

物性物理学

わっふる。

2021 年 7 月 14 日

K の質量 m , Br の質量 M とする。これがⁱ, $a/2$ ごとに交互に並んで、最近接のサイトとのみ相互作用するモデルを用いる。さらに、相互作用はとして、距離に比例する比例定数 μ の復元力が働くものとする。

i 番目の K, Br の平衡点からのずれをそれぞれ x_i, X_i とする。これがⁱ, 連立微分方程式

$$m\ddot{x}_i = 2\mu x_i - \mu(X_{i-1} + X_i) \quad (1)$$

$$m\ddot{X}_i = 2\mu X_i - \mu(x_{i+1} + x_i) \quad (2)$$

を満たす。 x_i, X_i ともに関数形としては $e^{i(kx - \omega t)}$ とし、K の振幅 b , Br の振幅 B とする。これがⁱ, この条件から

$$m\omega^2 b = 2\mu \left(b - B \cos \frac{ks}{2} \right) \quad (3)$$

$$M\omega^2 B = 2\mu \left(B - b \cos \frac{ka}{2} \right) \quad (4)$$

となる。これがⁱ, non trivial な解をもつために、

$$\det \begin{pmatrix} 2\mu - m\omega^2 & -2\mu \cos ka/2 \\ -2\mu \cos ka/2 & 2\mu - M\omega^2 \end{pmatrix} = mM\omega^4 - 2\mu(m + M)\omega^2 + 4\mu^2 \left(1 - \cos \frac{ka}{2} \right) = 0 \quad (5)$$

でなければならない。これを ω^2 について解くと、

$$\omega^2 = \mu \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) \pm \mu \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 ka/2}{mM}} \quad (6)$$

となる。二解のうち、負のほうが音響モードである。

さて、zone 境界, i.e., $k \rightarrow \pi/a$ のとき、の ω は (5) で見るとわかりやすく、 $\cos ka/2 \rightarrow 0$ なので、

$$\omega_{k \rightarrow \pi/a} = \frac{\mu(m + M) - \mu(M - m)}{mM} \quad (7)$$

$$= \frac{2\mu}{M} \quad (8)$$

となり、ⁱ 与えられている数値から、 μ/M が分かる。また、[Rika20] より、K の原子量が 39, Br の原子量が 79 ということから、 μ/m もわかるので、各点で ω の値が求まる。 $k \in [-\pi/a, \pi/a]$ で ω をプロットすると Fig.1 のようになる。計算およびグラフの描画には python を用いた。

ⁱ. (7) で平方根を外すときに $M > m$ であることを使っている。

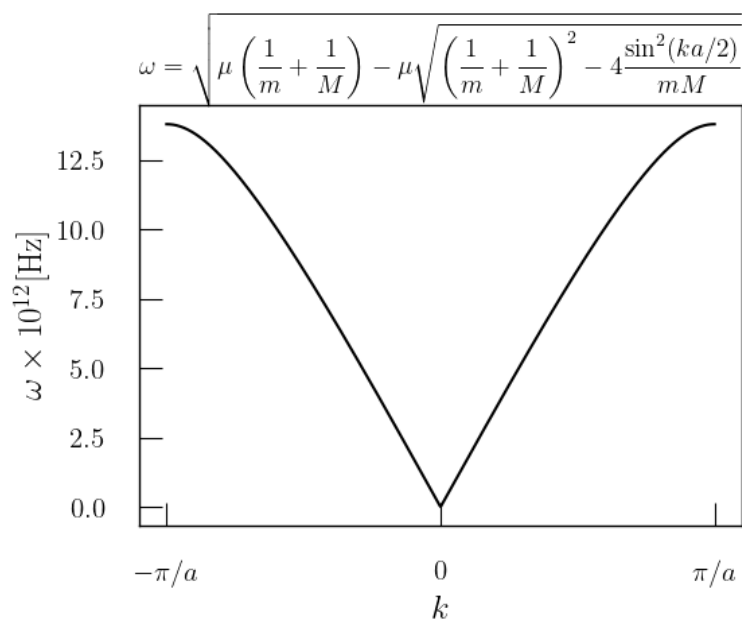


図1 KBr の $(1/2, 1/2, 1/2)$ 方向の分散関係

参考文献

[Rika20] 国立天文台編. “理科年表 2020” 丸善.