物性物理学

わっふる。

2021 年 7 月 15 日

K の質量 m，Br の質量 M とする．これが，$a/2$ 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，連立微分方程式

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

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

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，

この条件から

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

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

となる．これが，non trivial な解をもつために，

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

でなければならない．これを ω^2 について解くと，

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

となる．二解のうち，負のほうを音響モードといい，正のほうを光学モードという．[i.]

さて，zone 境界，i.e.,$k \to \pi/a$ のとき，の音響モードの角振動数は ω は (5) で見るとわかりやすくて，$\cos ka/2 \to 0$ なので，

$$\left.\omega_{\mathrm{LA}}^2\right|_{k\to\pi/a} = \frac{\mu(m+M) - \mu(M-m)}{mM} \tag{7}$$

$$= \frac{2\mu}{M} \tag{8}$$

となり，[ii.] 与えられている数値から，μ/M が分かる．長波長極限[iii.] は

$$\left.\omega_{\mathrm{LA}}^2\right|_{k\to 0} = x \tag{9}$$

である．[iv.]

また，光学モードについて，zone 境界で

$$\left.\omega_{\mathrm{LO}}^2\right| = \frac{2\mu}{m} \tag{10}$$

i. さらに，それぞれに対して縦波モード，横波モードもあり，LA(longitudinal acoustic), TA(transvase acoustic), LO(longitudinal optical), TO(transvase optical) と呼ばれる．ただし，ここでは一次元系を考えているので，縦波モードのみ扱う．

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

iii. 波長 $\lambda \to \infty$ で波数 $k \to 0$ であることに注意

iv. 関数形を残す最低次までの近似をする．

となり，長波長極限は

$$\omega_{\mathrm{LO}}^2\Big| = 2\mu\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right) \tag{11}$$

となる．

これらは [Rika20] より，K の原子量が 39，Br の原子量が 80 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．

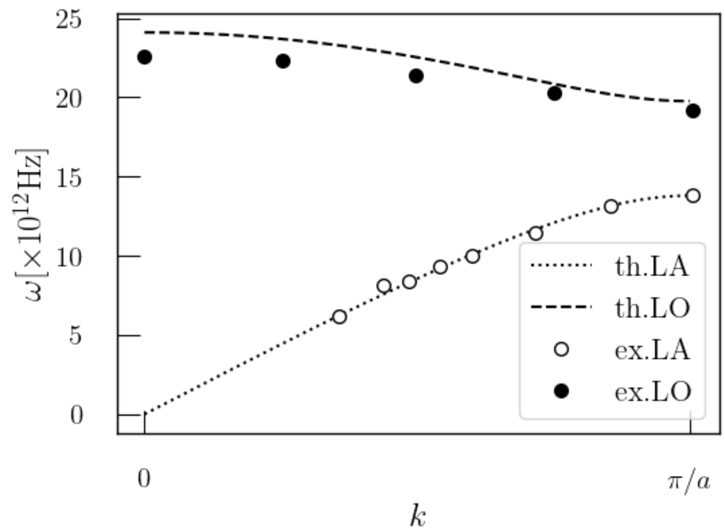

図 1　KBr の (1/2, 1/2, 1/2) 方向の分散関係．Eq.(6) を理論値として th.LA, th.LO として記入．実験データ ex.LA, ex.LO は [WBCC63] のデータを用いた．

よくよく思い出してみると，これは単に一次元系のとても簡単なモデルだったのにもかかわらず，とくに LA モードのほうは実験とよく合っている．

参考文献

[Rika20] 国立天文台編．“理科年表 2020” 丸善．

[WBCC63] A. D. B. Woods, B. N. Brockhouse, R. A. Cowley, W. Cochran. “Lattice Dynamics of Alkali Halide Crystals. II. Experimental Studies of KBr and NaI”. PhysRev.131.1025.