

文字数

アウトライン

21

▼ \subsection{Phonon計算}

400

303

21

▼ \begin{figure}[htbp]

175

• \begin{center}

\includegraphics[width=8cm]{./Figure/Spring_Einstein_Models.jpg}

\caption{(a) ばねモデル (b) Einsteinモデル. }

\label{Spring_Einstein_Models}

\end{center}

\end{figure}

473

• 固体原子があるサイトの周りに調和振動する振動子として釘付けされているとするEinstein格子は、擬調和振動子近似のもととなる調和振動子を表している。

固体においては配置と振動の時定数が極端に異なり、それらを独立して取り扱うことが可能となる。

純粋な調和振動子近似となるEinsteinモデルでは、熱振動は進行波ではなく、バネ定数を k 、原子量を M としたとき、 $\omega=\sqrt{k/M}$ で定まる振動数で一点で振動する定在波とみなしている。

これは、図\ref{Phonon_Dispersion_DOS}に実線のカーブで示した現実のフォノン状態密度（Phonon-DOS）を、灰色直線で示したただ一つの振動数で近似することに対応している。

このEinsteinモデルの他に、図\ref{Phonon_Dispersion_DOS}の点線で示したDebyeモデルはPhonon分散曲線を利用せずにPhonon-DOSを近似する。

なお、破線で示したりカージョン法は次に詳述するPhonon-DOS法の一つである\cite{2}.

21

▼ \begin{figure}[htbp]

170

• \begin{center}

\includegraphics[width=8cm]{./Figure/Phonon_DOS.jpg}

\caption{アルミニウムにおけるPhonon-DOSと様々な手法によるPhonon-DOSの近似. }

\label{Phonon_DOS}

\end{center}

\end{figure}

555

• ではここで、\ref{ZrCr2Laves相のphonon計算による高温安定性}節、\ref{SiC結晶多形における熱膨張率}節で用いたPhonon-DOS法を紹介する。

Phonon-DOS法とは基底状態におけるPhonon分散曲線（図\ref{Phonon_Dispersion_DOS}(a)）を求め、それを積分することによってPhonon-DOSを導出する手法である。

Phonon-DOSは系の自由エネルギーを求めるのに有用であり、自由エネルギーの有用性は\ref{ZrCr2Laves相のphonon計算による高温安定性}節の議論で十分であろう。

自由エネルギーとPhonon-DOSの関係を式\ref{Phonon_DOS_Method}に示した。

ω は k -spaceにおける振動数を示し、 $n(\omega)$ はその時のPhonon-DOSを示す。

これからわかるとおり、自由エネルギーはPhonon-DOSを含めた数式で表すことができる。

なお、 $E(a)$ は系の静止エネルギー、 a はそのときの格子定数を示し、 k_B はボルツマン定数、 T は温度である。

\hbar はプランク定数 h を 2π で割った定数である\cite{3}\cite{4}.

16

▼ \begin{equation}

162

•
$$F(a,T)=E(a)+k_B T \int_0^\infty n(\omega) \ln \left[2 \sinh \left(\frac{\hbar \omega}{2 k_B T} \right) \right] d\omega$$

\label{Phonon_DOS_Method}

\end{equation}

212

• \ref{ZrCr2Laves相のphonon計算による高温安定性}節、\ref{SiC結晶多形における熱膨張率}節で用いたPhonon-DOS法は直接法（direct method）と呼ばれるが、これは単純に一個の原子を平衡位置から微少量だけ動かし、その時のエネルギー変化を微分し、原子間の力定数を求める。

そしてその力定数から振動数 ω を算出し、Phonon分散曲線を描き、Phonon-DOSを導出する。

148

• 式\ref{Phonon_DOS_Method}で明らかのようにこのままでは熱振動効果は取り入れられていない。

そこでPhonon-DOS法と、計算精度の高い第一原理計算を組み合わせることで、有限温度効果を加味した第一原理計算が実現でき、熱膨張や体積弾性率などの諸物性を再現することが可能となる。

21

▼ \begin{figure}[htbp]

190

• \begin{center}

\includegraphics[width=11cm]{./Figure/Phonon_Dispersion_DOS.jpg}

\caption{アルミニウムにおける(a) Phonon分散曲線 (b) Phonon-DOS. }

\label{Phonon_Dispersion_DOS}

\end{center}

\end{figure}

26

▼ \begin{thebibliography}{9}

43

• \bibitem{1}

西谷滋人著（2006），『固体物理の基礎』，森北出版株式会社.

65

• \bibitem{2}

西谷滋人，竹田諒平，石井英樹，山本洋佑，金子忠昭，日本金属学会誌，73巻8号（2009），566-570.

75

• \bibitem{3}

C.Kittel著，宇野良清，津屋昇，新関駒二郎，森田章，山下次郎訳（2005），『キッテル 固体物理学入門』，丸善株式会社.

56

• \bibitem{4}

沼居貴陽著（2005），『固体物理学演習 キittelの理解を深めるために』，丸善株式会社.

21

• \end{thebibliography}

4

▶ \if0