

3 回答

3.1 分散曲線

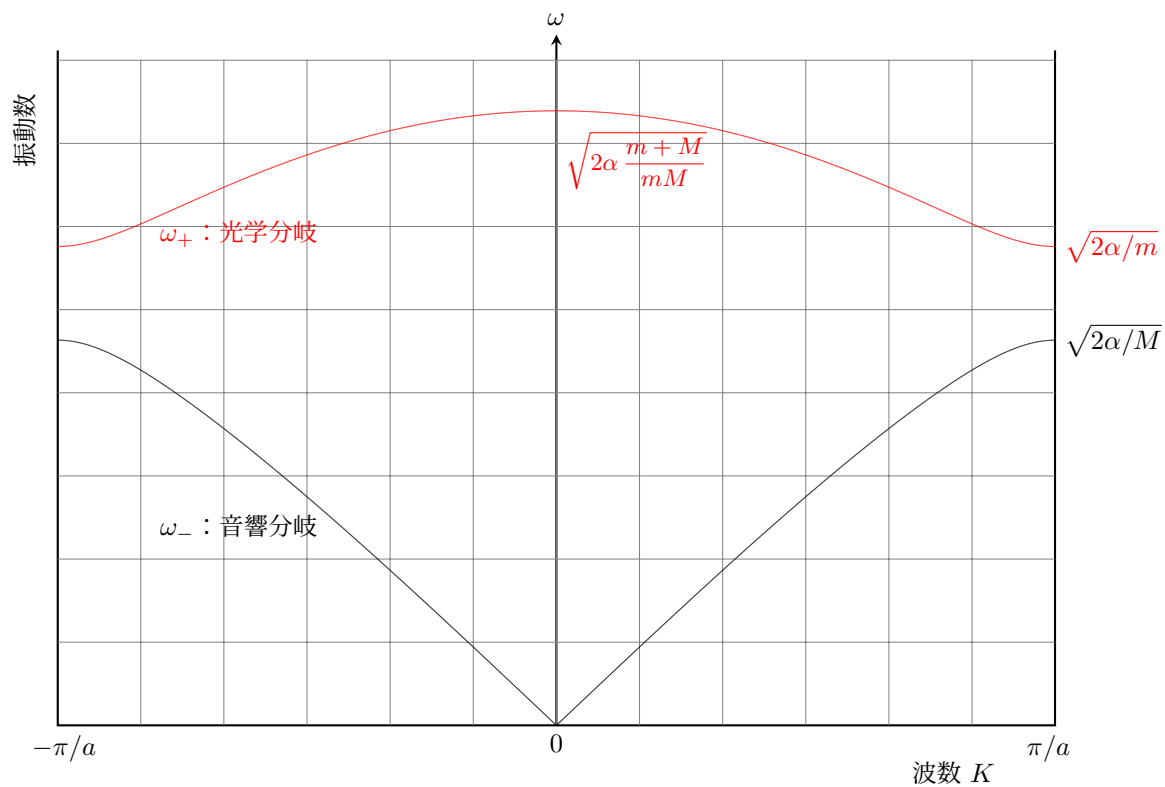
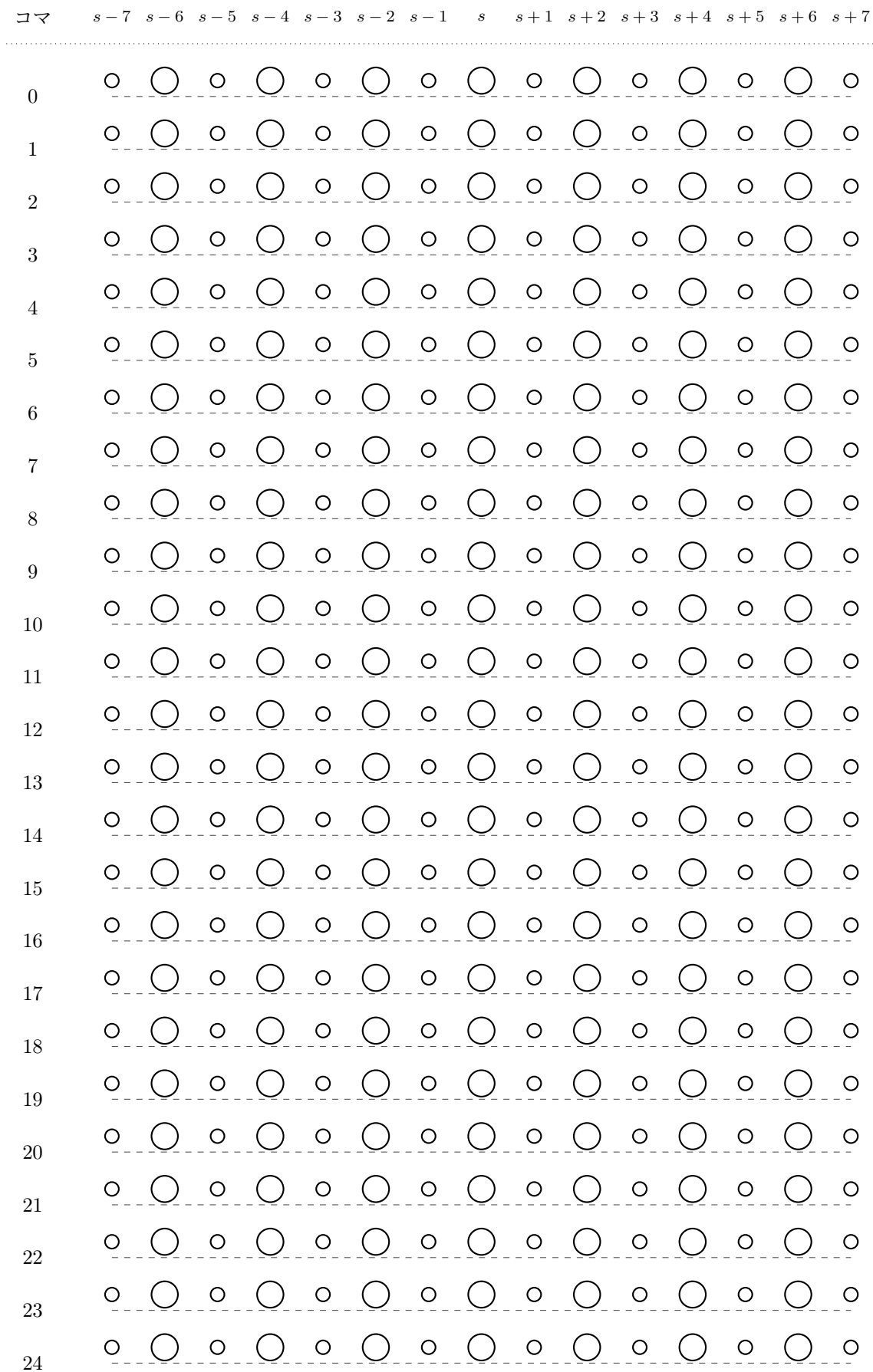
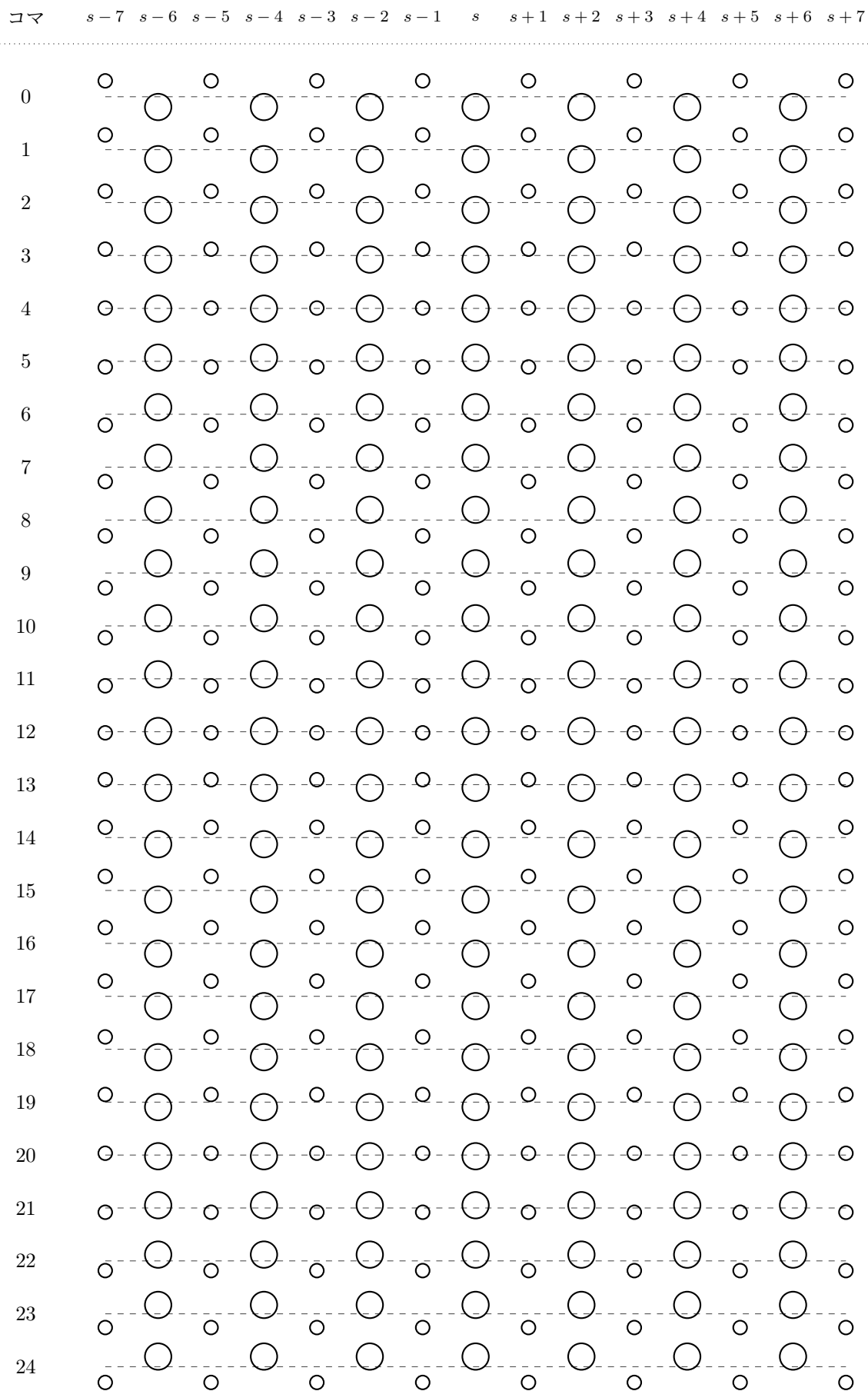


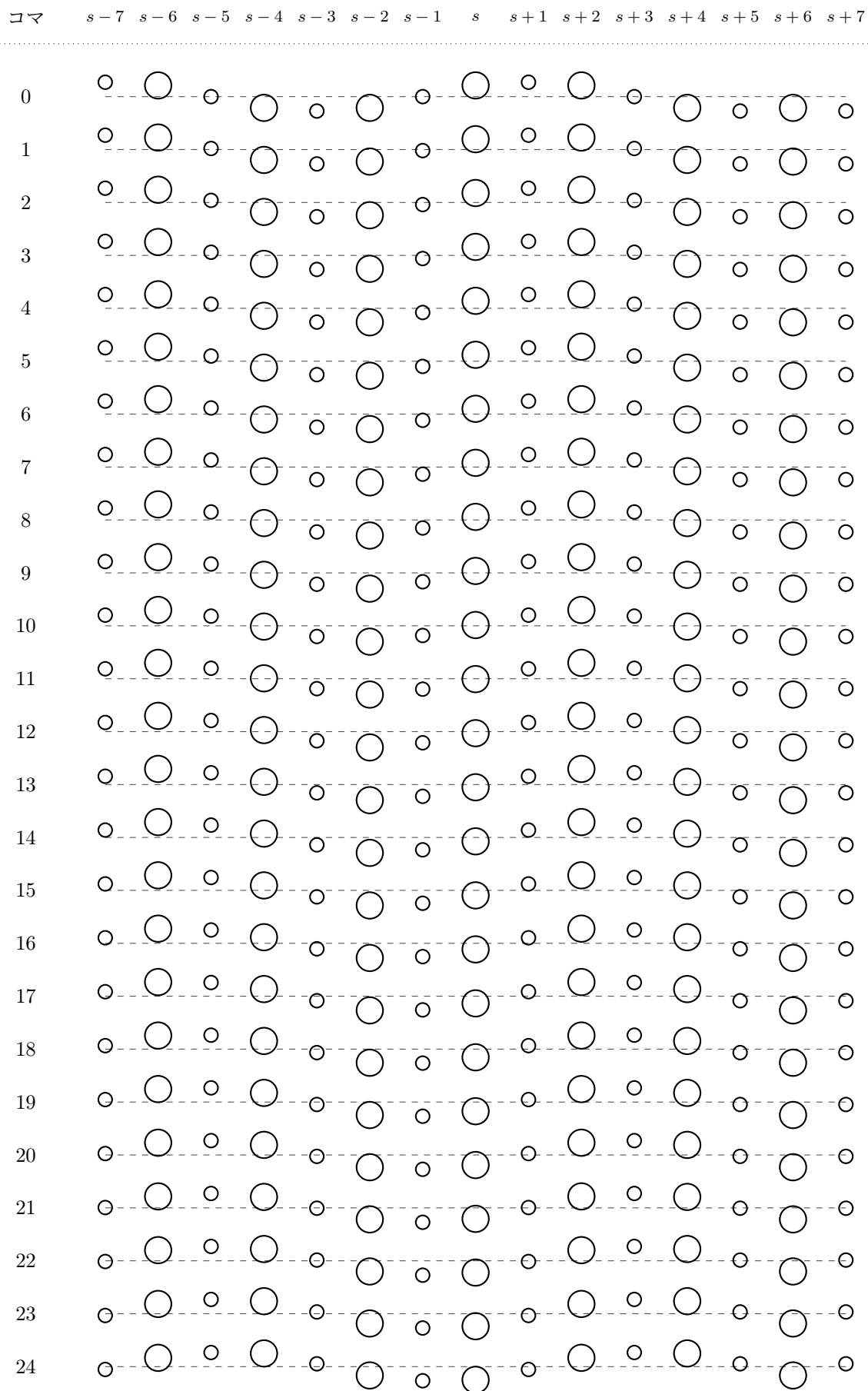
図1 NaCl型2原子1分子鎖モデルの分散関係 ($M > m$ の場合)

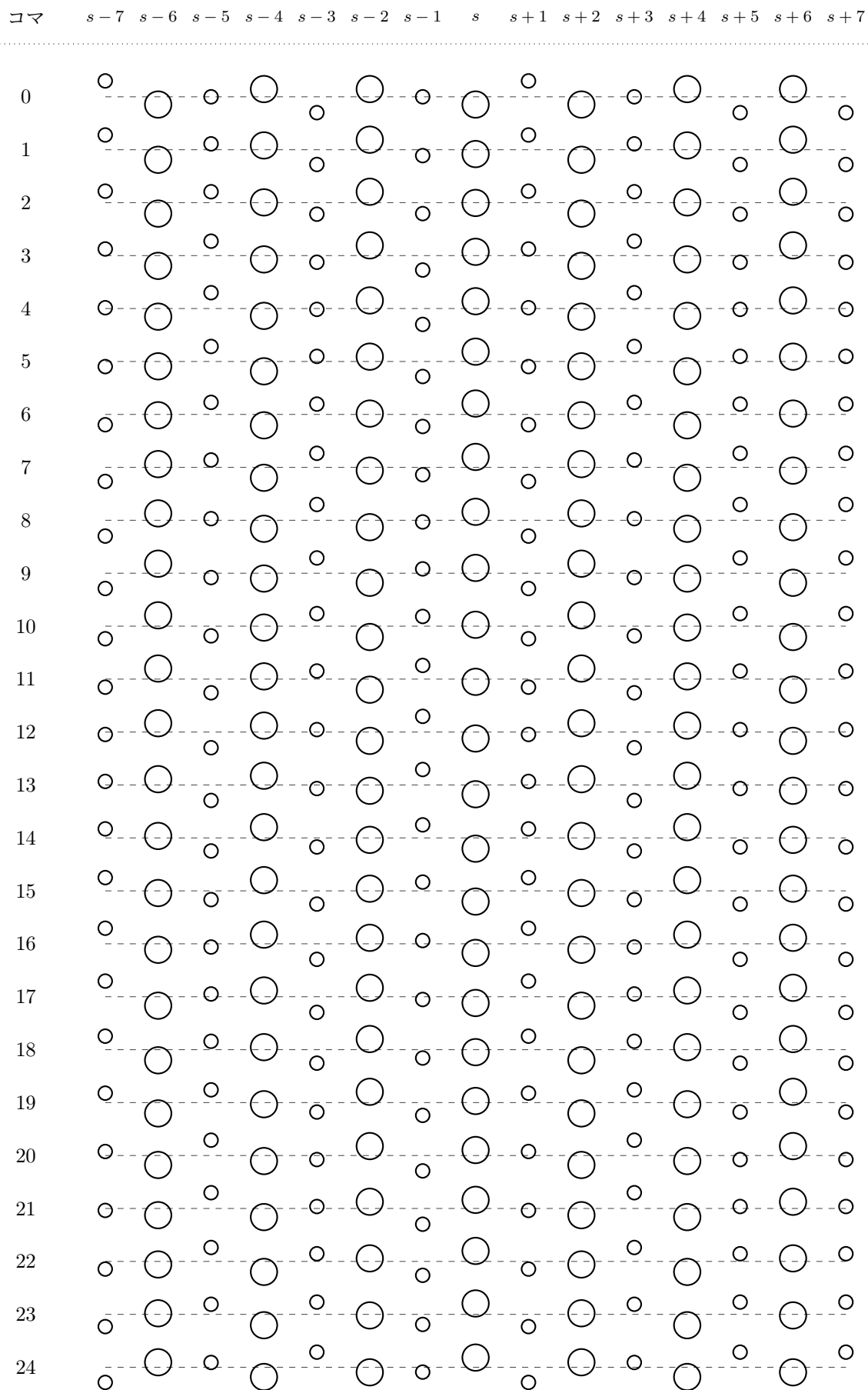
3.2 変位パターンの描画

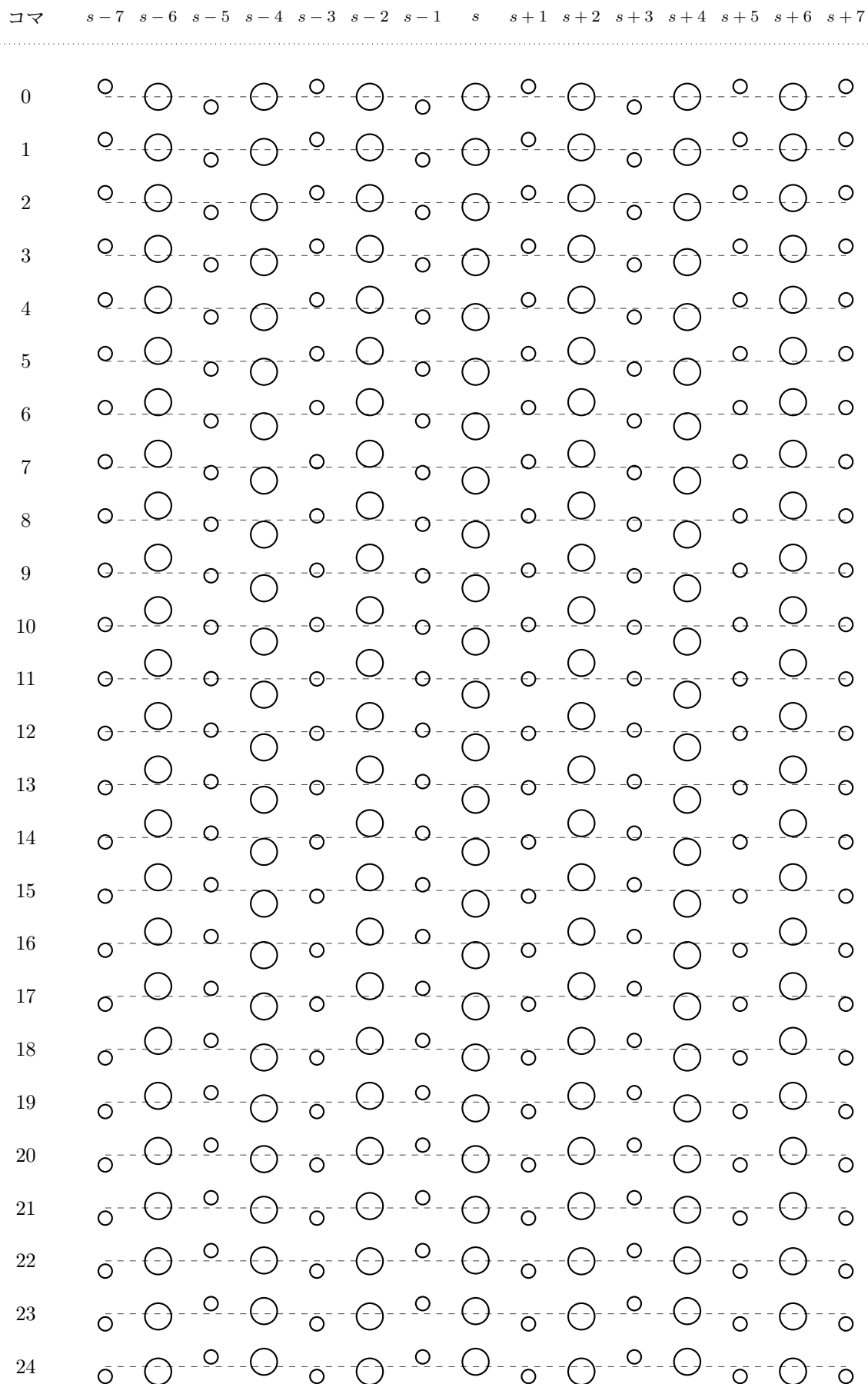
コマは2.2節で述べた通り相対値であるが、以下10個の場合で共通の指標である。大きな円がCl原子 ($M = 17$)、小さな円がNa原子 ($m = 11$)を表している。横の点線は平衡位置である。確かに $K \rightarrow 0$ の横波光学モードでは振幅比が質量比の逆数になった。見やすいものではないため3.3節のGIFアニメーションも参考にして頂きたい。

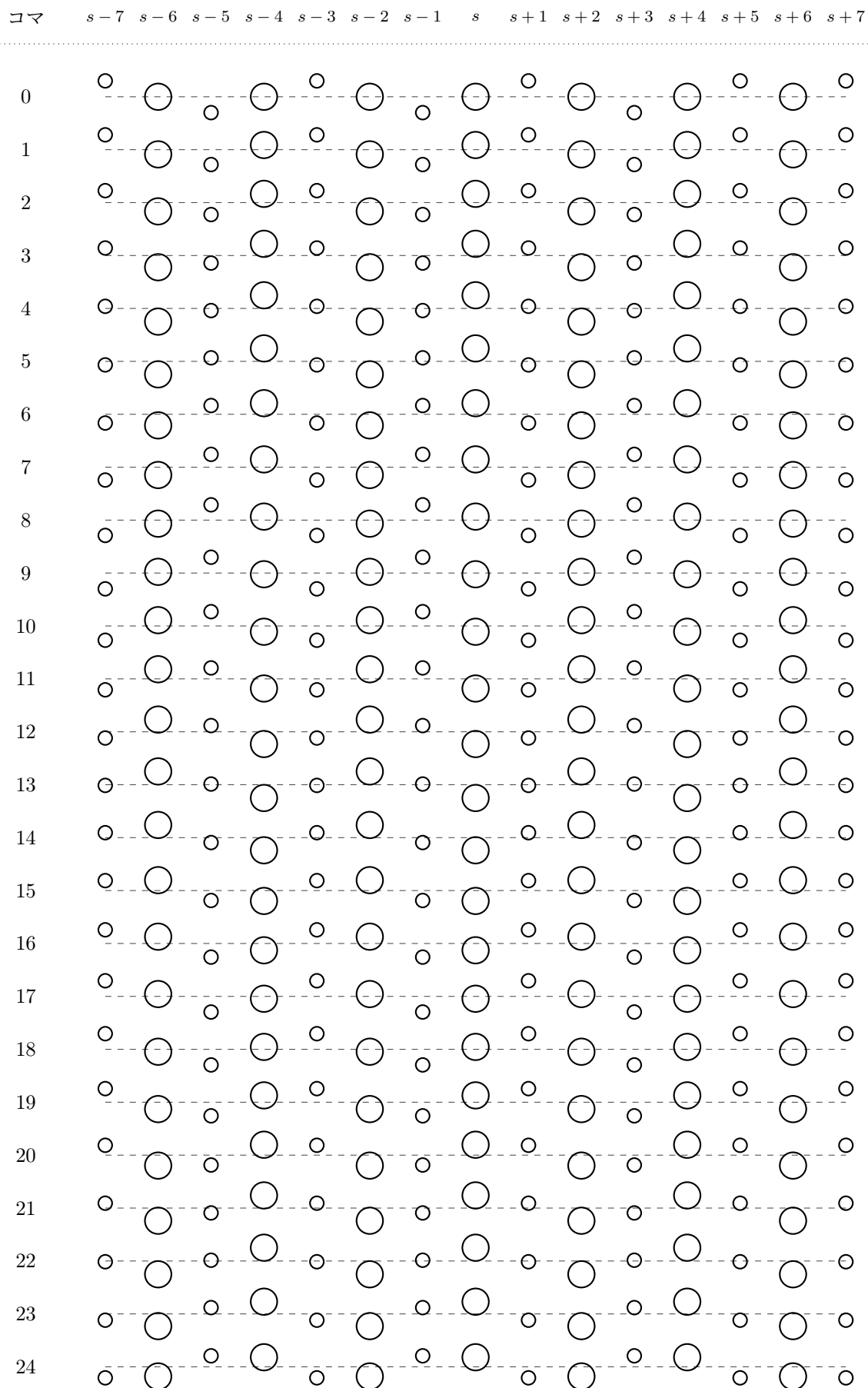
$K = 0$ 横波音響モード

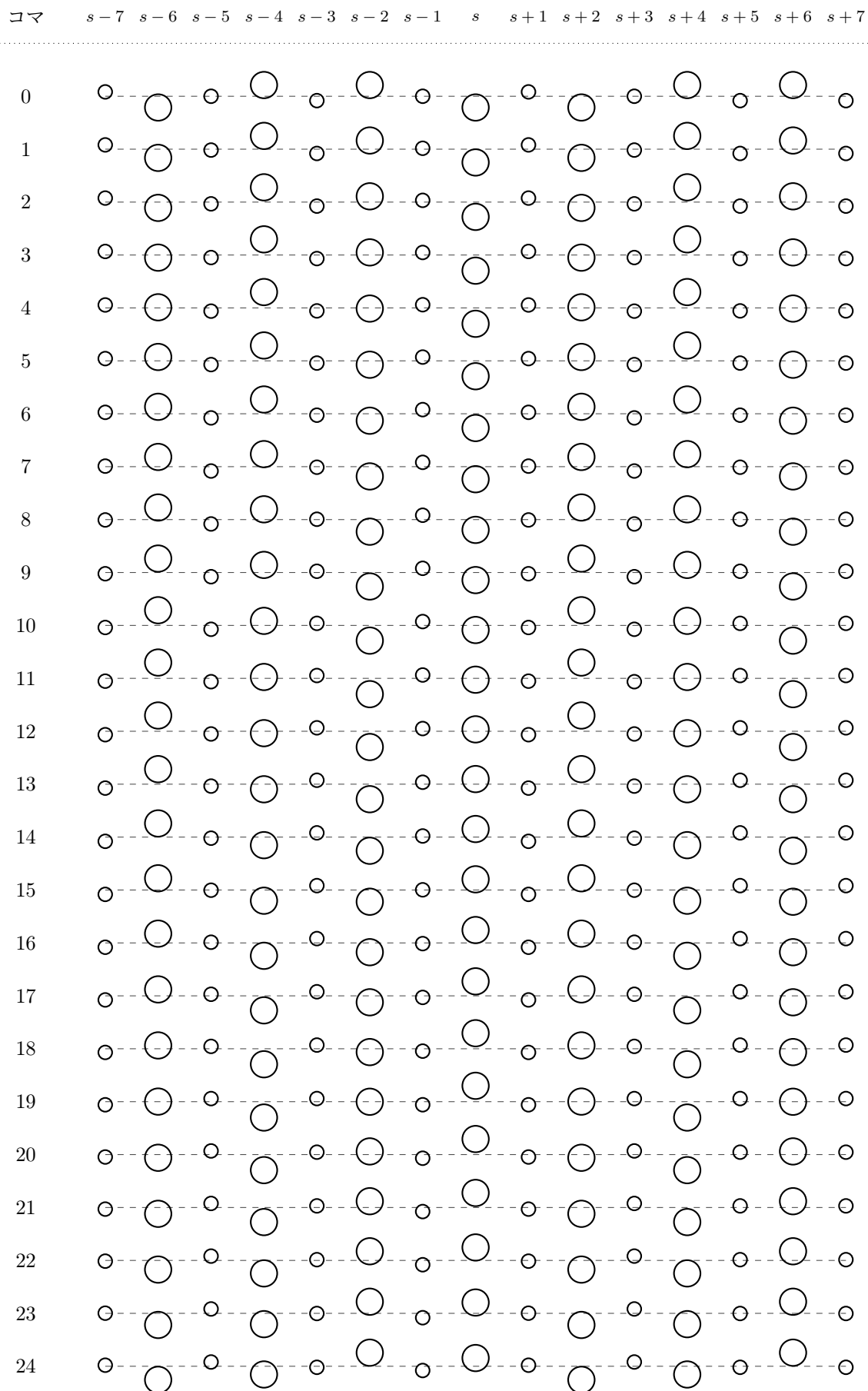
$K = 0$ 横波光学モード

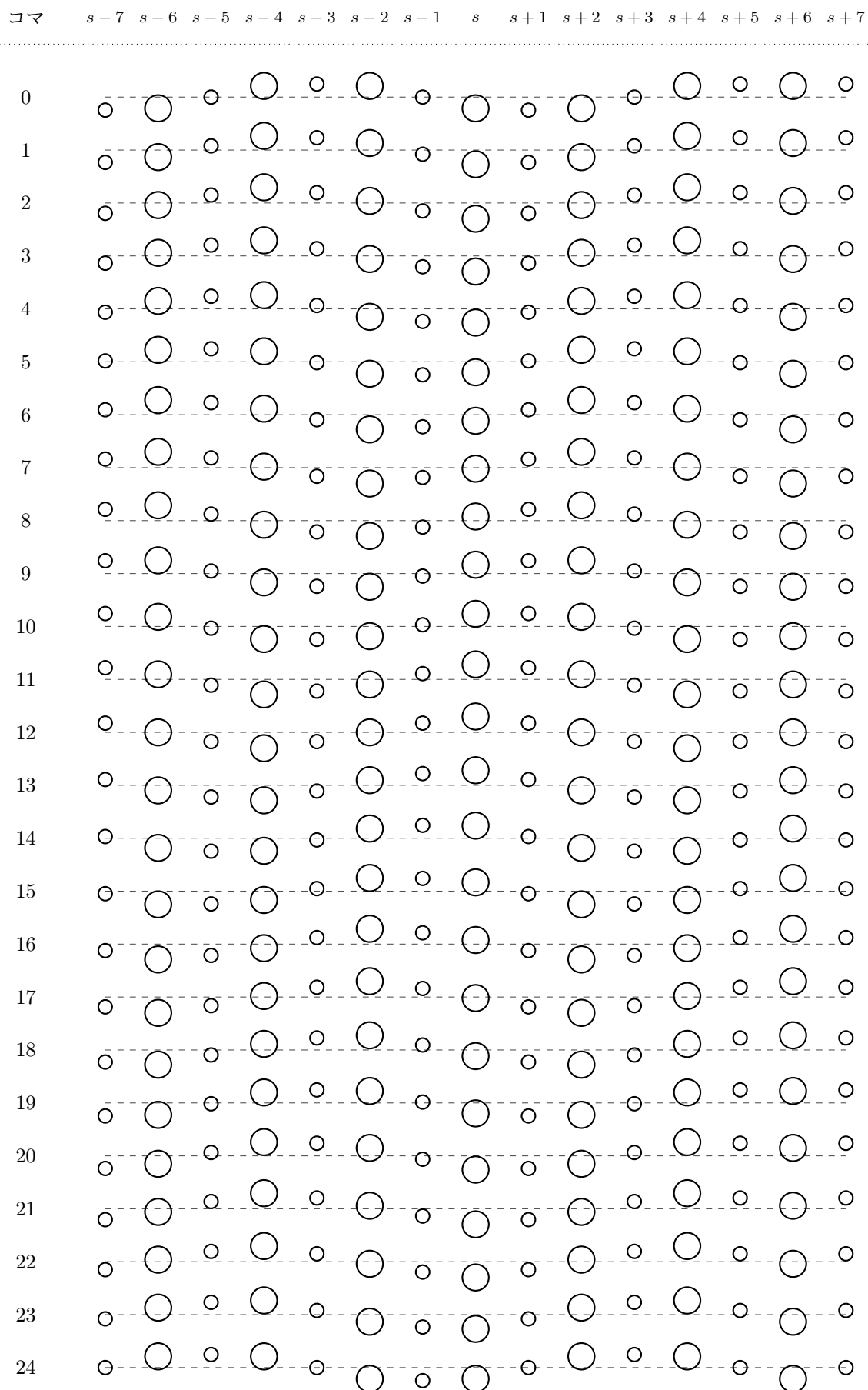
$K = \pi/4a$ 横波音響モード


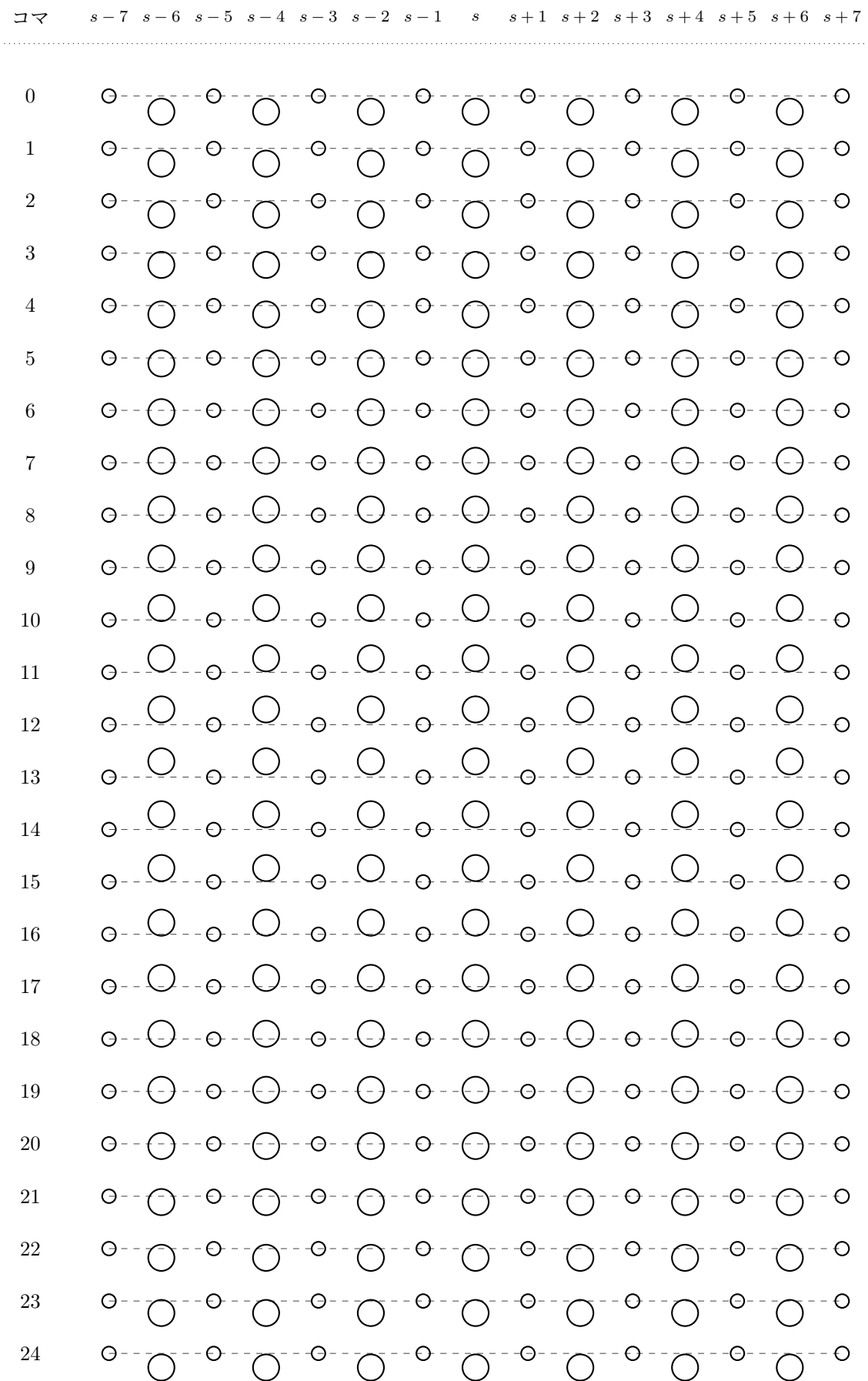
$K = \pi/4a$ 横波光学モード


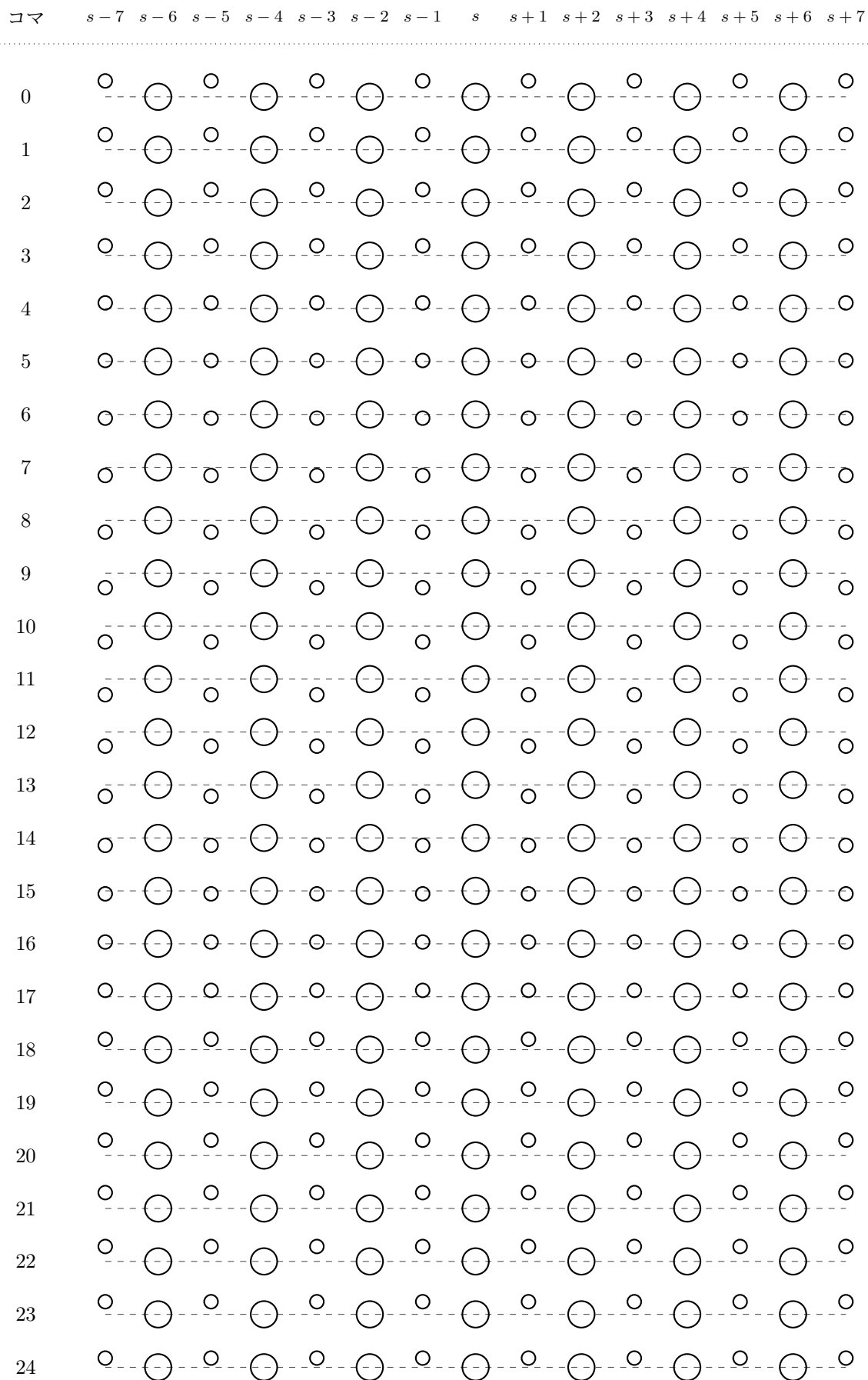
$K = \pi/2a$ 横波音響モード


$K = \pi/2a$ 横波光学モード


$K = 3\pi/4a$ 横波音響モード


$K = 3\pi/4a$ 横波光学モード


$K = \pi/a$ 横波音響モード


$K = \pi/a$ 横波光学モード


3.3 GIF

メールで転送するにはサイズが大きすぎるため、ファイルへのリンク (GitHub) を参照のこと：

<https://github.com/temmie-v/phonon-exercise/blob/master/ex2extra/movie.gif>

なお、左列が音響モード、右列が光学モードで、1 行目 (上) から順に $K = 0, \pi/4a, \pi/2a, 3\pi/4a, \pi/a$ となっており、それぞれの灰色の線は平衡位置を表している。

3.4 プログラムの場所

レポート中にもプログラムは載せてあるが、作成したプログラムは全て私の GitHub のコードに掲載してある。この科目で作成したものは <https://github.com/temmie-v/phonon-exercise> から閲覧可能である。

ex2solver.cpp 分散曲線と変位パターンを導出する C++ プログラム

<https://github.com/temmie-v/phonon-exercise/blob/master/ex2/ex2solver.cpp>

ex2rel.dat 分散曲線の解の出力

<https://github.com/temmie-v/phonon-exercise/blob/master/ex2/ex2rel.dat>

ex2ans.dat 原子の変位パターンの出力

<https://github.com/temmie-v/phonon-exercise/blob/master/ex2/ex2ans.dat>

ex2detail.cpp アニメーション用により詳細な原子の変位パターンを導出する C++ プログラム

<https://github.com/temmie-v/phonon-exercise/blob/master/ex2/ex2ans.dat>

ex2anime.dat アニメーション用の原子の変位パターン

<https://github.com/temmie-v/phonon-exercise/blob/master/ex2/ex2anime.dat>

anime.py 座標からアニメーションを作成する Python プログラム

<https://github.com/temmie-v/phonon-exercise/blob/master/ex2extra/anime.py>

movie.gif 完成したアニメーション

<https://github.com/temmie-v/phonon-exercise/blob/master/ex2extra/movie.gif>

□