奇数}) \\ \gamma^{-1/2} & (i, j : \text{偶数}) \end{cases}
 \end{aligned} \tag{3}$$

となっている点が修正されている.

2.2 結果

図 6 から図 9 に $\gamma = 1, 2, 4, 8$ のときの固有モードの状態密度を示す. それぞれヒストグラムの分割数を 30 とし, 数値計算は $N = 200$ で行った.

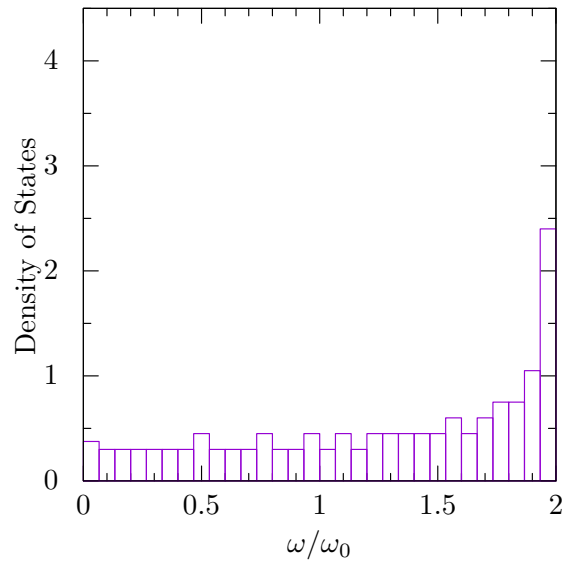


図 6 $\gamma = 1$ のときの状態密度

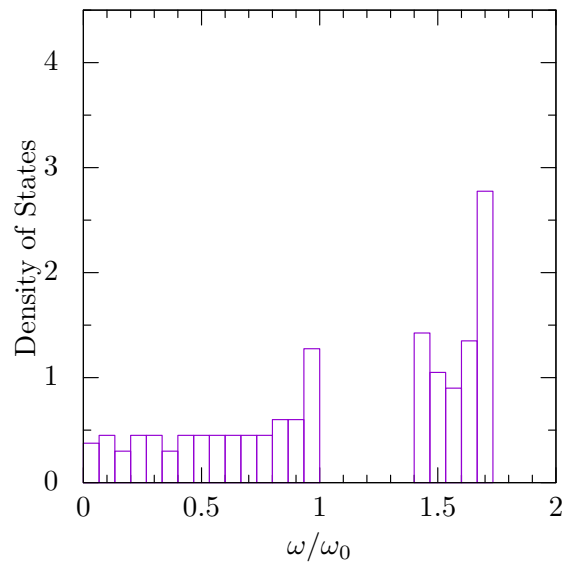


図 7 $\gamma = 2$ のときの状態密度

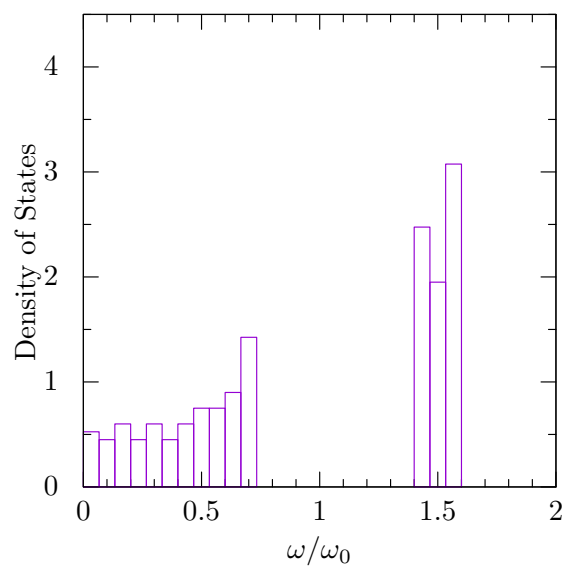


図 8 $\gamma = 4$ のときの状態密度

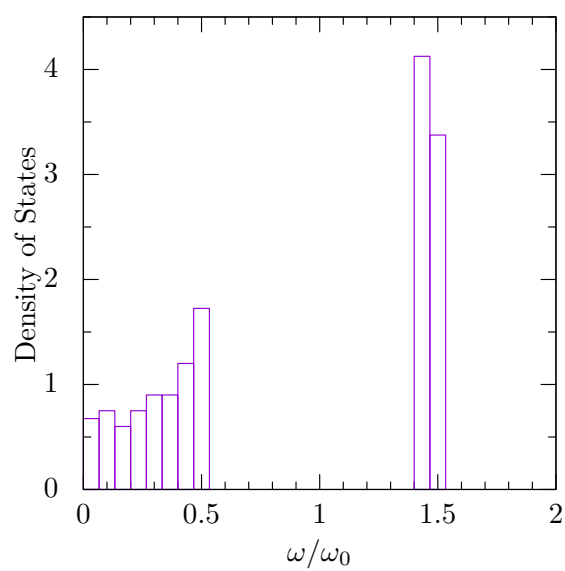


図 9 $\gamma = 8$ のときの状態密度

2.3 考察

2.3.1 プログラムの動作について

$\gamma = 1$ のときの結果は単種原子の場合の結果と一致するべきである, 図に問 6-A. で得られた分割数 30 のヒストグラムと図 6 を重ねた図を示す. この結果から前問で得られた結果と $\gamma = 1$ の場合の結果は完全に一致しており, 正常に動作していると考えられる.

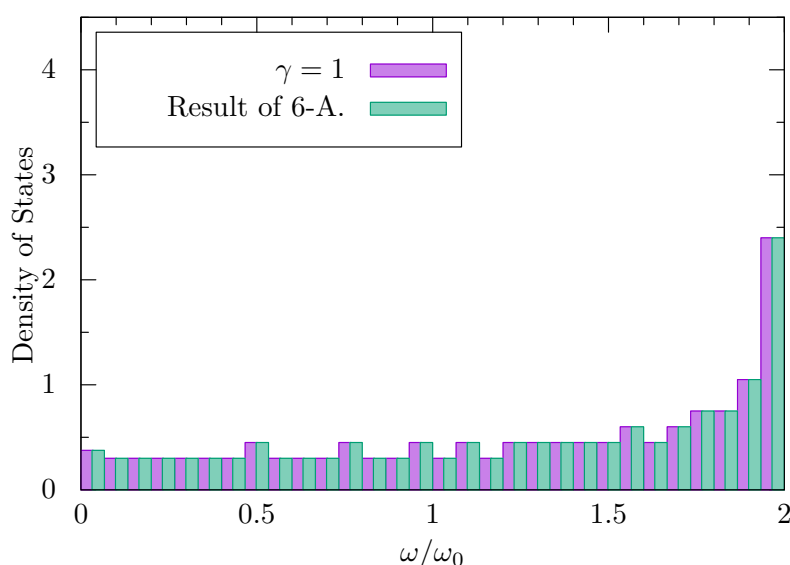


図 10 固有モードの状態密度

2.3.2 ギャップについて

図 7 から図 9 を見ると, 固有値のモードに 6 にはなかったバンドが発生していることがわかる. また図 11 に各 γ でのヒストグラムを重ねて描画した図を示す. この図から振動数が高い方のモードを光学フォノン, 振動数が低い方のモードを音響フォノンと呼ぶと

- γ が大きくなるとギャップが大きくなっている
- 光学フォノンの下限振動数は変化していない, すなわち音響フォノンの上限周波数が下がっている

ことがわかる. ここでこの問題設定における分散関係は以下で与えられる.

$$\frac{\omega}{\omega_0} = \sqrt{\frac{1}{\gamma} \left((1 + \gamma) \pm \sqrt{(1 + \gamma)^2 - 4\gamma \sin^2 ka} \right)} \quad (4)$$

+ 側の解が光学モード, - 側の解が音響モードであり, 各 γ に対して分散関係は図 12 のような形状になる. これを見ると γ の増大に伴って光学モードの最低振動数は変化しないのに対して, 音響

モードの最大振動数が小さくなっていることがわかる。これは図 11 の状態密度の結果と整合しており, 妥当であると考えられる。

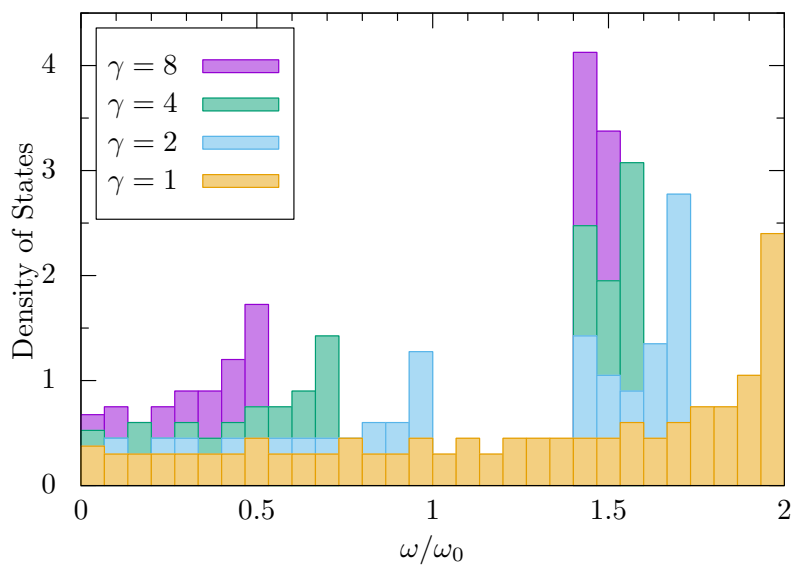


図 11 固有モードの状態密度

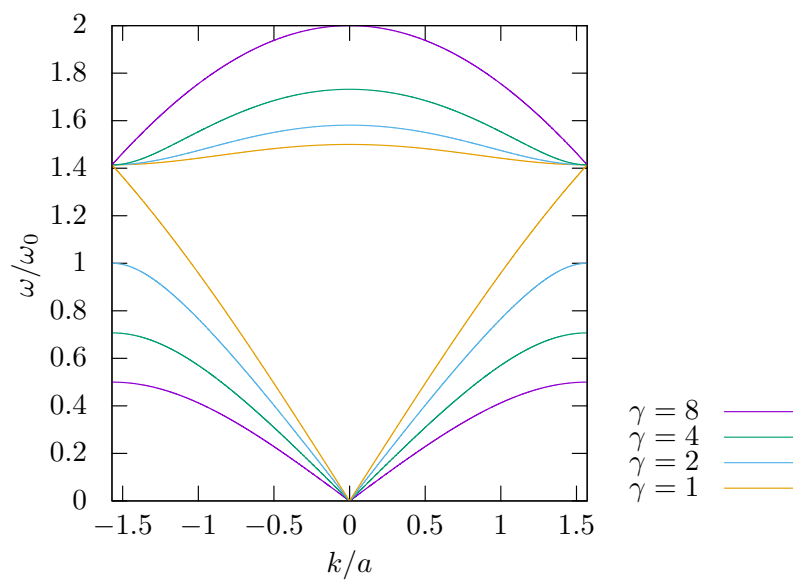


図 12 固有モードの状態密度

補遺 A ソースコード

ソースコード A.1 分散関係の厳密解計算プログラム

```
1 program main
2   implicit none
3   INTEGER :: ndim,n,i
4   DOUBLE PRECISION :: eigval
5   DOUBLE PRECISION, PARAMETER :: pi = 4d0*atan(1d0)
6   write(0,*) 'number of lattice points ?'
7   read (*,*) ndim
8
9   n=int(dble(ndim)/2d0)
10  do i=-n+1, n
11    eigval = 2*abs(sin(pi*dble(i)/(2*dble(n))))
12    write(*,*) i, eigval
13  end do
14 end program main
```

ソースコード A.2 2 種原子への拡張

```

1  ~~~~~中略~~~~~
2  real(kind=8) :: gamma,bodd,beven,bi,bj
3  !=====
4  ! nyuryoku
5  !=====
6  write(0,*) 'number of lattice points ?'
7  read (*,*) ndim
8  write(0,*) 'gamma ?'
9  read (*,*) gamma
10 !=====
11 ! kensa
12 !=====
13 if((ndim.gt.nmax).or.(ndim.lt.1)) then
14   write(*,*) 'error in ndim:',ndim
15   stop
16 endif
17 if(gamma.eq.0d0) then
18   write(*,*) 'error in gamma:',gamma
19   stop
20 endif
21 bodd = 1d0
22 beven = 1d0/sqrt(gamma)
23 !=====
24 ! gyoretsu-yoso no keisan
25 !=====
26 ! Make MATRIX A(j,i)=A(i*(i-1)/2+j)
27 do i=1,ndim
28   if(mod(i,2).eq.1) then
29     bi = bodd
30   else
31     bi = beven
32   endif
33
34   if(i.eq.ndim) then
35     ip=1
36   else
37     ip=i+1
38   endif
39   if(i.eq.1) then
40     im=ndim
41   else

```

```

42     im=i-1
43 endif
44 do j=1,i
45     if(mod(j,2).eq.1) then
46         bj = bodd
47     else
48         bj = beven
49     endif
50
51     k=(i*(i-1)/2)+j
52     if (j.eq.i) then
53         rmatrx(k)= 2.0d0
54     else if ((j.eq.ip).or.(j.eq.im)) then
55         rmatrx(k)=-1.0d0
56     else
57         rmatrx(k)= 0.0d0
58     end if
59     rmatrx(k) = rmatrx(k)*bi*bj
60 end do
61 end do
62 ~~~~~以下略~~~~~

```
