

anko9801

2023 年 7 月 29 日

## 目次

0.1	解析力学の復習：点正準変換 .....	2
0.2	1 次元結晶における平衡位置の回りの調和振動を記述する Hamilton 関数 ...	3
0.3	1 次元結晶における平衡位置の回りの調和振動の基準モードの計算 .....	3
0.4	3 次元結晶における平衡位置の回りの調和振動を記述する Hamilton 関数 ...	14
0.5	3 次元結晶における平衡位置の回りの調和振動の基準モードの計算 .....	15

## 0.1 解析力学の復習：点正準変換

ある  $N$  自由度の系の一般化座標を  $q_1, \dots, q_N$  として Lagrange 形式では一般化座標  $q_i$  と一般化速度  $\dot{q}_i$  を用いて表現される。このとき一般化運動量  $p_i$  は次のように定められる。

$$L = L(q_1, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_N), \quad (0.1)$$

$$p_i = \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right)_{q_1, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_{i-1}, \dot{q}_{i+1}, \dots, \dot{q}_N} \quad (i = 1, \dots, N). \quad (0.2)$$

一方 Hamilton 形式では一般化座標  $q_i$  と一般化運動量  $p_i$  を用いて表現される。

$$H = H(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N) = \sum_{i=1}^N p_i \dot{q}_i - L, \quad (0.3)$$

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (i = 1, \dots, N). \quad (0.4)$$

Q 17-1.

Lagrange 形式での一般座標変換  $(q_1, \dots, q_N) \rightarrow (Q_1, \dots, Q_N)$  に対応する Hamilton 形式で正準変換を点正準変換といい、 $(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N) \rightarrow (Q_1, \dots, Q_N, P_1, \dots, P_N)$  を求める。

$$q_i = f_i(Q_1, \dots, Q_N). \quad (0.5)$$

(i) 新しい運動量  $P_j$  は Lagrange 形式を用いて次のように求められる。

$$P_j = \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_j} \right)_{Q_1, \dots, Q_N, \dot{Q}_1, \dots, \dot{Q}_{j-1}, \dot{Q}_{j+1}, \dots, \dot{Q}_N} \quad (j = 1, 2, \dots, N) \quad (0.6)$$

$$= \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial \dot{Q}_j} \quad (0.7)$$

$$= \sum_{i=1}^N p_i \frac{\partial q_i}{\partial \dot{Q}_j} \quad (0.8)$$

$$= \sum_{i=1}^N \frac{\partial f_i(Q_1, \dots, Q_N)}{\partial \dot{Q}_j} p_i. \quad (0.9)$$

(ii) また新しい Hamilton 関数は定義式から古い Hamilton 関数と一致する。

$$H' = H'(Q_1, \dots, Q_N, P_1, \dots, P_N) = \sum_{j=1}^N P_j \dot{Q}_j - L = \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N \frac{\partial f_i(Q_1, \dots, Q_N)}{\partial \dot{Q}_j} p_i \dot{Q}_j - L = \sum_{i=1}^N p_i \dot{q}_i - L = H \quad (0.10)$$

## 0.2 1次元結晶における平衡位置の回りの調和振動を記述する Hamilton 関数

直線上に等間隔の平衡位置を持って並んだ  $N$  個の原子からなる 1 次元結晶を物理系として記述して古典力学により考察する.  $i$  番目の原子の位置座標の平衡位置からのずれを  $q_i$  として, その運動量を  $p_i$  とする.

Q 17-2.

1 次元結晶の Hamilton 関数は次のように表される.

$$H^{1 \text{ 次元結晶}}(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N) := \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N p_i^2 + \frac{1}{2} \kappa \sum_{i=0}^N (q_i - q_{i+1})^2 \quad (0.11)$$

ただし  $\kappa$  は隣り合った原子の間の原子間力のバネ定数とし, 両端の原子は固定されている  $q_0 = q_{N+1} = 0$  と仮定する.

$i$  番目の原子の運動エネルギーは運動量  $p_i$  を用いて次のように表される.

$$\frac{p_i^2}{2m}. \quad (0.12)$$

また隣り合う  $i, i+1$  番目の原子の原子間力のポテンシャルエネルギーはバネ定数  $\kappa$  を用いて次のように表される.

$$\frac{1}{2} \kappa (q_i - q_{i+1})^2. \quad (0.13)$$

これより Hamilton 関数は次のように表される.

$$H^{1 \text{ 次元結晶}}(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N) := \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N p_i^2 + \frac{1}{2} \kappa \sum_{i=0}^N (q_i - q_{i+1})^2. \quad (0.14)$$

## 0.3 1次元結晶における平衡位置の回りの調和振動の基準モードの計算

Q 17-3.

固定端境界条件の 1 次元結晶の系を考えているので Fourier 展開した基底が基準振動となる.

$$H^{1 \text{ 次元結晶}}(Q_1, \dots, Q_N, P_1, \dots, P_N) = \sum_{j=1}^N \left( \frac{1}{2m} P_j^2 + \frac{1}{2} m \omega_j^2 Q_j^2 \right). \quad (0.15)$$

ただし,  $\omega_j$  を次のように定める.

$$\omega_j = 2 \sqrt{\frac{\kappa}{m}} \sin \left( \frac{\pi}{2(N+1)} j \right). \quad (0.16)$$

固定端境界条件の 1 次元結晶の系を考えているので Fourier Sine 展開の基底が基準振動になっているとする.

$$q_i^{(j)} = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin\left(\frac{\pi}{N+1} j i\right). \quad (0.17)$$

まず計算に必要な関数を定義する.

(i)  $\alpha \neq 0 \pmod{2\pi}$  に対して  $F(\alpha), G(\alpha)$  を次のように定義する.

$$F(\alpha) := \sum_{i=1}^N \cos(\alpha i), \quad (0.18)$$

$$G(\alpha) := \sum_{i=1}^N \sin(\alpha i). \quad (0.19)$$

このとき  $F(\alpha), G(\alpha) \in \mathbb{R}$  より  $F(\alpha) + \sqrt{-1}G(\alpha) \in \mathbb{C}$  の実部と虚部はそれぞれ  $F(\alpha), G(\alpha)$  と対応した値となる. Euler の公式を用いて次のように計算できる.

$$F(\alpha) + \sqrt{-1}G(\alpha) = \sum_{i=1}^N e^{\sqrt{-1}\alpha i} \quad (0.20)$$

$$= \frac{e^{\sqrt{-1}\alpha} - e^{\sqrt{-1}\alpha(N+1)}}{1 - e^{\sqrt{-1}\alpha}} \quad (0.21)$$

$$= \frac{2e^{\sqrt{-1}\alpha} e^{\sqrt{-1}\alpha \frac{N}{2}} \sin \alpha \frac{N}{2}}{2e^{\sqrt{-1}\alpha \frac{1}{2}} \sin \alpha \frac{1}{2}} \quad (0.22)$$

$$= \frac{e^{\sqrt{-1}\alpha \frac{N}{2}} \sin \alpha \frac{N}{2}}{\sin \alpha \frac{1}{2}} \quad (0.23)$$

$$= \frac{\cos\left(\frac{\alpha}{2}(N+1)\right) \sin \alpha \frac{N}{2}}{\sin \alpha \frac{1}{2}} + \sqrt{-1} \frac{\sin\left(\frac{\alpha}{2}(N+1)\right) \sin \alpha \frac{N}{2}}{\sin \alpha \frac{1}{2}}. \quad (0.24)$$

これより実部虚部の対応から  $F(\alpha), G(\alpha)$  が求まる.

$$F(\alpha) := \sum_{i=1}^N \cos(\alpha i) = \frac{\cos\left(\frac{\alpha}{2}(N+1)\right) \sin\left(\frac{\alpha}{2}N\right)}{\sin \frac{\alpha}{2}}, \quad (0.25)$$

$$G(\alpha) := \sum_{i=1}^N \sin(\alpha i) = \frac{\sin\left(\frac{\alpha}{2}(N+1)\right) \sin\left(\frac{\alpha}{2}N\right)}{\sin \frac{\alpha}{2}}. \quad (0.26)$$

(ii)  $j, j' = 1, \dots, N$  とすると  $j - j' = -(N-1), \dots, N-1$  かつ  $j + j' = 2, \dots, 2N$  である. これより  $j - j' = 0$  である場合に限り  $j - j' = 0 \pmod{2(N+1)}$  が成り立ち,  $j + j' = 0 \pmod{2(N+1)}$  が成り立つ場合は存在せず, 逆に主結合子の前件が恒偽ならばその論理式は

真である。よって次の同値関係が成り立つ。

$$\frac{\pi}{N+1}(j-j') = 0 \pmod{2\pi} \iff j-j' = 0 \pmod{2(N+1)} \iff j = j', \quad (0.27)$$

$$\frac{\pi}{N+1}(j+j') = 0 \pmod{2\pi} \iff j+j' = 0 \pmod{2(N+1)} \iff \text{false}. \quad (0.28)$$

(iii)  $j, j' = 1, \dots, N$  に対して次のように内積を定義する。このときこの内積の正規直交関係を示す。

$$(q^{(j)}, q^{(j')}) := \sum_{i=1}^N q_i^{(j)} q_i^{(j')}. \quad (0.29)$$

まず (i), (ii) を用いることで次のように式変形できる。

$$(q^{(j)}, q^{(j')}) := \sum_{i=1}^N q_i^{(j)} q_i^{(j')} \quad (0.30)$$

$$= \frac{2}{N+1} \sum_{i=1}^N \sin\left(\frac{\pi}{N+1}ji\right) \sin\left(\frac{\pi}{N+1}j'i\right) \quad (0.31)$$

$$= \frac{1}{N+1} \sum_{i=1}^N \left( \cos\left(\frac{\pi}{N+1}(j-j')i\right) - \cos\left(\frac{\pi}{N+1}(j+j')i\right) \right) \quad (0.32)$$

$$= \begin{cases} \frac{1}{N+1} \left( \frac{\cos\left(\frac{\pi}{2}(j-j')\right) \sin\left(\frac{N\pi}{2(N+1)}(j-j')\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{2(N+1)}(j-j')\right)} - \frac{\cos\left(\frac{\pi}{2}(j+j')\right) \sin\left(\frac{N\pi}{2(N+1)}(j+j')\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{2(N+1)}(j+j')\right)} \right) & (j \neq j') \\ \frac{1}{N+1} \left( N - \frac{\cos(j\pi) \sin\left(\frac{jN}{N+1}\pi\right)}{\sin\left(\frac{j}{N+1}\pi\right)} \right) & (j = j') \end{cases} \quad (0.33)$$

先に  $j \neq j'$  の場合を考える。括弧内を通分した分子の第一項と第二項についてそれぞれ計算する。第一項について

$$\cos\left(\frac{\pi}{2}(j-j')\right) \sin\left(\frac{N\pi}{2(N+1)}(j-j')\right) \sin\left(\frac{\pi}{2(N+1)}(j+j')\right) \quad (0.34)$$

$$= \cos\left(\frac{j-j'}{2}\pi\right) \left( \cos\left(\frac{(N-1)j - (N+1)j'}{2(N+1)}\pi\right) - \cos\left(\frac{(N+1)j - (N-1)j'}{2(N+1)}\pi\right) \right) \quad (0.35)$$

$$= \cos\left(\frac{j-j'}{2}\pi\right) \cos\left(\frac{(N-1)j - (N+1)j'}{2(N+1)}\pi\right) - \cos\left(\frac{j-j'}{2}\pi\right) \cos\left(\frac{(N+1)j - (N-1)j'}{2(N+1)}\pi\right) \quad (0.36)$$

$$= \cos\left(\frac{j}{N+1}\pi\right) + \cos\left(\frac{Nj - (N+1)j'}{N+1}\pi\right) - \cos\left(\frac{j'}{N+1}\pi\right) - \cos\left(\frac{(N+1)j - Nj'}{N+1}\pi\right). \quad (0.37)$$

第二項について

$$\cos\left(\frac{\pi}{2}(j+j')\right)\sin\left(\frac{N\pi}{2(N+1)}(j+j')\right)\sin\left(\frac{\pi}{2(N+1)}(j-j')\right) \quad (0.38)$$

$$= \cos\left(\frac{j+j'}{2}\pi\right)\left(\cos\left(\frac{(N-1)j+(N+1)j'}{2(N+1)}\pi\right) - \cos\left(\frac{(N+1)j+(N-1)j'}{2(N+1)}\pi\right)\right) \quad (0.39)$$

$$= \cos\left(\frac{j+j'}{2}\pi\right)\cos\left(\frac{(N-1)j+(N+1)j'}{2(N+1)}\pi\right) - \cos\left(\frac{j+j'}{2}\pi\right)\cos\left(\frac{(N+1)j+(N-1)j'}{2(N+1)}\pi\right) \quad (0.40)$$

$$= \cos\left(\frac{Nj+(N+1)j'}{N+1}\pi\right) + \cos\left(\frac{j}{N+1}\pi\right) - \cos\left(\frac{(N+1)j+Nj'}{N+1}\pi\right) - \cos\left(\frac{j'}{N+1}\pi\right). \quad (0.41)$$

これより分子は次のようになる.

$$(0.37) - (0.41) = \left(\cos\frac{j}{N+1}\pi + \cos\left(\frac{Nj}{N+1} - j'\right)\pi - \cos\frac{j'}{N+1}\pi - \cos\left(j - \frac{Nj'}{N+1}\right)\pi\right) \quad (0.42)$$

$$- \left(\cos\left(\frac{Nj}{N+1} + j'\right)\pi + \cos\frac{j}{N+1}\pi - \cos\left(j + \frac{Nj'}{N+1}\right)\pi - \cos\frac{j'}{N+1}\pi\right) \quad (0.43)$$

$$= \cos\left(\frac{Nj}{N+1} - j'\right)\pi - \cos\left(\frac{Nj}{N+1} + j'\right)\pi + \cos\left(j + \frac{Nj'}{N+1}\right)\pi - \cos\left(j - \frac{Nj'}{N+1}\right)\pi \quad (0.44)$$

$$= 2\sin(j'\pi)\sin\left(\frac{Nj}{N+1}\pi\right) - 2\sin(j\pi)\sin\left(\frac{Nj'}{N+1}\pi\right) \quad (0.45)$$

$$= 0 \quad (\cdot: j, j' \in \mathbb{Z}). \quad (0.46)$$

よって  $j \neq j'$  のときは  $(q^{(j)}, q^{(j')}) = 0$  となる.

次に  $j = j'$  の場合を考える. これは  $j$  が奇数か偶数かで場合分けして考える.

$$\frac{\cos(j\pi) \sin\left(\frac{jN}{N+1}\pi\right)}{\sin\left(\frac{j}{N+1}\pi\right)} = \begin{cases} \frac{\cos(2k\pi) \sin\left(\frac{2kN}{N+1}\pi\right)}{\sin\left(\frac{2k}{N+1}\pi\right)} & (j = 2k, k \in \mathbb{Z}) \\ \frac{\cos((2k-1)\pi) \sin\left(\frac{(2k-1)N}{N+1}\pi\right)}{\sin\left(\frac{2k-1}{N+1}\pi\right)} & (j = 2k-1, k \in \mathbb{Z}) \end{cases} \quad (0.47)$$

$$= \begin{cases} \frac{1 \cdot \sin\left(2k\pi \frac{N}{N+1} - 2k\pi\right)}{\sin\left(2k\pi \frac{1}{N+1}\right)} \\ -1 \cdot \frac{\sin\left((2k-1)\pi \frac{N}{N+1} - (2k-1)\pi\right)}{\sin\left((2k-1)\pi \frac{1}{N+1}\right)} \end{cases} \quad (0.48)$$

$$= -1. \quad (0.49)$$

よって  $j = j'$  のときは  $(q^{(j)}, q^{(j')}) = 1$  となる. これより, まとめると次の式が成り立つ.

$$(q^{(j)}, q^{(j')}) = \delta_{j,j'}. \quad (0.50)$$

(iv) ここで行列  $A_{ij} := q_i^{(j)}$  を定義する. このとき次の計算から  $A_{ij}$  は直交行列であるとわかる.

$$(A^\top A)_{ij} = \sum_{k=1}^N A_{ik}^\top A_{kj} = \sum_{k=1}^N A_{ki} A_{kj} = \sum_{k=1}^N q_k^{(i)} q_k^{(j)} = (q^{(i)}, q^{(j)}) = \delta_{i,j}. \quad (0.51)$$

(v) また  $A_{ij}$  が直交行列であるから次のような正規直交関係もある.

$$(AA^\top)_{ij} = \sum_{k=1}^N A_{ik} A_{kj}^\top = \sum_{k=1}^N A_{ik} A_{jk} = \sum_{k=1}^N q_i^{(k)} q_j^{(k)} = \delta_{i,j}. \quad (0.52)$$

(vi) ここで原子の変位を表す古い座標系  $q_1, \dots, q_N$  を  $q^{(1)}, \dots, q^{(N)}$  で離散 Fourier Sine 展開した振幅を新しい座標系  $Q_1, \dots, Q_N$  と定義する.

$$q_i = \sum_{j=1}^N Q_j q_i^{(j)}. \quad (0.53)$$

これは点正準変換を用いて新しい運動量を古い運動量を表せられる.

$$P_j = \sum_{i=1}^N \frac{\partial q_i}{\partial Q_j} p_i = \sum_{i=1}^N q_i^{(j)} p_i. \quad (0.54)$$

(vii) Hamilton 関数の運動エネルギーの表式の核の部分について次のように表される.

$$\sum_{j=1}^N P_j^2 = \sum_{j=1}^N \left( \sum_{i=1}^N q_i^{(j)} p_i \right)^2 = \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N \sum_{i'=1}^N (q_i^{(j)} p_i) (q_{i'}^{(j)} p_{i'}) = \sum_{i=1}^N p_i^2. \quad (0.55)$$

(viii) Hamilton 関数のポテンシャルエネルギーの核の部分について次のような表される.

$$\sum_{i=0}^N (q_i - q_{i+1})^2 = \sum_{i=0}^N \left( \sum_{j=1}^N (Q_j q_i^{(j)} - Q_j q_{i+1}^{(j)}) \right)^2 \quad (0.56)$$

$$= \sum_{i=0}^N \sum_{j=1}^N \sum_{j'=1}^N (Q_j q_i^{(j)} - Q_j q_{i+1}^{(j)}) (Q_{j'} q_i^{(j')} - Q_{j'} q_{i+1}^{(j')}) \quad (0.57)$$

$$= \sum_{j=1}^N \sum_{j'=1}^N \sum_{i=0}^N (q_i^{(j)} - q_{i+1}^{(j)}) (q_i^{(j')} - q_{i+1}^{(j')}) Q_j Q_{j'} \quad (0.58)$$

$$= \sum_{j=1}^N \sum_{j'=1}^N B_{j,j'} Q_j Q_{j'}. \quad (0.59)$$

ただし,  $B_{j,j'}$  を次のように定める.

$$B_{j,j'} := \sum_{i=0}^N (q_i^{(j)} - q_{i+1}^{(j)}) (q_i^{(j')} - q_{i+1}^{(j')}). \quad (0.60)$$

(ix) 次に  $B_{j,j'}$  を求める. まず  $q_i^{(j)} - q_{i+1}^{(j)}$  は次のように求められる.

$$q_i^{(j)} - q_{i+1}^{(j)} = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin\left(\frac{\pi}{N+1} j i\right) - \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin\left(\frac{\pi}{N+1} j (i+1)\right) \quad (0.61)$$

$$= \sqrt{\frac{2}{N+1}} \left( \sin\left(\frac{\pi}{N+1} j i\right) - \sin\left(\frac{\pi}{N+1} j (i+1)\right) \right) \quad (0.62)$$

$$= -2 \sqrt{\frac{2}{N+1}} \cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{(2i+1)j}{N+1}\right) \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{j}{N+1}\right). \quad (0.63)$$

(x) これより  $B_{j,j'}$  は次のように計算できる.

$$B_{j,j'} = \sum_{i=0}^N (q_i^{(j)} - q_{i+1}^{(j)}) (q_i^{(j')} - q_{i+1}^{(j')}) \quad (0.64)$$

$$= \sum_{i=0}^N \left( -2 \sqrt{\frac{2}{N+1}} \cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{(2i+1)j}{N+1}\right) \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{j}{N+1}\right) \right) \left( -2 \sqrt{\frac{2}{N+1}} \cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{(2i+1)j'}{N+1}\right) \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{j'}{N+1}\right) \right) \quad (0.65)$$

$$= 4 \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{j}{N+1}\right) \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{j'}{N+1}\right) \frac{2}{N+1} \sum_{i=0}^N \cos\left(\frac{\pi}{N+1} j \left(i + \frac{1}{2}\right)\right) \cos\left(\frac{\pi}{N+1} j' \left(i + \frac{1}{2}\right)\right) \quad (0.66)$$

$$= 4 \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{j}{N+1}\right) \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{j'}{N+1}\right) \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \left( \cos\left(\frac{\pi}{N+1} (j+j') \left(i + \frac{1}{2}\right)\right) + \cos\left(\frac{\pi}{N+1} (j-j') \left(i + \frac{1}{2}\right)\right) \right) \quad (0.67)$$

$$= 4 \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{j}{N+1}\right) \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{j'}{N+1}\right) \tilde{B}_{j,j'}. \quad (0.68)$$



ただし,  $\tilde{B}_{j,j'}$  を次のように定める.

$$\tilde{B}_{j,j'} := \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \left( \cos\left(\frac{\pi}{N+1}(j+j')\left(i + \frac{1}{2}\right)\right) + \cos\left(\frac{\pi}{N+1}(j-j')\left(i + \frac{1}{2}\right)\right) \right). \quad (0.69)$$

(xi) さらに  $\tilde{B}_{j,j'}$  は次のように計算できる.

$$\tilde{B}_{j,j'} = \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \left( \cos\left(\pi \frac{j+j'}{N+1} \left(i + \frac{1}{2}\right)\right) + \cos\left(\pi \frac{j-j'}{N+1} \left(i + \frac{1}{2}\right)\right) \right) \quad (0.70)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \left[ \cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{j+j'}{N+1}\right) \cos\left(\pi \frac{j+j'}{N+1} i\right) \right. \\ &\quad - \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{j+j'}{N+1}\right) \sin\left(\pi \frac{j+j'}{N+1} i\right) \\ &\quad + \cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{j-j'}{N+1}\right) \cos\left(\pi \frac{j-j'}{N+1} i\right) \\ &\quad \left. - \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{j-j'}{N+1}\right) \sin\left(\pi \frac{j-j'}{N+1} i\right) \right] \end{aligned} \quad (0.71)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{N+1} \left[ \cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{j+j'}{N+1}\right) \left(1 + F\left(\pi \frac{j+j'}{N+1}\right)\right) \right. \\ &\quad - \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{j+j'}{N+1}\right) G\left(\pi \frac{j+j'}{N+1}\right) \\ &\quad + \cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{j-j'}{N+1}\right) \left(1 + F\left(\pi \frac{j-j'}{N+1}\right)\right) \\ &\quad \left. - \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{j-j'}{N+1}\right) G\left(\pi \frac{j-j'}{N+1}\right) \right]. \end{aligned} \quad (0.72)$$

(xii) まず  $\tilde{B}_{j,j'}$  について  $j = j'$  の場合を考える.

$$\tilde{B}_{j,j'} = \tilde{B}_{j,j} \quad (0.73)$$

$$= \frac{1}{N+1} \left[ \cos\left(\frac{1}{N+1}j\pi\right) \left(1 + F\left(\frac{2}{N+1}j\pi\right)\right) - \sin\left(\frac{1}{N+1}j\pi\right) G\left(\frac{2}{N+1}j\pi\right) + (1+N) - 0 \right] \quad (0.74)$$

$$= 1 + \frac{1}{N+1} \left( \cos\left(\frac{1}{N+1}j\pi\right) \left(1 + \frac{\cos(j\pi) \sin\left(\frac{N}{N+1}j\pi\right)}{\sin\left(\frac{1}{N+1}j\pi\right)}\right) - \sin\left(\frac{1}{N+1}j\pi\right) \frac{\sin(j\pi) \sin\left(\frac{N}{N+1}j\pi\right)}{\sin\left(\frac{1}{N+1}j\pi\right)} \right) \quad (0.75)$$

$$= 1 + \frac{1}{N+1} \left( \cos\left(\frac{1}{N+1}j\pi\right) + \left( \cos\left(\frac{1}{N+1}j\pi\right) \cos(j\pi) - \sin\left(\frac{1}{N+1}j\pi\right) \sin(j\pi) \right) \frac{\sin\left(\frac{N}{N+1}j\pi\right)}{\sin\left(\frac{1}{N+1}j\pi\right)} \right) \quad (0.76)$$

$$= 1 + \frac{1}{N+1} \left( \cos\left(\frac{1}{N+1}j\pi\right) + \cos\left(\frac{N+2}{N+1}j\pi\right) \frac{\sin\left(\frac{N}{N+1}j\pi\right)}{\sin\left(\frac{1}{N+1}j\pi\right)} \right) \quad (0.77)$$

$$= 1 + \frac{1}{N+1} \left( \cos\left(\frac{1}{N+1}j\pi\right) \sin\left(\frac{1}{N+1}j\pi\right) + \cos\left(\frac{N+2}{N+1}j\pi\right) \sin\left(\frac{N}{N+1}j\pi\right) \right) / \sin\left(\frac{1}{N+1}j\pi\right) \quad (0.78)$$

$$= 1 + \frac{1}{N+1} \left( \frac{1}{2} \sin\left(\frac{2}{N+1}j\pi\right) + \frac{1}{2} \sin\left(-\frac{2}{N+1}j\pi\right) \right) / \sin\left(\frac{1}{N+1}j\pi\right) \quad (0.79)$$

$$= 1. \quad (0.80)$$

(xiii) 次に  $\tilde{B}_{j,j'}$  について  $j \neq j'$  の場合を考える.

$$\tilde{B}_{j,j'} = \tilde{B}_{j,j'} \quad (0.81)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{N+1} \left[ \cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{j+j'}{N+1}\right) \left(1 + F\left(\pi \frac{j+j'}{N+1}\right)\right) \right. \\ &\quad - \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{j+j'}{N+1}\right) G\left(\pi \frac{j+j'}{N+1}\right) \\ &\quad + \cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{j-j'}{N+1}\right) \left(1 + F\left(\pi \frac{j-j'}{N+1}\right)\right) \\ &\quad \left. - \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{j-j'}{N+1}\right) G\left(\pi \frac{j-j'}{N+1}\right) \right] \end{aligned} \quad (0.82)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{N+1} \left[ \cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{j+j'}{N+1}\right) \left(1 + \frac{\cos(\frac{1}{2}(j+j')\pi) \sin(\frac{N}{2(N+1)}(j+j')\pi)}{\sin(\frac{1}{2(N+1)}(j+j')\pi)}\right) \right. \\ &\quad - \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{j+j'}{N+1}\right) \frac{\sin(\frac{1}{2}(j+j')\pi) \sin(\frac{N}{2(N+1)}(j+j')\pi)}{\sin(\frac{1}{2(N+1)}(j+j')\pi)} \\ &\quad + \cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{j-j'}{N+1}\right) \left(1 + \frac{\cos(\frac{1}{2}(j-j')\pi) \sin(\frac{N}{2(N+1)}(j-j')\pi)}{\sin(\frac{1}{2(N+1)}(j-j')\pi)}\right) \\ &\quad \left. - \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{j-j'}{N+1}\right) \frac{\sin(\frac{1}{2}(j-j')\pi) \sin(\frac{N}{2(N+1)}(j-j')\pi)}{\sin(\frac{1}{2(N+1)}(j-j')\pi)} \right] \end{aligned} \quad (0.83)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{N+1} \left[ \cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{j+j'}{N+1}\right) + \left(\cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{j+j'}{N+1}\right) \cos\left(\frac{j+j'}{2}\pi\right) - \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{j+j'}{N+1}\right) \sin\left(\frac{j+j'}{2}\pi\right)\right) \frac{\sin(\frac{N}{2(N+1)}(j+j')\pi)}{\sin(\frac{1}{2(N+1)}(j+j')\pi)} \right. \\ &\quad + \cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{j-j'}{N+1}\right) + \left(\cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{j-j'}{N+1}\right) \cos\left(\frac{j-j'}{2}\pi\right) - \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{j-j'}{N+1}\right) \sin\left(\frac{j-j'}{2}\pi\right)\right) \frac{\sin(\frac{N}{2(N+1)}(j-j')\pi)}{\sin(\frac{1}{2(N+1)}(j-j')\pi)} \left. \right] \end{aligned} \quad (0.84)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{N+1} \left[ \cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{j+j'}{N+1}\right) + \cos\left(\frac{N+2}{2(N+1)}(j+j')\pi\right) \frac{\sin(\frac{N}{2(N+1)}(j+j')\pi)}{\sin(\frac{1}{2(N+1)}(j+j')\pi)} \right. \\ &\quad \left. + \cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{j-j'}{N+1}\right) + \cos\left(\frac{N+2}{2(N+1)}(j-j')\pi\right) \frac{\sin(\frac{N}{2(N+1)}(j-j')\pi)}{\sin(\frac{1}{2(N+1)}(j-j')\pi)} \right] \end{aligned} \quad (0.85)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{N+1} \left[ \frac{1}{2} \left( \sin\left(\frac{j+j'}{N+1}\pi\right) + \sin((j+j')\pi) + \sin\left(-\frac{j+j'}{N+1}\pi\right) \right) \Big/ \sin\left(\frac{1}{2(N+1)}(j+j')\pi\right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \left( \sin\left(\frac{j-j'}{N+1}\pi\right) + \sin((j-j')\pi) + \sin\left(-\frac{j-j'}{N+1}\pi\right) \right) \Big/ \sin\left(\frac{1}{2(N+1)}(j-j')\pi\right) \right] \end{aligned} \quad (0.86)$$

$$= 0. \quad (0.87)$$

よって (xii), (xiii) の考察から次の式が成り立つ.

$$\tilde{B}_{j,j'} = \delta_{j,j'}. \quad (0.88)$$

(xiv) これより  $B_{j,j'}$  は (x) の考察から次のようになる.

$$B_{j,j'} = 4 \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{j}{N+1}\right) \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{j'}{N+1}\right) \tilde{B}_{j,j'} \quad (0.89)$$

$$= \delta_{j,j'} 4 \sin^2\left(\frac{\pi}{2(N+1)} j\right). \quad (0.90)$$

(xv) ポテンシャルエネルギーの表式 (vii) に代入して次のようになる.

$$\sum_{i=0}^N (q_i - q_{i+1})^2 = \sum_{j=1}^N \sum_{j'=1}^N B_{j,j'} Q_j Q_{j'} \quad (0.91)$$

$$= \sum_{j=1}^N \sum_{j'=1}^N \delta_{j,j'} 4 \sin^2\left(\frac{\pi}{2(N+1)} j\right) Q_j Q_{j'} \quad (0.92)$$

$$= 4 \sum_{j=1}^N \sin^2\left(\frac{\pi}{2(N+1)} j\right) Q_j^2. \quad (0.93)$$

(xvi) よって Hamilton 関数は (vii) (xv) から次のように表される.

$$H^1 \text{次元結晶}(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N p_i^2 + \frac{1}{2} \kappa \sum_{i=0}^N (q_i - q_{i+1})^2 \quad (0.94)$$

$$= \frac{1}{2m} \sum_{j=1}^N P_j^2 + 2\kappa \sum_{j=1}^N \sin^2\left(\frac{\pi}{2(N+1)} j\right) Q_j^2 \quad (0.95)$$

$$H^1 \text{次元結晶}(Q_1, \dots, Q_N, P_1, \dots, P_N) = \sum_{j=1}^N \left( \frac{1}{2m} P_j^2 + \frac{1}{2} m \omega_j^2 Q_j^2 \right). \quad (0.96)$$

ただし,  $\omega_j$  を次のように定めた.

$$\omega_j = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \sin\left(\frac{\pi}{2(N+1)} j\right) \quad (j = 1, \dots, N). \quad (0.97)$$

Q 17-4. —

1 次元結晶中の波数  $k$  に対する分散関係  $\omega(k)$  は次のようになる.

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \sin\left(\frac{1}{2}ka\right) \approx \sqrt{\frac{\kappa}{m}} ka + \mathcal{O}((ka)^3) \quad (ka \ll 1). \quad (0.98)$$

(i)  $j = 1, \dots, N$  に対して  $j$  番目の基準振動  $q_i^{(j)}$  は次のように計算される.

$$q_i^{(j)} = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin\left(\frac{\pi}{N+1}ji\right) \quad (0.99)$$

$$= \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin\left(\frac{\pi}{a} \frac{j}{N+1} x_i\right) \quad (0.100)$$

$$= \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin(k_j x_i). \quad (0.101)$$

ただし,  $i$  番目の原子の平衡位置の座標を  $x_i = ai$  とし,  $j$  番目の基準振動の波数  $k_j$  を次のように定める.

$$k_j := \frac{\pi}{a} \frac{j}{N+1} \quad (j = 1, \dots, N). \quad (0.102)$$

(ii) 基準振動  $q_i^{(j)}$  の角振動数  $\omega_j$  を波数  $k_j$  の関数として次のように表される.

$$\omega(k_j) = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \sin\left(\frac{\pi}{2(N+1)}j\right) \quad (0.103)$$

$$= 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \sin\left(\frac{1}{2}k_j a\right). \quad (0.104)$$

よって分散関係  $\omega = \omega(k)$  は次のように与えられる.

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \sin\left(\frac{1}{2}ka\right). \quad (0.105)$$

(iii) この 1 次元結晶を伝わる線形波動 (弾性波, 音波) が波数ごとに異なる速さを持って伝播するということから, 1 次元結晶中にこれらを重ね合わせて波束が作られたとすると次第に波束の形が変化していき最終的に崩壊する.

(iv) 十分に長波長  $ka \ll 1$  のとき次のように近似することで分散関係  $\omega(k)$  は線形関係となる.

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \sin\left(\frac{1}{2}ka\right) \quad (0.106)$$

$$\approx 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \left(\frac{1}{2}ka + \mathcal{O}((ka)^3)\right) \quad (0.107)$$

$$= \sqrt{\frac{\kappa}{m}} ka + \mathcal{O}((ka)^3) \quad (ka \ll 1). \quad (0.108)$$

(v) 長波長の極限での弾性波の速さを音速という. 固体の音速  $v$  は次のようになる.

$$v = \lim_{ka \rightarrow 0} \frac{\omega(k)}{k} = \sqrt{\frac{\kappa}{m}} a. \quad (0.109)$$

(vi) (iv), (v) の考察より十分に長波長のとき分散関係が線形関係となるので 1 次元結晶中では線形波動は音速  $v$  と等しい速さを持って伝搬する.

Q 17-5.

1 次元結晶における基準振動の角振動数  $\omega_j$  の分布を明らかにする.

(i)(ii)  $\omega_j$  は次のように表されることから  $j = 1, \dots, N$  に対して単調増加となる.

$$\omega_j = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \sin\left(\frac{\pi}{2(N+1)}j\right). \quad (0.110)$$

これより  $\omega_j$  の最大値と最小値は次のようになる.

$$\omega_{\max} := \max_{1 \leq j \leq N} \omega_j = \omega_N = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \sin\left(\frac{\pi N}{2(N+1)}\right) \approx 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}}, \quad (0.111)$$

$$\omega_{\min} := \min_{1 \leq j \leq N} \omega_j = \omega_1 = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \sin\left(\frac{\pi}{2(N+1)}\right) \approx 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \frac{\pi}{2(N+1)} = \sqrt{\frac{\kappa}{m}} \frac{\pi}{N+1}. \quad (0.112)$$

#### 0.4 3 次元結晶における平衡位置の回りの調和振動を記述する Hamilton 関数

立方格子の各点に平衡位置を持つ  $N^3$  個の原子が全体として立方体に並んだ 3 次元結晶を物理系として記述して、古典力学により考察する. 任意の  $i_x, i_y, i_z = 1, \dots, N$  に対してラベル  $(i_x, i_y, i_z)$  を持つ原子の平衡位置は格子定数  $a$  を用いて  $(ai_x, ai_y, ai_z)$  であるとする.

Q 17-6.

このとき 3 次元結晶の Hamilton 関数は次のように与えられる.

$$H^{3 \text{ 次元結晶}}((q_{i_x, i_y, i_z, \alpha}, p_{i_x, i_y, i_z, \alpha})_{1 \leq i_x, i_y, i_z \leq N, \alpha=x, y, z}) \quad (0.113)$$

$$:= \frac{1}{2m} \sum_{i_x=1}^N \sum_{i_y=1}^N \sum_{i_z=1}^N \sum_{\alpha=x, y, z} p_{i_x, i_y, i_z, \alpha}^2 \quad (0.114)$$

$$+ \frac{1}{2} \kappa \sum_{i_x=0}^N \sum_{i_y=0}^N \sum_{i_z=0}^N \sum_{\alpha=x, y, z} \left( (q_{i_x, i_y, i_z, \alpha} - q_{i_x+1, i_y, i_z, \alpha})^2 + (q_{i_x, i_y, i_z, \alpha} - q_{i_x, i_y+1, i_z, \alpha})^2 + (q_{i_x, i_y, i_z, \alpha} - q_{i_x, i_y, i_z+1, \alpha})^2 \right). \quad (0.115)$$

ただし  $m$  は 1 個の原子の質量であり,  $\kappa$  は隣り合った原子間の原子間力のバネ定数とする. また立方体の表面は固定されているとする.

$$i_x = 0, N+1 \vee i_y = 0, N+1 \vee i_z = 0, N+1 \implies q_{i_x, i_y, i_z, \alpha} = 0. \quad (0.116)$$

Q17-3 の考察から 1 次元結晶の系の Hamilton 関数は次のように与えられる.

$$H^{1 \text{ 次元結晶}}(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N) := \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N p_i^2 + \frac{1}{2} \kappa \sum_{i=0}^N (q_i - q_{i+1})^2. \quad (0.117)$$

3 次元結晶の系は  $N^3$  個の原子と 3 個の自由度があり, それらの原子間力は独立にそれぞれの自由度と原子に働くと考えられる. これより 3 次元結晶の系の Hamilton 関数

$H^3$  次元結晶  $((q_{i_x, i_y, i_z, \alpha}, p_{i_x, i_y, i_z, \alpha})_{1 \leq i_x, i_y, i_z \leq N, \alpha=x, y, z})$  は次のように書ける.

$$H^3 \text{ 次元結晶 } ((q_{i_x, i_y, i_z, \alpha}, p_{i_x, i_y, i_z, \alpha})_{1 \leq i_x, i_y, i_z \leq N, \alpha=x, y, z}) \quad (0.118)$$

$$:= \frac{1}{2m} \sum_{i_x=1}^N \sum_{i_y=1}^N \sum_{i_z=1}^N \sum_{\alpha=x, y, z} p_{i_x, i_y, i_z, \alpha}^2 \quad (0.119)$$

$$+ \frac{1}{2} \kappa \sum_{i_x=0}^N \sum_{i_y=0}^N \sum_{i_z=0}^N \sum_{\alpha=x, y, z} \left( (q_{i_x, i_y, i_z, \alpha} - q_{i_x+1, i_y, i_z, \alpha})^2 + (q_{i_x, i_y, i_z, \alpha} - q_{i_x, i_y+1, i_z, \alpha})^2 + (q_{i_x, i_y, i_z, \alpha} - q_{i_x, i_y, i_z+1, \alpha})^2 \right). \quad (0.120)$$

ただし  $m$  は 1 個の原子の質量であり,  $\kappa$  は隣り合った原子間の原子間力のバネ定数とする.  
また立方体の表面は固定されているとする.

$$i_x = 0, N+1 \vee i_y = 0, N+1 \vee i_z = 0, N+1 \implies q_{i_x, i_y, i_z, \alpha} = 0. \quad (0.121)$$

### 0.5 3 次元結晶における平衡位置の回りの調和振動の基準モードの計算

固定端境界条件の 3 次元結晶の系を考えているので 1 次元の Fourier Sine 展開の基底 3 つの直積が基準振動になっていると予想できる. これより古い座標  $q_{i_x, i_y, i_z, \alpha}$  を基準振動  $q_{i_x}^{(j_x)} q_{i_y}^{(j_y)} q_{i_z}^{(j_z)}$  で展開したときの振幅を新しい座標  $Q_{j_x, j_y, j_z, \alpha}$  とする.

$$q_{i_x, i_y, i_z, \alpha} = \sum_{j_x=1}^N \sum_{j_y=1}^N \sum_{j_z=1}^N Q_{j_x, j_y, j_z, \alpha} q_{i_x}^{(j_x)} q_{i_y}^{(j_y)} q_{i_z}^{(j_z)}. \quad (0.122)$$

この新しい座標  $Q_{j_x, j_y, j_z, \alpha}$  に対応する新しい運動量を  $P_{j_x, j_y, j_z, \alpha}$  とおくと Hamilton 関数について次のように表される.

Q 17-7.

新しい座標と運動量  $Q_{j_x, j_y, j_z, \alpha}, P_{j_x, j_y, j_z, \alpha}$  において Hamilton 関数は次のように表される.

$$H^3 \text{ 次元結晶 } ((Q_{j_x, j_y, j_z, \alpha}, P_{j_x, j_y, j_z, \alpha})_{1 \leq j_x, j_y, j_z \leq N, \alpha=x, y, z}) = \sum_{j_x=1}^N \sum_{j_y=1}^N \sum_{j_z=1}^N \sum_{\alpha=x, y, z} \left( \frac{1}{2m} P_{j_x, j_y, j_z, \alpha}^2 + \frac{1}{2} m \omega_{j_x, j_y, j_z}^2 Q_{j_x, j_y, j_z, \alpha}^2 \right) \quad (0.123)$$

ただし,  $\omega_{j_x, j_y, j_z}$  は次のように定めた.

$$\omega_{j_x, j_y, j_z} = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \sqrt{\sin^2\left(\frac{\pi}{2(N+1)} j_x\right) + \sin^2\left(\frac{\pi}{2(N+1)} j_y\right) + \sin^2\left(\frac{\pi}{2(N+1)} j_z\right)}. \quad (0.124)$$

(i) Q17-1 の考察より新しい運動量を古い運動量と座標, 新しい座標から求めることがで

きる.

$$P_{j_x, j_y, j_z, \alpha} = \sum_{i_x=1}^N \sum_{i_y=1}^N \sum_{i_z=1}^N \frac{\partial q_{i_x, i_y, i_z, \alpha}}{\partial Q_{j_x, j_y, j_z, \alpha}} p_{i_x, i_y, i_z, \alpha} \quad (0.125)$$

$$= \sum_{i_x=1}^N \sum_{i_y=1}^N \sum_{i_z=1}^N q_{i_x}^{(j_x)} q_{i_y}^{(j_y)} q_{i_z}^{(j_z)} p_{i_x, i_y, i_z, \alpha}. \quad (0.126)$$

(ii) この点正準変換に対し, 運動エネルギーは新しい運動量を用いて表せられる.

$$\sum_{j_x=1}^N \sum_{j_y=1}^N \sum_{j_z=1}^N P_{j_x, j_y, j_z, \alpha}^2 \quad (0.127)$$

$$= \sum_{j_x=1}^N \sum_{j_y=1}^N \sum_{j_z=1}^N \left( \sum_{i_x=1}^N \sum_{i_y=1}^N \sum_{i_z=1}^N q_{i_x}^{(j_x)} q_{i_y}^{(j_y)} q_{i_z}^{(j_z)} p_{i_x, i_y, i_z, \alpha} \right)^2 \quad (0.128)$$

$$= \sum_{j_x=1}^N \sum_{j_y=1}^N \sum_{j_z=1}^N \left( \sum_{i_x=1}^N \sum_{i_y=1}^N \sum_{i_z=1}^N \sum_{i'_x=1}^N \sum_{i'_y=1}^N \sum_{i'_z=1}^N q_{i_x}^{(j_x)} q_{i_y}^{(j_y)} q_{i_z}^{(j_z)} p_{i_x, i_y, i_z, \alpha} q_{i'_x}^{(j_x)} q_{i'_y}^{(j_y)} q_{i'_z}^{(j_z)} p_{i'_x, i'_y, i'_z, \alpha} \right) \quad (0.129)$$

$$= \sum_{i_x=1}^N \sum_{i_y=1}^N \sum_{i_z=1}^N \sum_{i'_x=1}^N \sum_{i'_y=1}^N \sum_{i'_z=1}^N \delta_{i_x, i'_x} \delta_{i_y, i'_y} \delta_{i_z, i'_z} p_{i_x, i_y, i_z, \alpha} p_{i'_x, i'_y, i'_z, \alpha} \quad (0.130)$$

$$= \sum_{i_x=1}^N \sum_{i_y=1}^N \sum_{i_z=1}^N p_{i_x, i_y, i_z, \alpha}^2. \quad (0.131)$$



(iii) またポテンシャルエネルギーについても新しい座標で表すことができる。

$$\sum_{i_x=0}^N \sum_{i_y=0}^N \sum_{i_z=0}^N (q_{i_x, i_y, i_z, \alpha} - q_{i_x+1, i_y, i_z, \alpha})^2 \quad (0.132)$$

$$= \sum_{i_x=0}^N \sum_{i_y=0}^N \sum_{i_z=0}^N \left( \sum_{j_x=1}^N \sum_{j_y=1}^N \sum_{j_z=1}^N \left( Q_{j_x, j_y, j_z, \alpha} q_{i_x}^{(j_x)} q_{i_y}^{(j_y)} q_{i_z}^{(j_z)} - Q_{j_x, j_y, j_z, \alpha} q_{i_x+1}^{(j_x)} q_{i_y}^{(j_y)} q_{i_z}^{(j_z)} \right) \right)^2 \quad (0.133)$$

$$= \sum_{i_x=0}^N \sum_{i_y=0}^N \sum_{i_z=0}^N \sum_{j_x=1}^N \sum_{j_y=1}^N \sum_{j_z=1}^N \sum_{j'_x=1}^N \sum_{j'_y=1}^N \sum_{j'_z=1}^N \quad (0.134)$$

$$\left( Q_{j_x, j_y, j_z, \alpha} q_{i_x}^{(j_x)} q_{i_y}^{(j_y)} q_{i_z}^{(j_z)} - Q_{j_x, j_y, j_z, \alpha} q_{i_x+1}^{(j_x)} q_{i_y}^{(j_y)} q_{i_z}^{(j_z)} \right) \left( Q_{j'_x, j'_y, j'_z, \alpha} q_{i_x}^{(j'_x)} q_{i_y}^{(j'_y)} q_{i_z}^{(j'_z)} - Q_{j'_x, j'_y, j'_z, \alpha} q_{i_x+1}^{(j'_x)} q_{i_y}^{(j'_y)} q_{i_z}^{(j'_z)} \right) \quad (0.135)$$

$$= \sum_{i_x=0}^N \sum_{i_y=0}^N \sum_{i_z=0}^N \sum_{j_x=1}^N \sum_{j_y=1}^N \sum_{j_z=1}^N \sum_{j'_x=1}^N \sum_{j'_y=1}^N \sum_{j'_z=1}^N Q_{j_x, j_y, j_z, \alpha} \left( q_{i_x}^{(j_x)} - q_{i_x+1}^{(j_x)} \right) q_{i_y}^{(j_y)} q_{i_z}^{(j_z)} Q_{j'_x, j'_y, j'_z, \alpha} \left( q_{i_x}^{(j'_x)} - q_{i_x+1}^{(j'_x)} \right) q_{i_y}^{(j'_y)} q_{i_z}^{(j'_z)} \quad (0.136)$$

$$= \sum_{j_x=1}^N \sum_{j_y=1}^N \sum_{j_z=1}^N \sum_{j'_x=1}^N \sum_{j'_y=1}^N \sum_{j'_z=1}^N B_{j_x, j'_x} \delta_{j_y, j'_y} \delta_{j_z, j'_z} Q_{j_x, j_y, j_z, \alpha} Q_{j'_x, j'_y, j'_z, \alpha} \quad (0.137)$$

$$= \sum_{j_x=1}^N \sum_{j_y=1}^N \sum_{j_z=1}^N \sum_{j'_x=1}^N \sum_{j'_y=1}^N \sum_{j'_z=1}^N 4 \sin^2 \left( \frac{\pi}{2(N+1)} j_x \right) \delta_{j_x, j'_x} \delta_{j_y, j'_y} \delta_{j_z, j'_z} Q_{j_x, j_y, j_z, \alpha} Q_{j'_x, j'_y, j'_z, \alpha} \quad (0.138)$$

$$= 4 \sum_{j_x=1}^N \sum_{j_y=1}^N \sum_{j_z=1}^N \sin^2 \left( \frac{\pi}{2(N+1)} j_x \right) Q_{j_x, j_y, j_z, \alpha}^2. \quad (0.139)$$

(iv) これより Hamilton 関数は新しい座標と運動量を用いて表すことができる。

$$H^3 \text{次元結晶}((q_{i_x, i_y, i_z, \alpha}, p_{i_x, i_y, i_z, \alpha})_{1 \leq i_x, i_y, i_z \leq N, \alpha=x, y, z}) \quad (0.140)$$

$$:= \frac{1}{2m} \sum_{i_x=1}^N \sum_{i_y=1}^N \sum_{i_z=1}^N \sum_{\alpha=x, y, z} p_{i_x, i_y, i_z, \alpha}^2 \quad (0.141)$$

$$+ \frac{1}{2} \kappa \sum_{i_x=0}^N \sum_{i_y=0}^N \sum_{i_z=0}^N \sum_{\alpha=x, y, z} \left( (q_{i_x, i_y, i_z, \alpha} - q_{i_x+1, i_y, i_z, \alpha})^2 + (q_{i_x, i_y, i_z, \alpha} - q_{i_x, i_y+1, i_z, \alpha})^2 + (q_{i_x, i_y, i_z, \alpha} - q_{i_x, i_y, i_z+1, \alpha})^2 \right) \quad (0.142)$$

$$= \frac{1}{2m} \sum_{j_x=1}^N \sum_{j_y=1}^N \sum_{j_z=1}^N \sum_{\alpha=x, y, z} P_{j_x, j_y, j_z, \alpha}^2 \quad (0.143)$$

$$+ 2\kappa \sum_{i_x=0}^N \sum_{i_y=0}^N \sum_{i_z=0}^N \sum_{\alpha=x, y, z} \left( \sin^2\left(\frac{\pi}{2(N+1)} j_x\right) Q_{j_x, j_y, j_z, \alpha}^2 + \sin^2\left(\frac{\pi}{2(N+1)} j_y\right) Q_{j_x, j_y, j_z, \alpha}^2 + \sin^2\left(\frac{\pi}{2(N+1)} j_z\right) Q_{j_x, j_y, j_z, \alpha}^2 \right) \quad (0.144)$$

$$= \sum_{j_x=1}^N \sum_{j_y=1}^N \sum_{j_z=1}^N \sum_{\alpha=x, y, z} \left( \frac{1}{2m} P_{j_x, j_y, j_z, \alpha}^2 + 2\kappa \left( \sin^2\left(\frac{\pi}{2(N+1)} j_x\right) + \sin^2\left(\frac{\pi}{2(N+1)} j_y\right) + \sin^2\left(\frac{\pi}{2(N+1)} j_z\right) \right) Q_{j_x, j_y, j_z, \alpha}^2 \right) \quad (0.145)$$

$$= \sum_{j_x=1}^N \sum_{j_y=1}^N \sum_{j_z=1}^N \sum_{\alpha=x, y, z} \left( \frac{1}{2m} P_{j_x, j_y, j_z, \alpha}^2 + \frac{1}{2} m \omega_{j_x, j_y, j_z}^2 Q_{j_x, j_y, j_z, \alpha}^2 \right). \quad (0.146)$$

ただし、 $\omega_{j_x, j_y, j_z}$  は次のように定めた。

$$\omega_{j_x, j_y, j_z} = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \sqrt{\sin^2\left(\frac{\pi}{2(N+1)} j_x\right) + \sin^2\left(\frac{\pi}{2(N+1)} j_y\right) + \sin^2\left(\frac{\pi}{2(N+1)} j_z\right)}. \quad (0.147)$$

これより 3 次元結晶の模型の基準振動は位置や運動量に独立な角振動数  $\omega_{j_x, j_y, j_z}$  の調和振動子となることがわかった。

Q 17-9.

3 次元結晶の模型における調和振動子の角振動数の個数分布関数  $g(\omega)$  は次のように表される。

$$g(\omega) = 3 \sum_{j_x=1}^N \sum_{j_y=1}^N \sum_{j_z=1}^N \delta(\omega - \omega(\mathbf{k}_{j_x, j_y, j_z})). \quad (0.148)$$

(i) 調和振動子の角振動数  $\omega(\mathbf{k}_{j_x, j_y, j_z})$  の個数分布関数  $g(\omega)$  について  $\omega(\mathbf{k}_{j_x, j_y, j_z})$  は離散的な値を持ち、各基準モード  $(j_x, j_y, j_z, \alpha)$  によってパラメータ化されるのでデルタ関数を用い

て次のように表される.

$$g(\omega) = \sum_{j_x=1}^N \sum_{j_y=1}^N \sum_{j_z=1}^N \sum_{\alpha=x,y,z} \delta(\omega - \omega(\mathbf{k}_{j_x, j_y, j_z})) \quad (0.149)$$

$$= 3 \sum_{j_x=1}^N \sum_{j_y=1}^N \sum_{j_z=1}^N \delta(\omega - \omega(\mathbf{k}_{j_x, j_y, j_z})). \quad (0.150)$$

また  $\omega(\mathbf{k}_{j_x, j_y, j_z})$  は  $\omega(\mathbf{k}_{j_x, j_y, j_z}) \geq 0$  に限られるから  $\omega \geq 0$  となる.

(ii) これより調和振動子の総数は次のようになる.

$$\int_0^\infty d\omega g(\omega) = 3 \int_0^\infty d\omega \sum_{j_x=1}^N \sum_{j_y=1}^N \sum_{j_z=1}^N \delta(\omega - \omega(\mathbf{k}_{j_x, j_y, j_z})) \quad (0.151)$$

$$= 3N^3. \quad (0.152)$$

ただこのような調和振動子の角振動数の個数分布関数  $g(\omega)$  をさらに簡単にすることは分散関係  $\omega(\mathbf{k})$  の複雑さのためにできない為, これに統計力学を適用しても計算がすぐに行き詰まる.