3 回答

3.1 分散曲線

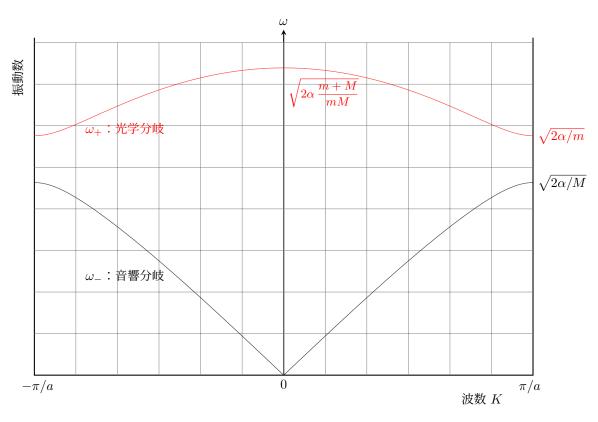


図 1 NaCl 型 2原子 1分子鎖モデルの分散関係 (M>m の場合)

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 CI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 $K\to 0$ 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 P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

コマ	s - 7 $s - 6$	s-5	s-4	s-3	s-2	s-1	s	s+1	s+2	s+3	s+4	s+5	s+6	s+7
0	0	0		0		0		0		0	0	0	0	0
1	0 0	0		0		0		0		0		0	0	O
2	ō _ O	0		0		0		0		0	0	0		0
3	0 0	0		0		0		0		0		0	0	O
4	0 0	0		0		0_		0		0	0	0		0
5	0 0	0		0		0_		0		0		0	0	
6	ō _ O _	0		0		0		0		0	0	0	0	0
7	ō Ō	0		0		0		0		0	0	0	0	0
8	ō O	0		0		0		0		0	0	0	0	0
9	0 0	0		0		0		0		0				O
10	0 0	0		0		0		0		0				O
11	0 0	0		0		0		0		0	0	0	0	
12	0 0	0		0		0		0		0	0	0	0	0
13	0 0	0		0		0		0		0	0		0	0
14	0 0	0		0				0		0	0	0	0	0
15	0 0	0		0			0	0		0	0	0	0	0
16	0 0	0		0		0		0		0				0
17	0 0	0		0_		0	0	0		0	0	0		0
18	0 0	0		0	0_	0	0	0	0_	0	0	0_	0	0
19	0 0	0		0		0		0		0	0	0		0
20	0 0	0		0		0		0		0				
21	0 0	0		0		0		0		0				O
22	0 0	0		0		0		0		0				O
23	0 0	0		0		0	0	0		0	0	0	0	0
24	o O	0		0	0_	0_	0_	0		0	0	0	0	0

K=0 横波光学モード

コマ	s-7 $s-6$ $s-5$ $s-4$	s-3 $s-2$ $s-1$	s = s+1	s + 2 s + 3	s+4 $s+5$ $s+6$ $s+7$
0	° - 0 - 0 - 0 - 0 - 0 - 0 - 0 - 0 - 0 -	0 0	-00	-0	
2	ōŌŌ-	00 -	- 0 - 0 -	-00	
3	00	00 -	- O O		
4	0	00 -	- (-) 6		
5	00-0				
6	ōOO-		- 0 0		
7			-0		
8					
9	O			-0	
10	<u></u>		-0	-0	
11	0		(-) 0-		
12	0		- (-) 6		
13	0 0 0	00 -	- (-) 0		
14	ō O ō O -		- 0 - 0 - 0		
15	000				
16	00				
17	00				
18	ō O O O -		- 0 0 -	-0	
19	0 0 0 0 -	00 _	- O O	-0	
20	0		- (-) 0		
21	000		- (-) 0-		
22	ōOO-		- 0		
23		-	_	_	
24	0 - 0 - 0 - 0		-0	-0	

$K=\pi/4a$ 横波音響モード

$K=\pi/4a$ 横波光学モード

コマ	s-7 $s-6$ $s-5$ $s-4$ $s-3$ $s-2$ $s-1$ s $s+1$ $s+2$ $s+3$ $s+4$ $s+5$ $s+6$ $s+7$
0	°
1	°
2	°
3	0
4	0
5	0000000000000
6	o O O O O O O O O O O O O
7	Ooooooo
8	OOOOOOOOO
9	
10	0-0-0-0-0-0-0-0
11	0000000
12	0000000000
13	00
14	°OO
15	°
16	°
17	°
18	°
19	° ° ° ° - ° - ° - ° - ° -
20	0000000000000
21	000000000000
22	
23	
24	OOOOOOOO

$K=\pi/2a$ 横波音響モード

コマ	s-7 $s-6$ $s-5$ $s-4$ $s-3$ $s-2$ $s-1$ s $s+1$ $s+2$ $s+3$ $s+4$ $s+5$ $s+6$ $s+7$
0	°
1	° O O O O O O O O O O O O O - O
2	° O O O O O O O O O O O O O -
3	° O O O O O O O O O O O O O O O - O
4	0000000000000.
5	0000000000000.
6	0000000000000
7	0.0.0.0.0.0.0.0.0.0.0.0.0
8	
9	0000000000000
10	0-0-0-0-0-0-0-0-0-0
11	0-0-0-0-0-0-0-0-0-0
12	0-0-0-0-0-0-0-0-0-0-0
13	0000000000000
14	0000000000000
15	0000000000000
16	0000000000000
17	0000000000000
18	0000000000000
19	0000000000000
20	0000000000000
21	00000000
22	oOOOOOOOO
23	oOOOoOoOo
24	oOOOOOOOOO

$K=\pi/2a$ 横波光学モード

コマ	s-7 $s-6$ $s-5$ $s-4$	s-3 $s-2$ $s-1$	s = s+1	s+2 $s+3$	s+4 $s+5$ $s+6$ $s+7$
0	°		- (-)		
1		_	_	_	
2	_	•		•	
3	_			_	
4					
5					00
6					
7					
8		_		_	
9	•	•	•		
10	_	_	_	_	
11	_	_		_	
12	$\widehat{}$	\sim	_	\sim	
13	_	\sim	_	\sim	OOOO
14	0	·0 0		· -O	
15					<u>-</u> <u>-</u> <u>-</u> <u>-</u>
16	• -	_	_	_	
17	9			_	
18	•	0		_	
19				-	
20	_	_	_	_	
21	0000		-00-		
22			_		
23				\sim	
24	0 - 0 - 0	0 0 0	-0		

$K=3\pi/4a$ 横波音響モード

コマ	s-7 $s-6$ $s-5$ $s-4$ $s-3$ $s-2$ $s-1$ s $s+1$ $s+2$ $s+3$ $s+4$ $s+5$ $s+6$ $s+7$
0	0
1	0
2	000000000000
3	00000000000
4	0000000000000
5	0000000000000
6	0000000000000
7	0000000000000
8	0000000000000
9	0000000000000
10	000000000000
11	0
12	0
13	000000000000
14	0000000000000
15	0000000000000
16	000000000000
17	0000000000000
18	0
19	0000000000000
20	0000000000000
21	0
22	0000000000000
23	0
24	o

$K=3\pi/4a$ 横波光学モード

コマ	s - 7 $s - 6$ $s - 5$	s-4 $s-3$	s-2 $s-$	- 1 s	s+1	s+2	s+3	s+4	s+5 s	+6 s	+7
0	ōO-) <u>-</u> -	<u>-</u> -		0		_0() <u> </u>	Ō
1	o O O -	_Oo) <u>-</u> -					(<u> </u>	Ō
2	ōO <u>O</u> -	<u>O</u> o		· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	- <u>-</u> -		0	0	- - - (<u> </u>	Ō
3	000	_00_		<u> </u>	O -		O	0	- 0 (<u> </u>	0
4	00	_O			- 0		<u> </u>	0_	-0	<u></u>	0
5	000-	-0		5		O	0_		- 0 7	<u></u>	Θ
6	000			5	- O		<u> </u>		` o) (0
7	0_0_0			5	_ <u>O</u>		O				Ō
8	000_	- <u>-</u>		o (-)	_ <u>O</u>		0.) (Ō
9	o O o _) O -		O	0		() ,	Ō
10	ō O -			90-	<u> </u>				() 	Ō
11	00			00	<u> </u>					_ 	Ō
12	0			0					- - (<u> </u>	Ō
13	0	₀		<u> </u>	O		- <u>-</u>			<u> </u>	0
14	00	- 		2			O		- O ()C	0
15	00	-0		2	- 6				- O C	<u>_</u> (Θ
16	00		0_0	2 (-) -	0		- - -		_ Q (<u>_</u>	0
17	000-		0	2	- <u>-</u> -		0		<u>o</u> _(<u>_</u>	Ō
18	000-) (<u> </u>	<u>-</u> -				_ <u>o</u> _ (<u>_</u> (Ō
19	ōO) -	<u></u> -				(<u> </u>	Ō
20	ōO	0 0)	<u>-</u> -		0	0	(<u> </u>	Ō
21	ōOO	00_		O	<u>-</u> -		0	0	(<u> </u>	Ō
22	000				0		_O_	0	- Q (<u> </u>	Q
23	00	O		5	- 0		_ <u>_</u>			<u> </u>	0
24	000	-0					O		-07) (Θ
			$\overline{}$	$\overline{}$					`	\sim	

 $s-7 \ s-6 \ s-5 \ s-4 \ s-3 \ s-2 \ s-1 \ s \ s+1 \ s+2 \ s+3 \ s+4 \ s+5 \ s+6 \ s+7$

$K = \pi/a$ 横波音響モード

コマ

$K=\pi/a$ 横波光学モード

コマ	s-7 $s-6$ $s-5$ $s-4$ $s-3$ $s-2$ $s-1$ s $s+1$ $s+2$ $s+3$ $s+4$ $s+5$ $s+6$ $s+7$
0	°
1	°O°O°O°O°O°
2	° · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
3	00000000
4	000000000
5	000000
6	000000
7	0000000000000
8	oOoOoOo
9	O
10	
11	<u></u>
12	0000000000000
13	0000000000000
14	000000000000000000000000000000
15	00000000000000000000000000000
16	0000000000000000000000000000
17	000000000_0_0_0_0_0_0_0
18	000000000
19	
20	°
21	°
22	°
23	
24	0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

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