0.1 1 次元の結晶

N 個の質量 M の電子が 1 次元に並んでいるとする．s 番目の原子の格子点からのずれを Q_s とする．s 番目の原子の座標は平衡点での座標を $q^{(0)}$ として $q_s = q_s^{(0)} + Q_s$ と表される．平衡点近傍での原子間のポテンシャル U を Taylor 展開すると，

$$U = U(q_s^{(0)}, \cdots, q_N^{(0)}) + \frac{1}{2}\sum_{s,s'} \frac{\partial^2}{\partial q_s \partial q_{s'}} U(q_1, \cdots, q_N) \tag{0.1.1}$$

$$= U_0 + \frac{1}{2}\sum_{s,s'} U_{ss'} Q_s Q_{s'} + \cdots \tag{0.1.2}$$

である．ここで，原子間隔を a とすると $q_s^{(0)} = sa$ である．同様に平衡点からの運動量のずれを P_s とすると，ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_s \frac{\hat{P}_s^2}{2M} + \frac{1}{2}\sum_{s,s'} U_{ss'} \hat{Q}_s \hat{Q}_{s'} + U_0 \tag{0.1.3}$$

である．Heisenberg の運動方程式より，

$$\mathrm{i}\hbar \dot{\hat{Q}}_s = \left[\hat{Q}_s, \hat{H}\right] = \mathrm{i}\hbar \frac{\hat{P}_s}{M} \tag{0.1.4}$$

$$\mathrm{i}\hbar \dot{\hat{P}}_s = \left[\hat{P}_s, \hat{H}\right] = -\mathrm{i}\hbar \sum_{s'} U_{ss'} \hat{Q}_{s'} \tag{0.1.5}$$

である．よって，

$$\ddot{\hat{Q}}_s = -\sum_{s'} \frac{U_{ss'}}{M} \hat{Q}_{s'} \tag{0.1.6}$$

を得る．また，原子に働く力が原子間距離のみに依存すると仮定すると，$U_{ss'} = U_{s-s'} = U_{s's}$ となる．

s 番目の原子の運動方程式が求められたので，次に，基準振動を求める．$Q_s = u_s e^{-\mathrm{i}\omega t}$ とおき，**式** (0.1.6) に代入する．

$$-M\omega^2 u_s + \sum_{s'} U(s-s') u_{s'} = 0 \tag{0.1.7}$$

を得る．ここで，Bloch の定理より $u_s = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}ksa}$ であるので，これを使うと，

$$\omega^2 = \frac{1}{M}\sum_{s'} U(s-s') \mathrm{e}^{\mathrm{i}k(s-s')a} \tag{0.1.8}$$

$$= \frac{1}{M}\sum_{s'} U(s-s') \cos(k(s-s')a) \tag{0.1.9}$$

と，基準振動の角振動数が求まる．さらに，U は隣接する原子間のみに作用することにする t．つまり，U は $s - s' = \pm 1$ のときのみゼロでないとする．よって，

$$U(1) = U(-1) = -\frac{1}{2}U(0) \tag{0.1.10}$$

を得る．また，周期的境界条件より，

$$k = \frac{2\pi}{Na} n \tag{0.1.11}$$

である．以上より，

$$\omega^2 = \frac{U(0)}{M}(1 - \cos(ka)) \tag{0.1.12}$$

が求まる．

以上を用いて量子化すると，

$$\hat{Q}_s(t) = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_k}}\left(\hat{a}_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}ksa}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_k t} + \hat{a}_k^\dagger \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ksa}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_k t}\right) \tag{0.1.13}$$

$$\hat{P}_s(t) = -\sum_k \mathrm{i}\sqrt{\frac{\hbar M\omega_k}{2N}}\left(\hat{a}_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}ksa}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_k t} - \hat{a}_k^\dagger \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ksa}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_k t}\right) \tag{0.1.14}$$

となる．このとき，ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_k \hbar\omega_k\left(\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \frac{1}{2}\right) \tag{0.1.15}$$

となる．このハミルトニアンの固有エネルギーは

$$\varepsilon_k = \hbar\omega_k\left(n_k + \frac{1}{2}\right) \tag{0.1.16}$$

で，エネルギーが離散化されていることがわかる．また，上記の生成消滅演算子は

$$\left[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger\right] = \delta_{kk'} \tag{0.1.17}$$

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}] = \left[\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_{k'}^\dagger\right] = 0 \tag{0.1.18}$$

を満たしているのでボゾンであることがわかる．このように，エネルギー $\hbar\omega_k$ をもった量子を**フォノン**と呼ぶ．

0.2 3 次元の結晶

上記の議論を 3 次元に拡張する．3 次元結晶中の原子の位置は並進ベクトル $\boldsymbol{R}_l = l_1\boldsymbol{a}_1 + l_2\boldsymbol{a}_2 + l_3\boldsymbol{a}_3$ で表される．単位胞中の原子の数を r とする．κ 番目の原子の平衡点からの位置のずれを $\boldsymbol{\xi}^\kappa(\boldsymbol{R}_l, t)$ とする．$\boldsymbol{\xi}^\kappa$ の運動方程式は同様に，

$$m_\kappa \ddot{\xi}_i^\kappa(\boldsymbol{R}_l, t) = -\sum_{\boldsymbol{R}_{l'}}\sum_{\kappa'}\sum_j U_{ij}^{\kappa\kappa'}(\boldsymbol{R}_l - \boldsymbol{R}_{l'})\xi_j^{\kappa'}(\boldsymbol{R}_{l'}, t) \tag{0.2.1}$$

である．ここで，Bloch の定理より，$\boldsymbol{\xi}$ は

$$\boldsymbol{\xi}^\kappa(\boldsymbol{R}_l, t) \sim \boldsymbol{u}^\kappa(\boldsymbol{k}, J)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_l}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_J t} \tag{0.2.2}$$

と表される．以下でわかるように，J はモードを表し，$J3r$ 個の値をとる．

式 (0.2.1) に**式** (0.2.2) を代入すると，

$$-\omega_J^2 m_\kappa u_i^\kappa + \sum_{\kappa'}\sum_j\left(\sum_{\boldsymbol{R}_{l'}} U_{ij}^{\kappa\kappa'}(\boldsymbol{R}_l - \boldsymbol{R}_{l'})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{R}_l - \boldsymbol{R}_{l'})}\right)u_j^{\kappa'} = 0 \tag{0.2.3}$$

を得る．上式が恒等的にに 0 出ない条件は

$$\det\left(-\omega_J^2 m_\kappa \delta_{\kappa\kappa'}\delta_{ij} + \left(\sum_{\boldsymbol{R}_{l'}} U_{ij}^{\kappa\kappa'}(\boldsymbol{R}_l - \boldsymbol{R}_{l'})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{R}_l - \boldsymbol{R}_{l'})}\right)\right) = 0 \tag{0.2.4}$$

である．ここで，i はベクトルの成分を表し，$i = 1, 2, 3$ をとるのであった．また，κ は単位胞中の原子の数を表し，r 個の値を取るのであった．よって，上の行列式は $3r \times 3r$ だから，$3r$ 個の解をもつ．したがって，モードの数は $3r$ である．ここで，$3r$ 個のモードのうち，3 個のモードは $\boldsymbol{k} \to 0$ とすると $\omega \to \boldsymbol{0}$ となる音響モードである．残りの $3(r-1)$ は $\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{0}$ で $\omega \to 0$ とならない光学モードである．これは原子の相対的な運動によるものである．

式 (0.2.4) の行列式を解くと基準振動が求まる．基準振動が求まったものとして量子化を行うと，

$$\hat{\boldsymbol{\xi}}(\boldsymbol{R}_l, t) = \sqrt{\hbar}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_J \hat{a}_J(\boldsymbol{k})\boldsymbol{u}^\kappa(\boldsymbol{k}, J)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_l}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_J(\boldsymbol{k})t} + \hat{a}_J^\dagger(\boldsymbol{k})\boldsymbol{v}^\kappa(\boldsymbol{k}, J)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_l}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_J(\boldsymbol{k})t} \tag{0.2.5}$$

を得る．ここで，$\boldsymbol{\xi}$ は実であるため，エルミート性を保つために $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{u}^*$ とする．

参考文献　高橋康，物性研究者のための場の量子論 1，培風館，1974

0.3　フォノンの角運動量

0.4　熱勾配とフォノンの角運動量