課題

Webclassで提出して下さい
締切：6/28 (月) 17:00

7.1　図のように質量 M の原子が K_1, K_2 とバネ定数の異なる 2 種類のバネによってつながっている 1 次元格子を考える。このときどのような格子振動が生じるかを求め，格子振動の分散関係を求めなさい。

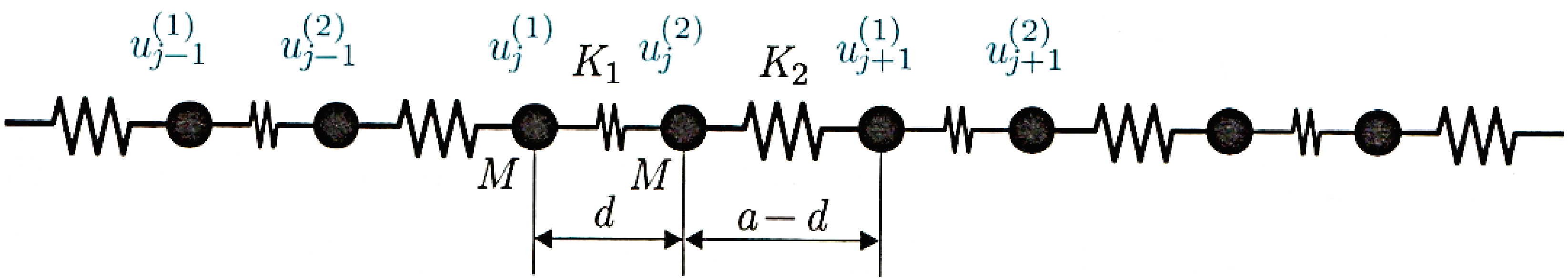


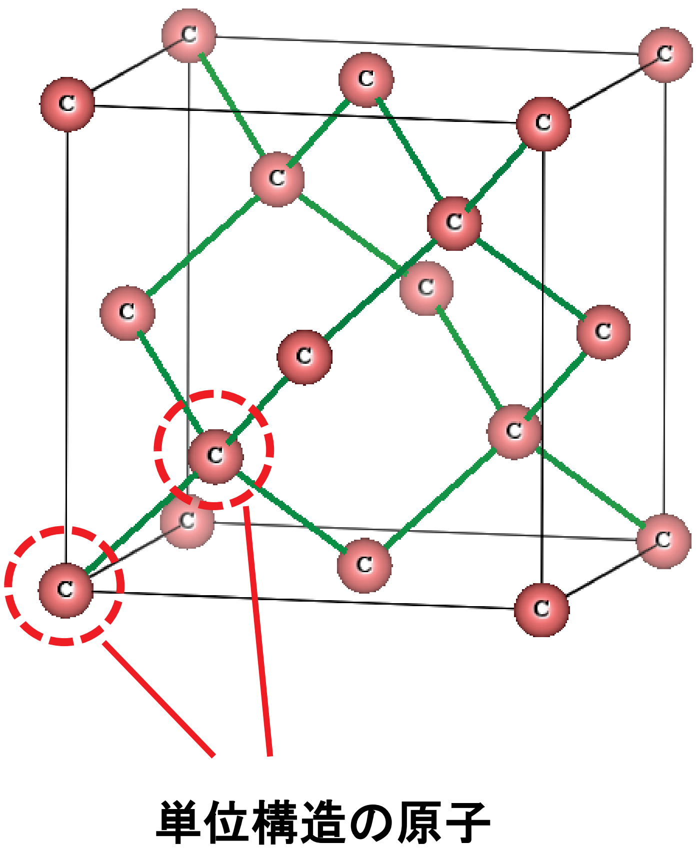
図　バネ定数の異なる 2 種類のバネによってつながっている 1 次元格子

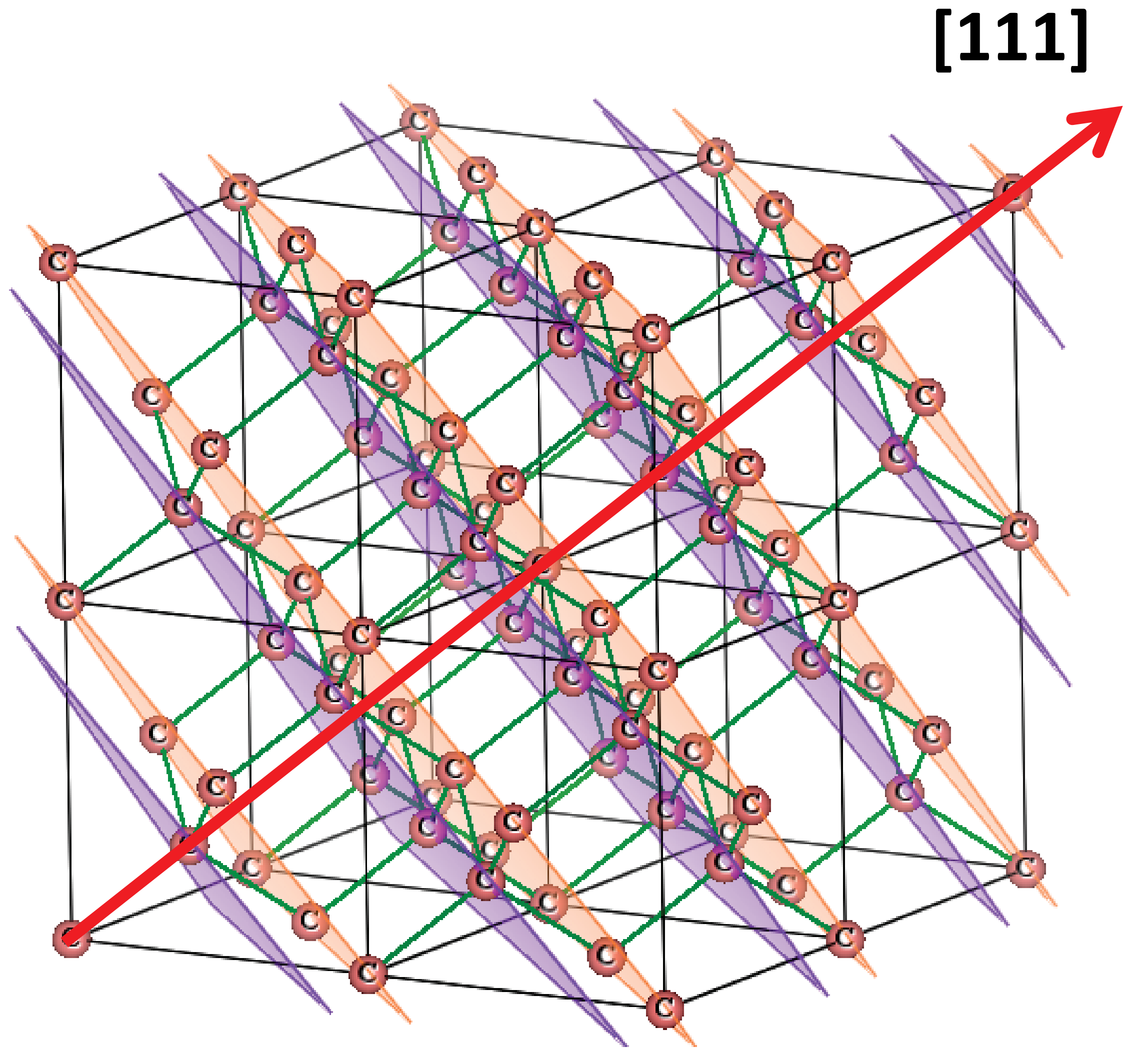
(1) $K_1 = K$, $K_2 = 2K$ として分散関係を求め、図示して下さい

(2) 音響モードについて、長波長極限での波の伝わる速さを求めて下さい

(3) k=0,　π / a における原子の振動の様子を説明して下さい

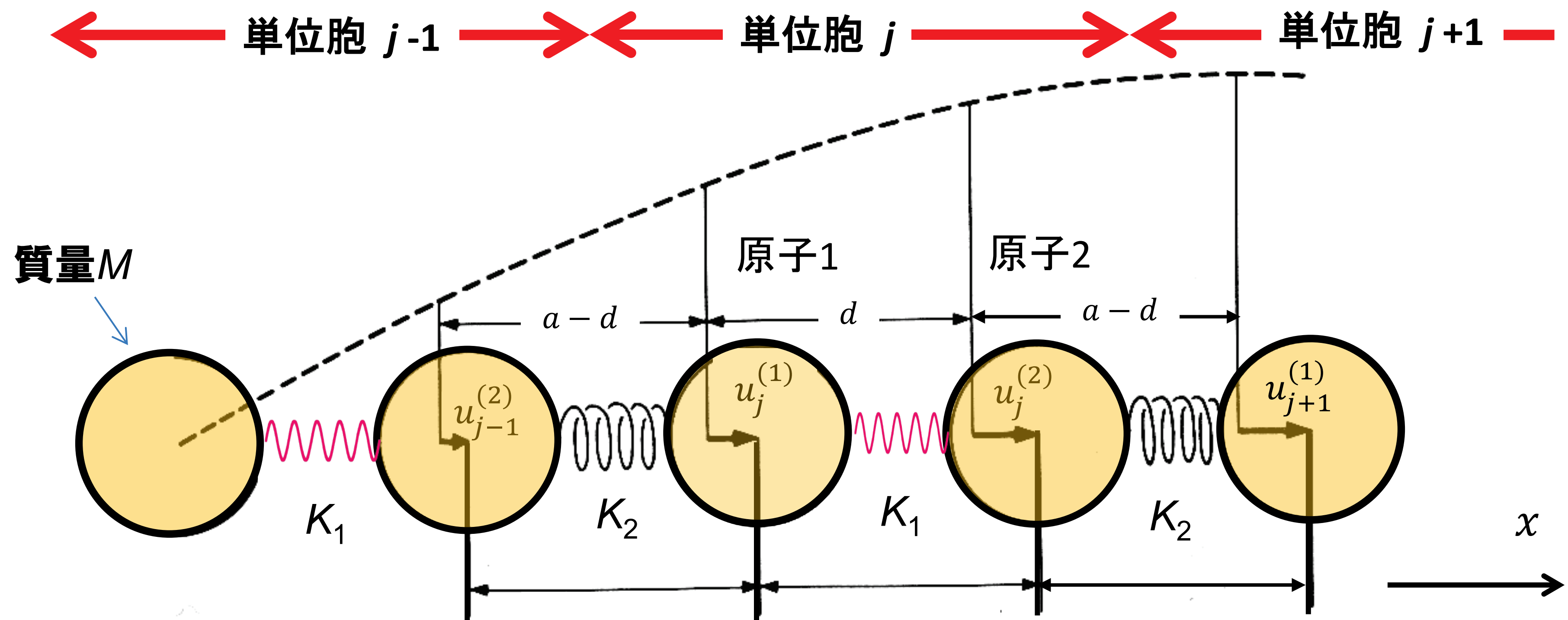
ダイヤモンド構造





２種類のバネからなる1次元の格子振動

バネ定数 K_1, K_2 のバネ ($K_2 > K_1$)が、質量 M の原子に交互につながれた1次元鎖

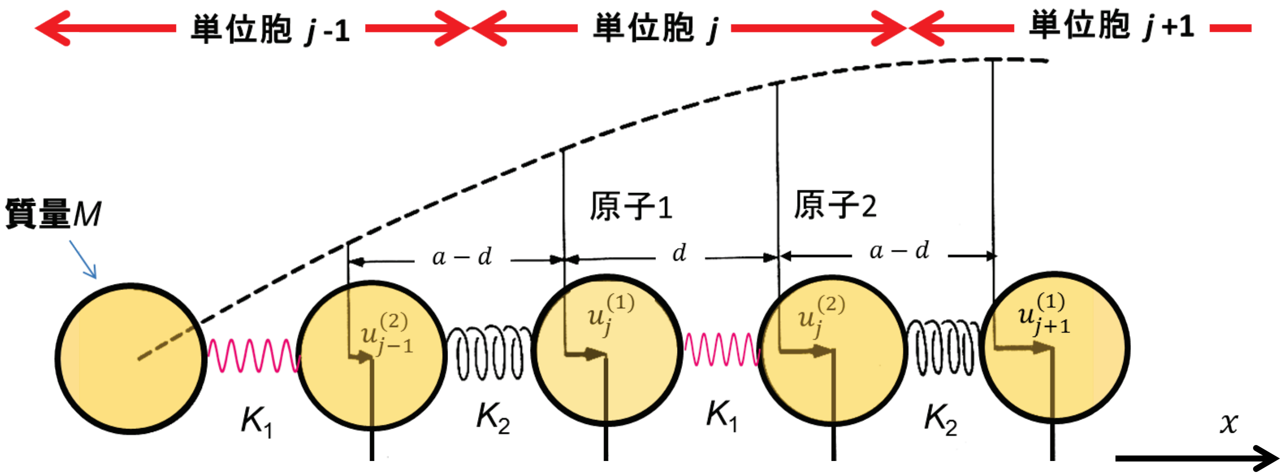


原子間のバネの長さ $a-d+u_j^{(1)}-u_{j-1}^{(2)}$ $\quad d+u_j^{(2)}-u_j^{(1)}$ $\quad a-d+u_{j+1}^{(1)}-u_j^{(2)}$

原子1に働く力： $-K_2\left(u_j^{(1)}-u_{j-1}^{(2)}\right)\quad +K_1\left(u_j^{(2)}-u_j^{(1)}\right)$

原子2に働く力 $-K_1\left(u_j^{(2)}-u_j^{(1)}\right)\quad +K_2\left(u_{j+1}^{(1)}-u_j^{(2)}\right)$

分散関係の導出①



原子1の運動方程式 $$M\frac{d^2u_j^{(1)}}{dt^2}=F_j^{(1)}=K_1\left(u_j^{(2)}-u_j^{(1)}\right)-K_2(u_j^{(1)}-u_{j-1}^{(2)})$$

原子2の運動方程式 $$M\frac{d^2u_j^{(2)}}{dt^2}=F_j^{(2)}=K_2(u_{j+1}^{(1)}-u_j^{(2)})-K_1(u_j^{(2)}-u_j^{(1)})$$

各原子は同じ振動数で振動し、波数kの波が伝搬すると考え、*j* 番目の単位胞内の原子1，2の変位を

$$u_j^{(1)}=Ae^{ijka}e^{-i\omega t}$$

$$u_j^{(2)}=Be^{ijka}e^{-i\omega t}$$

と仮定

分散関係の導出②

原子1の運動方程式

$$-M\omega^2 A e^{ijka} e^{-i\omega t} = K_1 (B e^{ijka} e^{-i\omega t} - A e^{ijka} e^{-i\omega t}) - K_2 (A e^{ijka} e^{-i\omega t} - B e^{i(j-1)ka} e^{-i\omega t})$$

原子2の運動方程式

$$-M\omega^2 B e^{ijka} e^{-i\omega t} = -K_1 (B e^{ijka} e^{-i\omega t} - A e^{ijka} e^{-i\omega t}) + K_2 (A e^{i(j+1)ka} e^{-i\omega t} - B e^{ijka} e^{-i\omega t})$$

$$\boxed{\begin{aligned} &(K_1 + K_2 - M\omega^2)A - (K_1 + K_2 e^{-ika})B = 0 \\ &-(K_1 + K_2 e^{ika})\mathrm{A} + (K_1 + K_2 - M\omega^2)B = 0 \end{aligned}}$$

$A = B = 0$ 以外の解が存在する条件:

$$\begin{vmatrix} (K_1 + K_2) - M\omega^2 & -\left(K_1 + K_2 e^{-ika}\right) \\ -\left(K_1 + K_2 e^{ika}\right) & (K_1 + K_2) - M\omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

$$[(K_1 + K_2) - M\omega^2]^2 - \left(K_1 + K_2 e^{ika}\right)\left(K_1 + K_2 e^{-ika}\right) = 0$$

分散関係の導出③

ω 2 に関する二次方程式:

$$M^2\omega^4 - 2M(K_1 + K_2)\omega^2 + 2K_1K_2(1 - \cos ka) = 0$$

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{1}{M}\left[(K_1 + K_2) \pm \sqrt{(K_1 + K_2)^2 - 4K_1K_2\,\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)}\right]$$

K_1=K、K_2=2K を代入すると下式を得る

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{1}{M}\left[3K \pm \sqrt{9K^2 - 8K^2\,\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)}\right]$$

● k=0のとき

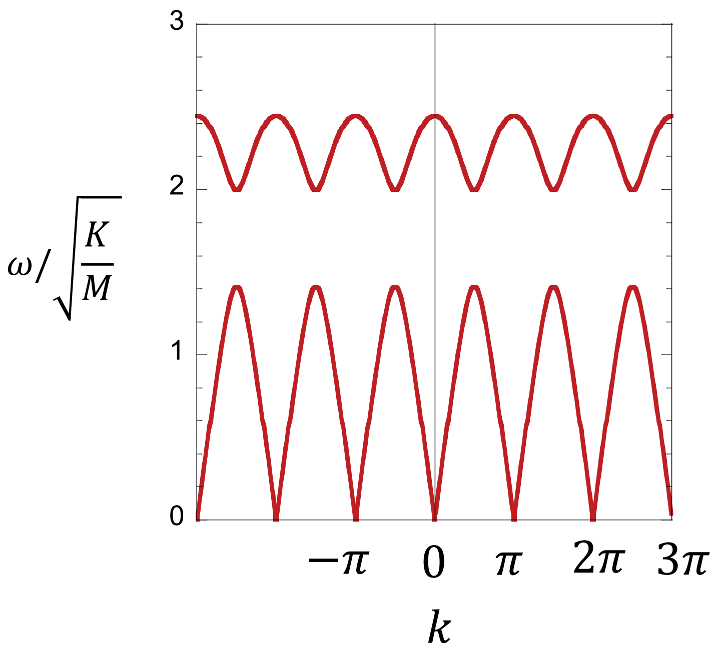
$$\omega_+ = \sqrt{\frac{6K}{M}} \qquad \omega_- = 0$$

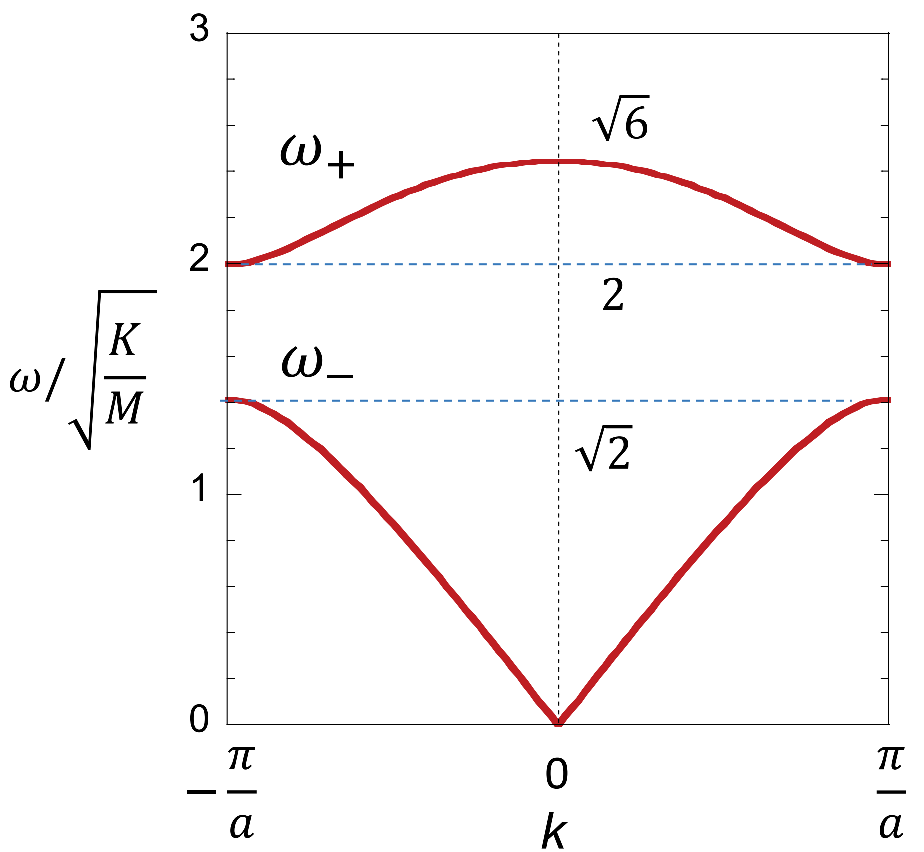
●k=±π/a のとき

$$\omega_+ = 2\sqrt{\frac{K}{M}} \qquad \omega_- = \sqrt{\frac{2K}{M}}$$

分散関係の導出④

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{1}{M}\left[3K \pm \sqrt{9K^2 - 8K^2\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)}\right]$$





長波長領域における波の伝わる速さ

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{1}{M}\left[3K \pm \sqrt{9K^2 - 8K^2\ \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)}\ \right] \cong \frac{1}{M}\left[3K \pm \sqrt{9K^2 - 8K^2\left(\frac{ka}{2}\right)^2}\ \right]$$

$$= \frac{3K}{M}\left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{2}{9}(ka)^2}\ \right]$$

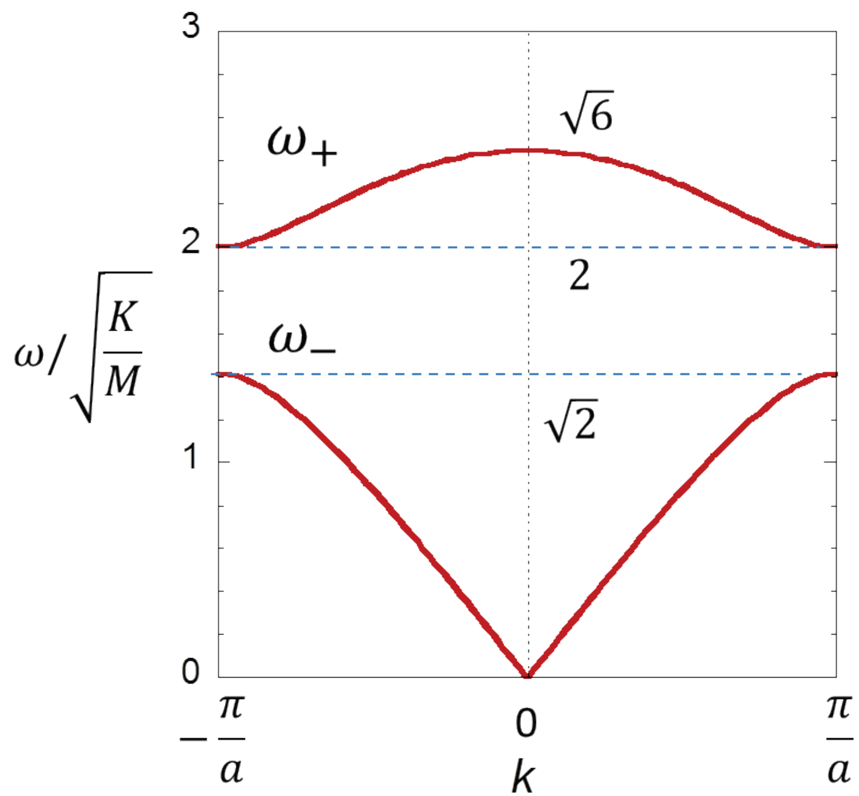
$$\omega^2{}_{\pm} \cong \frac{3K}{M}\left[1 \pm \left(1 - \frac{1}{9}(ka)^2\right)\right]$$

音響モード ω_-

$$\omega_- = ka\sqrt{\frac{K}{3M}}$$

波の伝わる速さ:

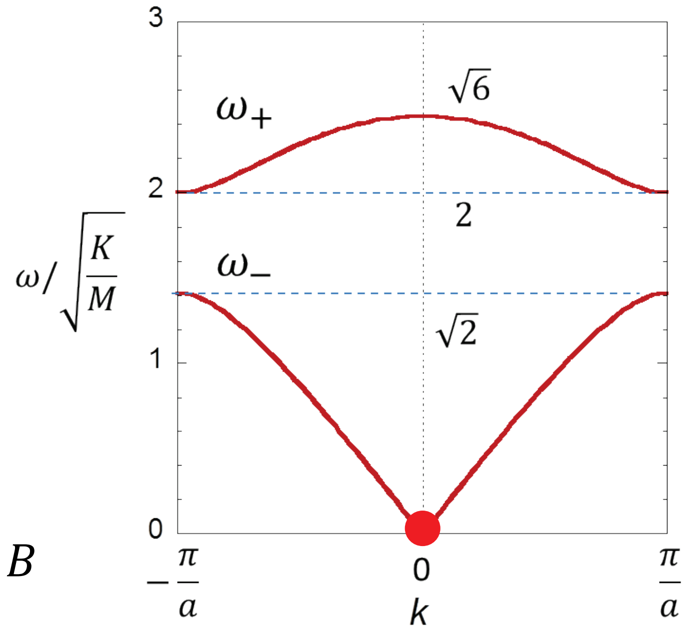
$$a\sqrt{\frac{K}{3M}}$$



$k = 0$ における原子振動の様子①

$$(3K - M\omega^2)A - (K + 2Ke^{-ika})B = 0$$

$$-(K + 2Ke^{ika})A + (K + 2K - M\omega^2)B = 0$$

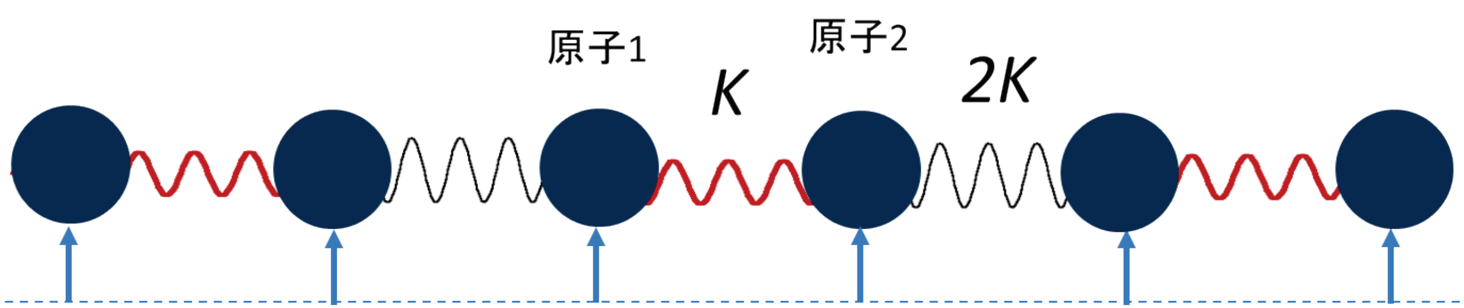


音響モード ω_-

A, Bに関する連立方程式で、ω = 0, k=0を代入

$$\begin{cases} 3KA - (K + 2K)B = 0 \\ -(K + 2K)A + (K + 2K)B = 0 \end{cases} \Rightarrow A = B$$

原子1, 2 が同じ方向に同じだけ変位している



$k = 0$ における原子振動の様子②

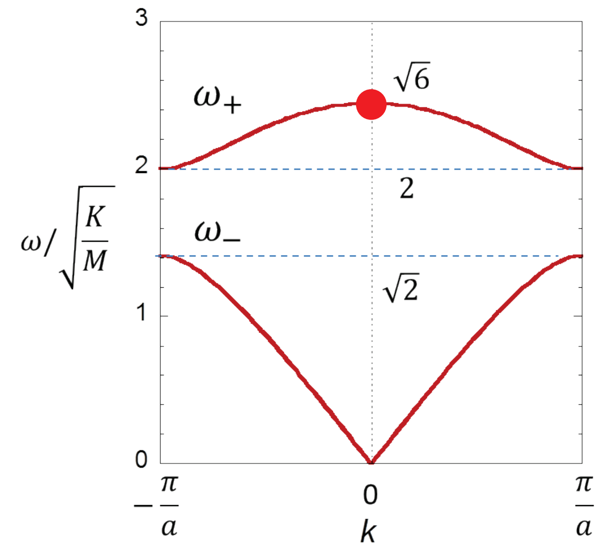
$$(3K - M\omega^2)A - (K + 2Ke^{-ika})B = 0$$

$$-(K + 2Ke^{ika})A + (K + 2K - M\omega^2)B = 0$$

光学モード ω_+

$\omega_+ = \sqrt{\dfrac{6K}{M}}$ **をA, Bに関する連立方程式に代入し**
k = 0　とする

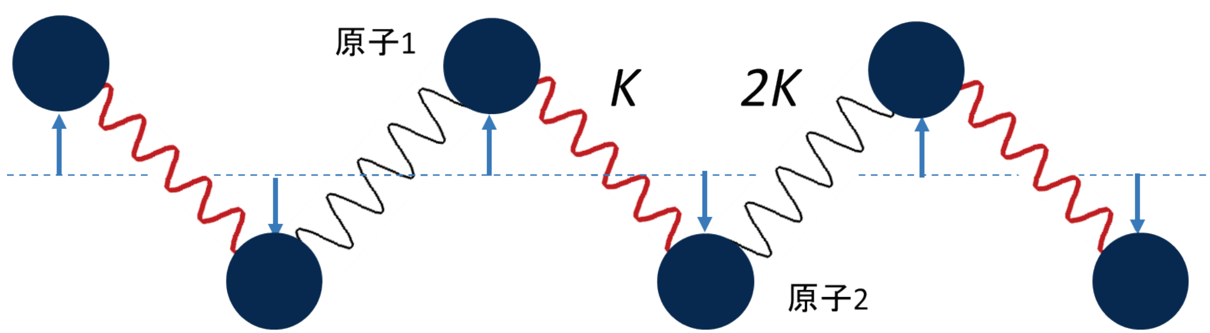
$$\begin{cases} (3K - 6K)A - (K + 2K)B = 0 \\ -(K + 2K)A + (K + 2K - 6K)B = 0 \end{cases} \Rightarrow A = -B$$



$$u_j^{(1)} = Ae^{-i\omega t}$$

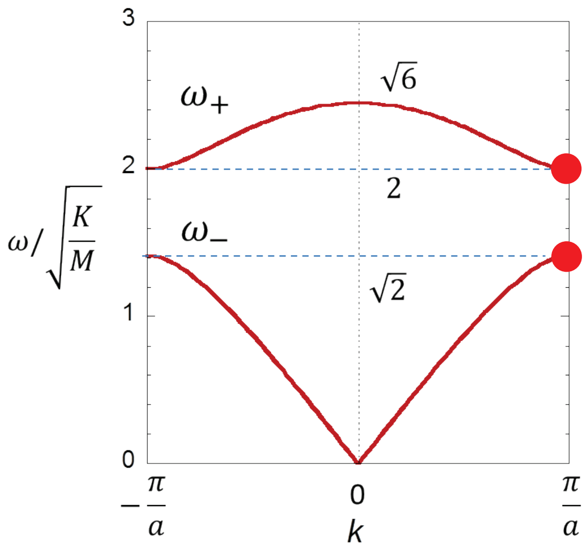
$$u_j^{(2)} = -Ae^{-i\omega t}$$

原子1, 2 が反対方向に同じ振幅をもって 角振動数 ω_- で振動



k = π/a における原子振動の様子①

$$(3K - M\omega^2)A - (K + 2Ke^{-ika})B = 0$$
$$-(K + 2Ke^{ika})A + (K + 2K - M\omega^2)B = 0$$



k= π/a を代入

$$\begin{cases} (3K - M\omega^2)A + K\,B = 0 \\ KA + (3K - M\omega^2)B = 0 \end{cases}$$

音響モード ω_-

$\omega_- = \sqrt{\frac{2K}{M}}$ より、 $A = -B$ ➡

$$\begin{cases} u_j^{(1)} = Ae^{ij\pi}e^{-i\omega t} \\ u_j^{(2)} = -Ae^{ij\pi}e^{-i\omega t} \end{cases}$$

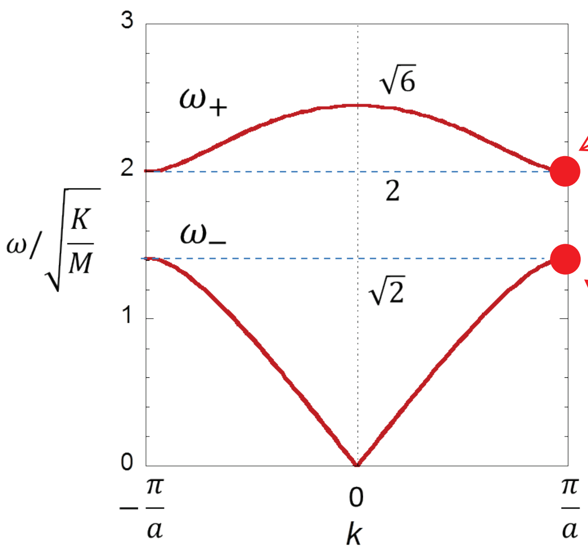
光学モード ω_+

$\omega_+ = 2\sqrt{\frac{K}{M}}$ より、 $A = B$ ➡

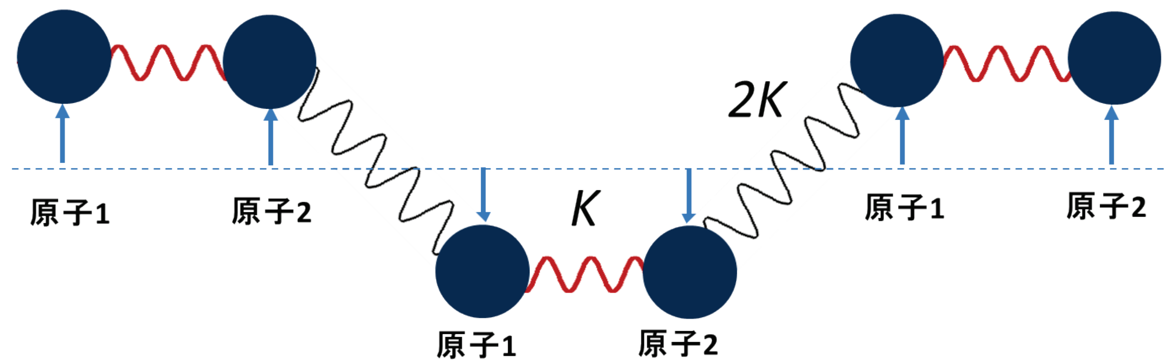
$$\begin{cases} u_j^{(1)} = Ae^{ij\pi}e^{-i\omega t} \\ u_j^{(2)} = Ae^{ij\pi}e^{-i\omega t} \end{cases}$$

$k = \pi/a$ における原子振動の様子②

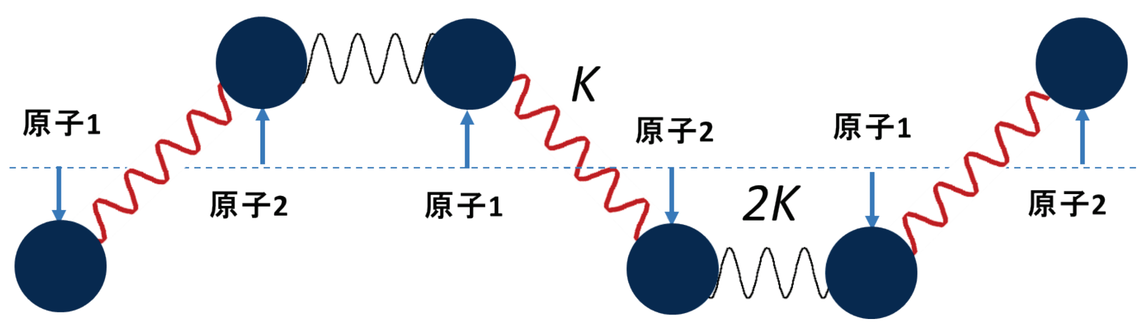
$$
\begin{cases}
u_j^{(1)} = Ae^{ij\pi}e^{-i\omega t} \\
u_j^{(2)} = Ae^{ij\pi}e^{-i\omega t}
\end{cases}
$$



光学モード

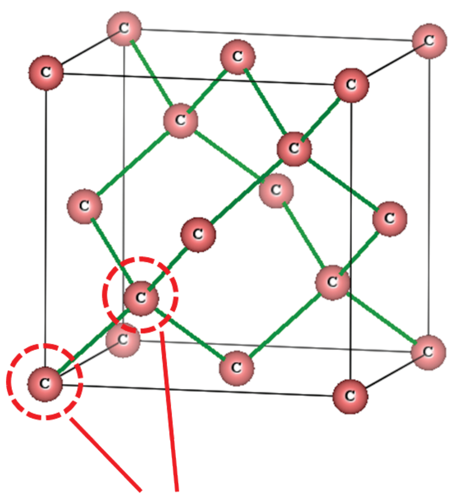


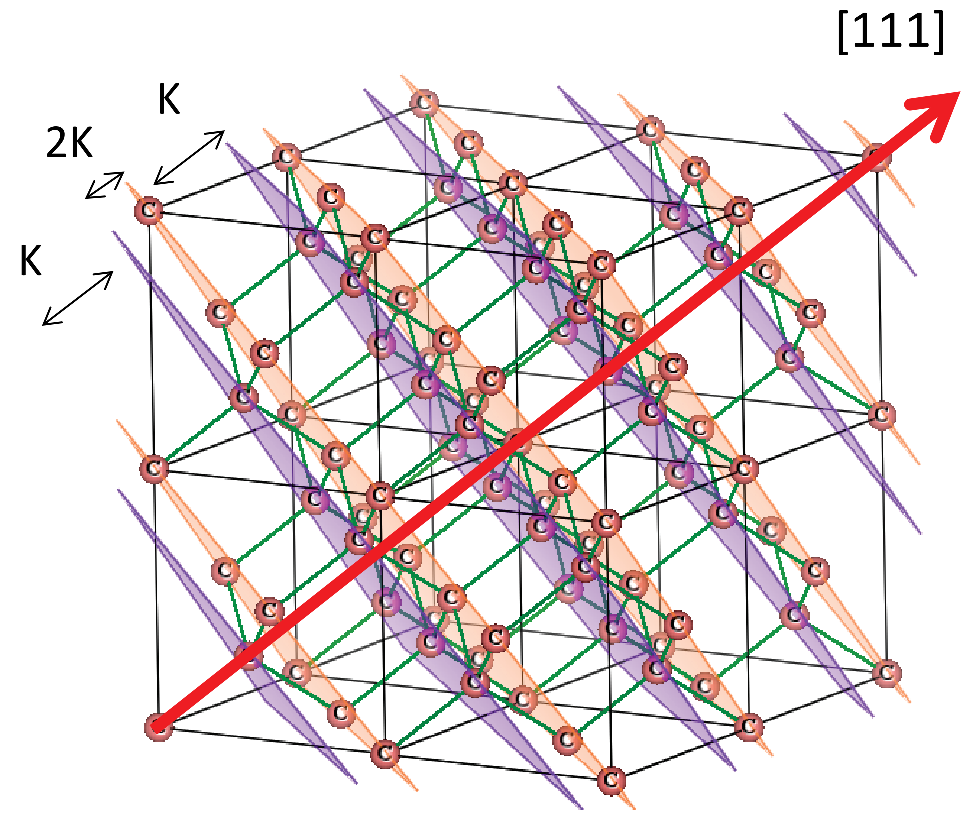
音響モード

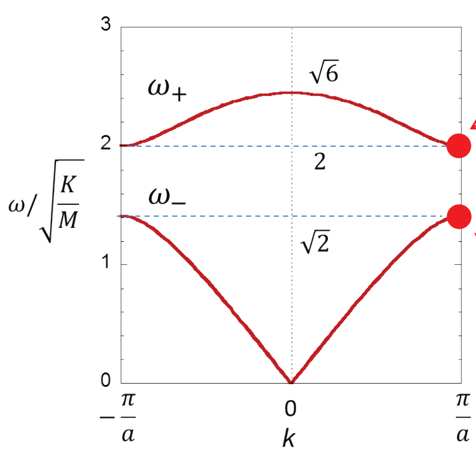


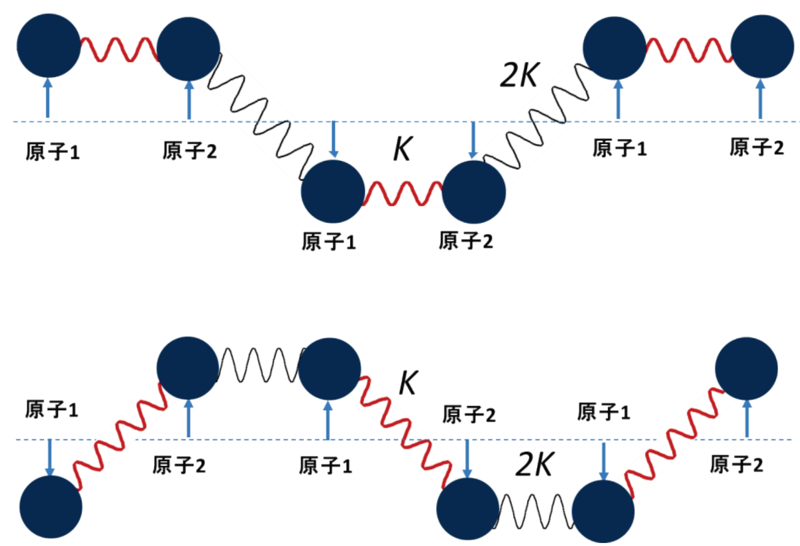
$$
\begin{cases}
u_j^{(1)} = Ae^{ij\pi}e^{-i\omega t} \\
u_j^{(2)} = -Ae^{ij\pi}e^{-i\omega t}
\end{cases}
$$

ダイヤモンド構造


単位構造の原子


[111]
K
2K
K


ω_+
$\sqrt{6}$
2
ω_-
$\sqrt{2}$
$\omega/\sqrt{\frac{K}{M}}$
3
2
1
0
$-\frac{\pi}{a}$
0
$\frac{\pi}{a}$
k


2K
原子1
原子2
K
原子1
原子2
原子1
原子2
K
原子1
原子2
原子1
原子2
原子1
2K
原子2

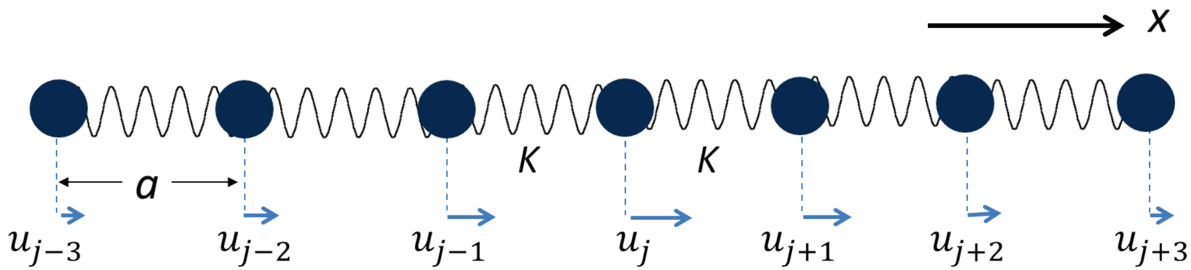
第7章 格子振動とフォノン

7.1　１種類の原子からなる1次元の格子振動
7.2　２種類の原子からなる1次元の格子振動
7.3　音響モード、光学モード
7.4　３次元の格子振動
7.5　フォノン：格子振動の量子化

３次元の格子振動

1次元

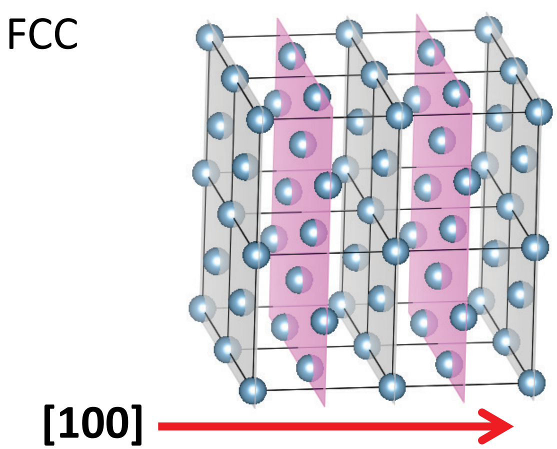
$$u_j = Ae^{ijka}e^{-i\omega t}$$

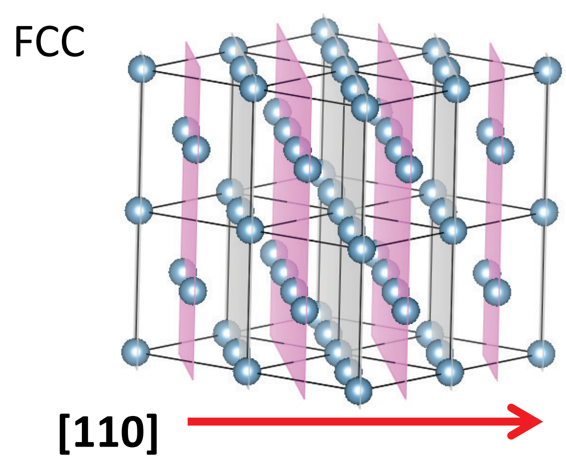


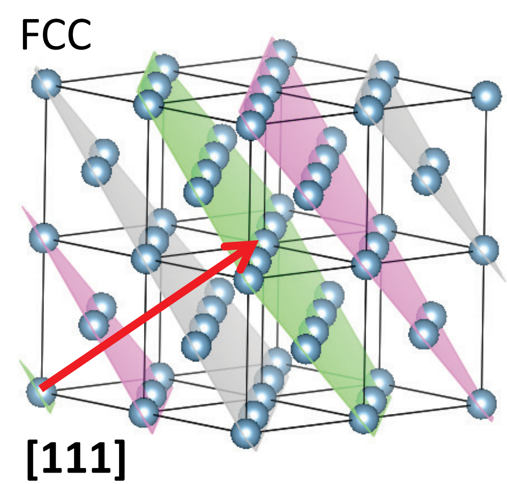
3次元

$$\boldsymbol{u}_j^l = \boldsymbol{A}_l\, e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_j} e^{-i\omega t}$$

j 番目の単位胞内の 番号 l の原子の変位







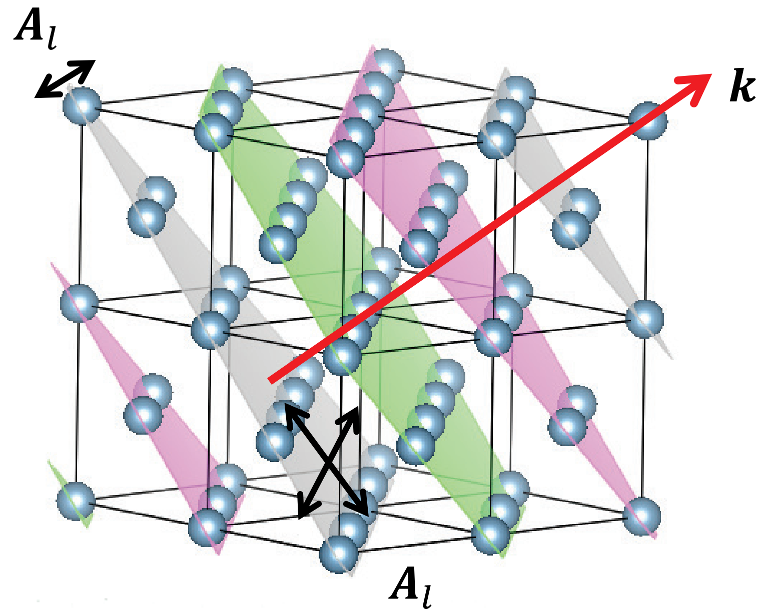
縦モード、横モード①

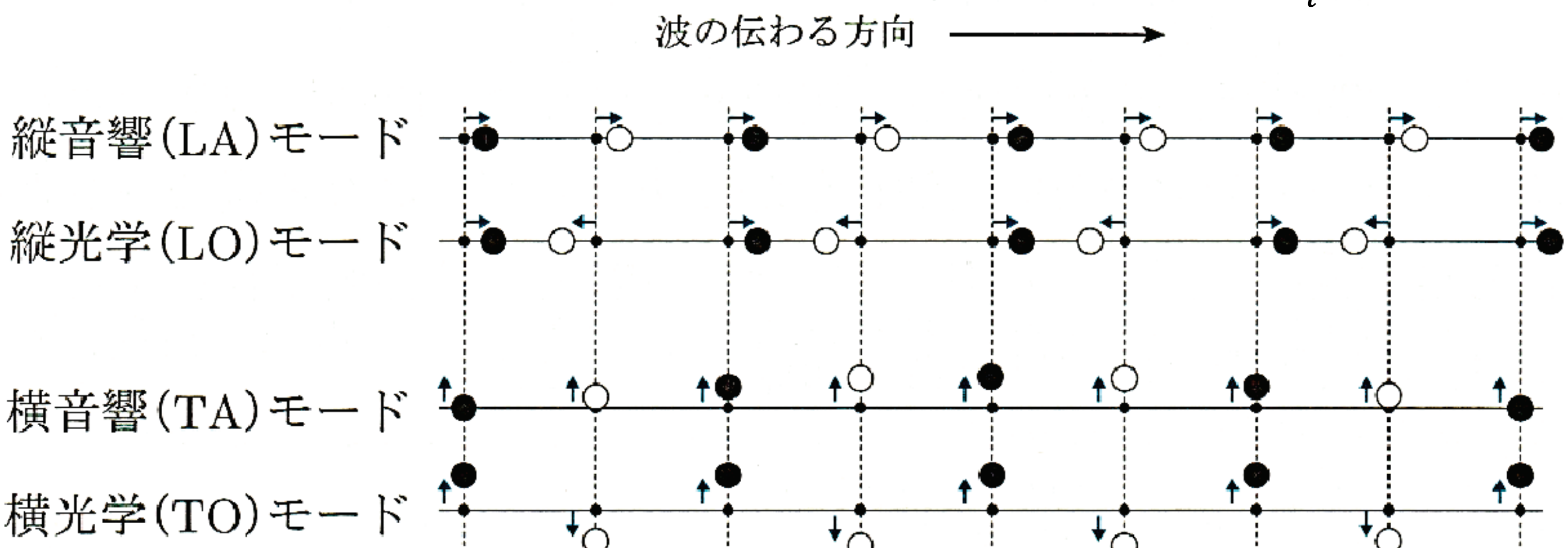
$$u_j^l = A_l \, e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_j} e^{-i\omega t}$$

縦モード　　$A_l \parallel \boldsymbol{k}$

横モード　　$A_l \perp \boldsymbol{k}$

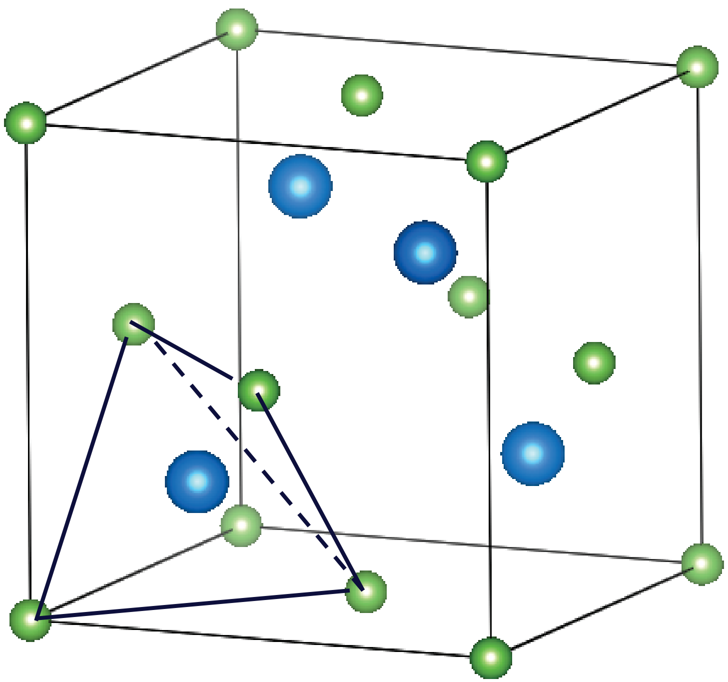
kに垂直な面内では、二つの独立した方向を選べるので、**横モードは二つある**

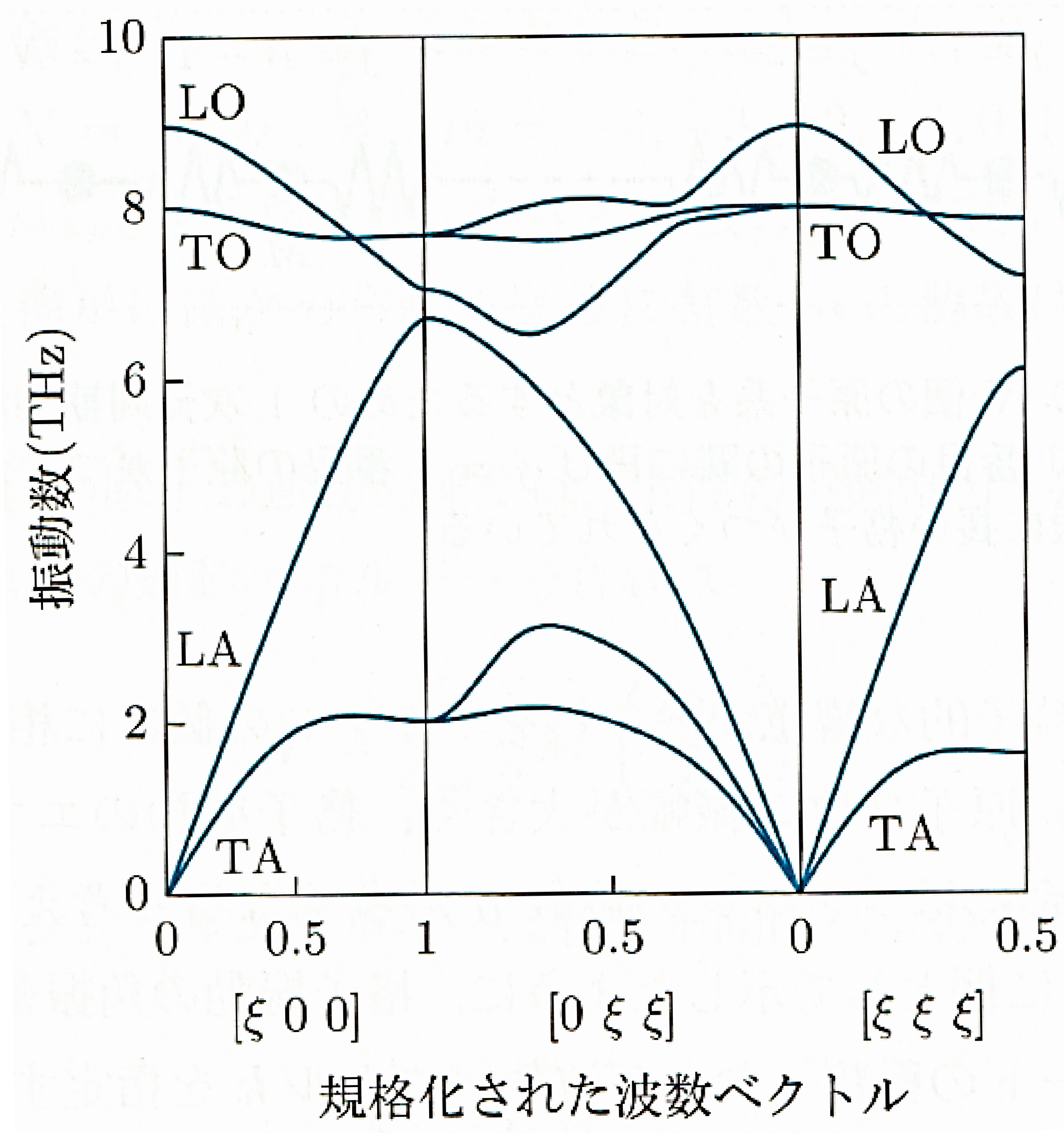




縦モード、横モード②

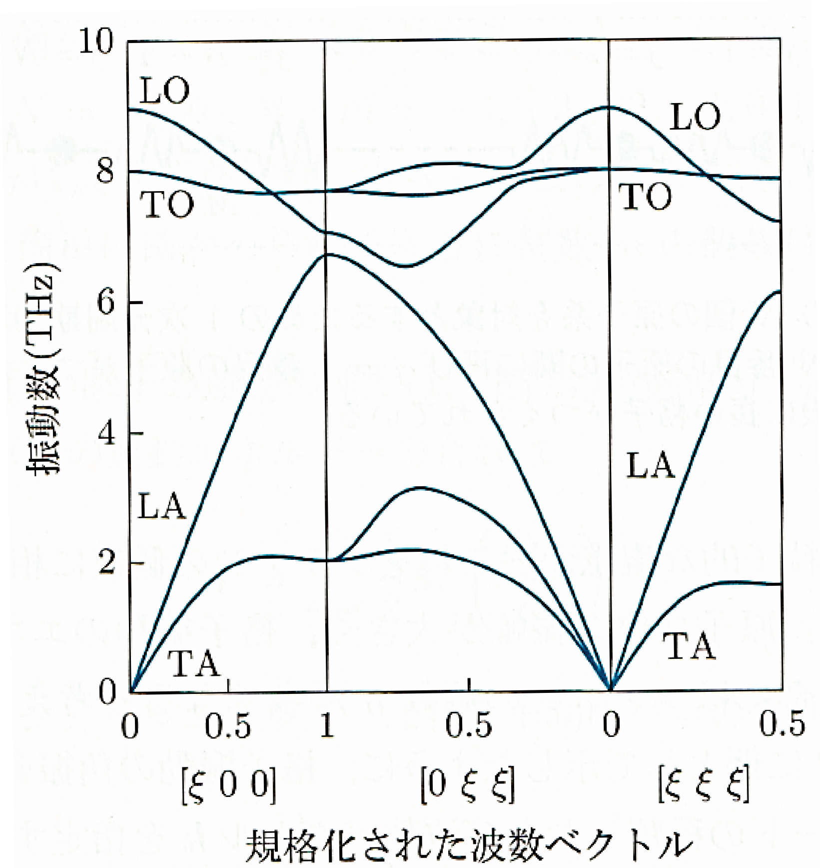
GaAs：閃亜鉛鉱構造

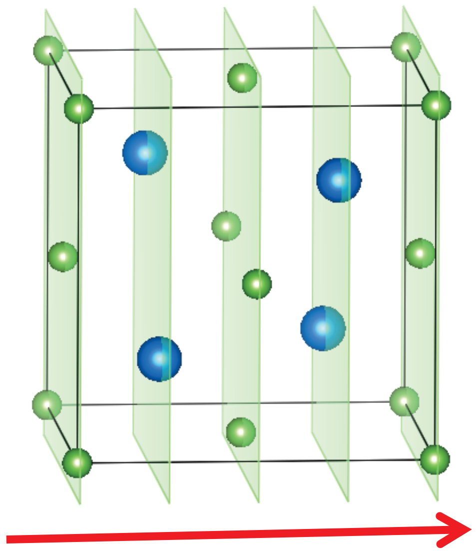


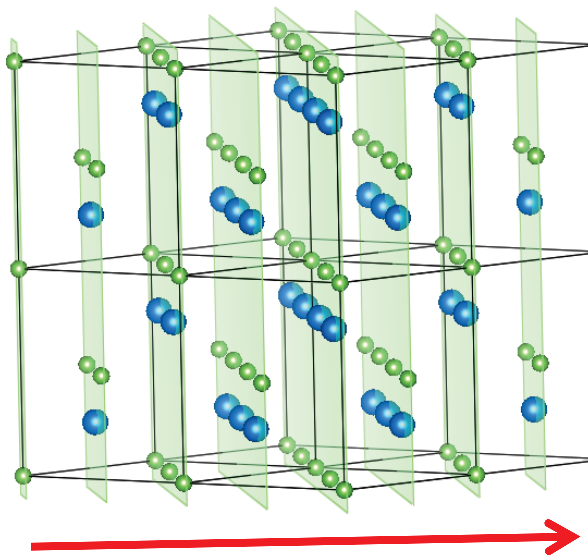


縦モード、横モード③

GaAs：閃亜鉛鉱構造





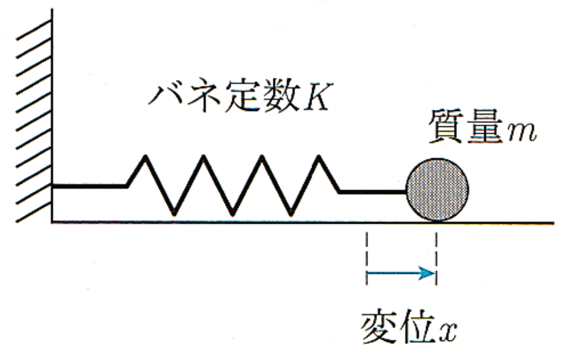


一般に縦モードの方が横モードよりも振動のエネルギーが高い

フォノン：格子振動の量子化①

バネに繋がった質点の運動(1次元調和振動子)

	位置エネルギー (バネに蓄えられるエネルギー)
古典力学	$E = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$
量子力学	$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$



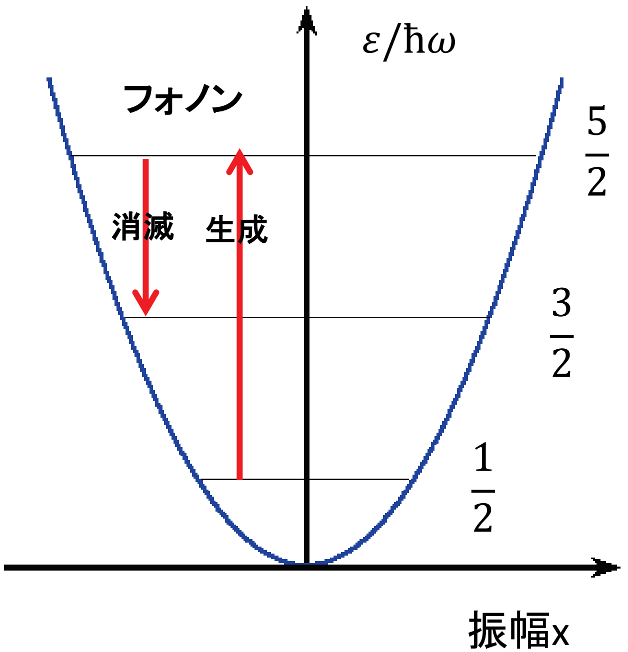
フォノン

- ✓ 振動数ωの電磁波のエネルギーはいつもħω を単位として変化

  エネルギーħω　を持つ塊　→ **フォトン**(光子)

- ✓ 格子振動のエネルギーも　ħωを単位として変化

振動エネルギーħωの塊　→ **フォノン**と呼び、粒子的なイメージで扱う



フォノン：格子振動の量子化②

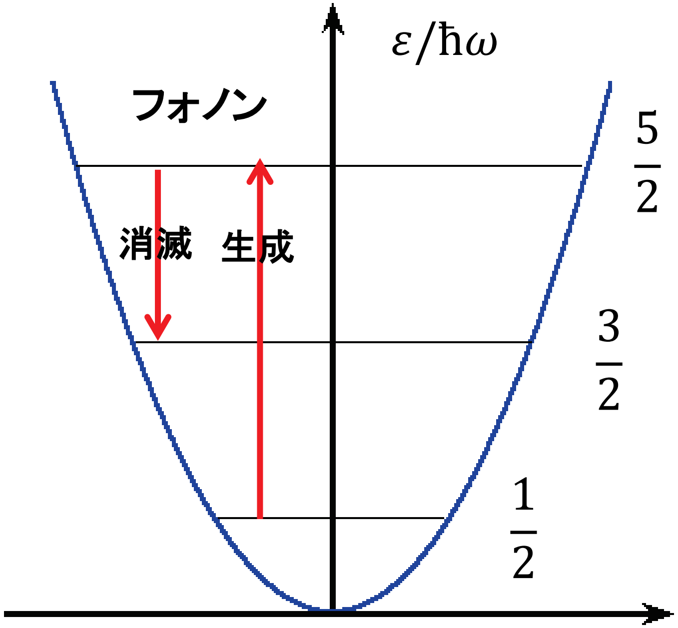
格子振動のエネルギー

振動数$\omega_{K,s}$、モード s の格子振動のエネルギー

$$E_{\boldsymbol{k},s} = \left(n_{\boldsymbol{k},s} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_{\boldsymbol{k},s}$$

$n_{\boldsymbol{k},s}$: 波数 k, モードs のフォノンの数

$\frac{1}{2}\hbar\omega_{\boldsymbol{k},s}$ ：零点振動エネルギー



✓ **格子振動のエネルギーは $\hbar\omega$を単位として量子化**されている

→ エネルギーの高い状態は、振幅の大きな振動に対応

✓ **零点振動が存在** （フォノンが1個も励起されなくても $\frac{1}{2}\hbar\omega_{\boldsymbol{k},s}$ の零点振動エネルギーがある）

→ 低温で重要になる （ヘリウムの超流動など）

第8章 固体の熱的性質

8.1 固体の比熱

8.1.1 格子比熱

8.1.2 アインシュタインモデル

8.1.3 デバイモデル

8.2 固体の熱伝導

8.2.1 熱伝導率

固体の比熱①

- **比熱** (J K^{-1} kg^{-1}) **：1 kgの物質の温度を１Kだけ上昇させるのに必要な熱量**

  水：　4.2 × 10^3 J K^{-1} kg^{-1}　　空気(20℃)：　1.0 × 10^3 J K^{-1} kg^{-1}

  銅：　3.8 × 10^2 J K^{-1} kg^{-1}

- **モル比熱** (J K^{-1} mol^{-1}) **：1 mol の物質の温度を１Kだけ上昇させるのに必要な熱量**

  ➡　同じ分子数で、物質間の比熱が比較できる

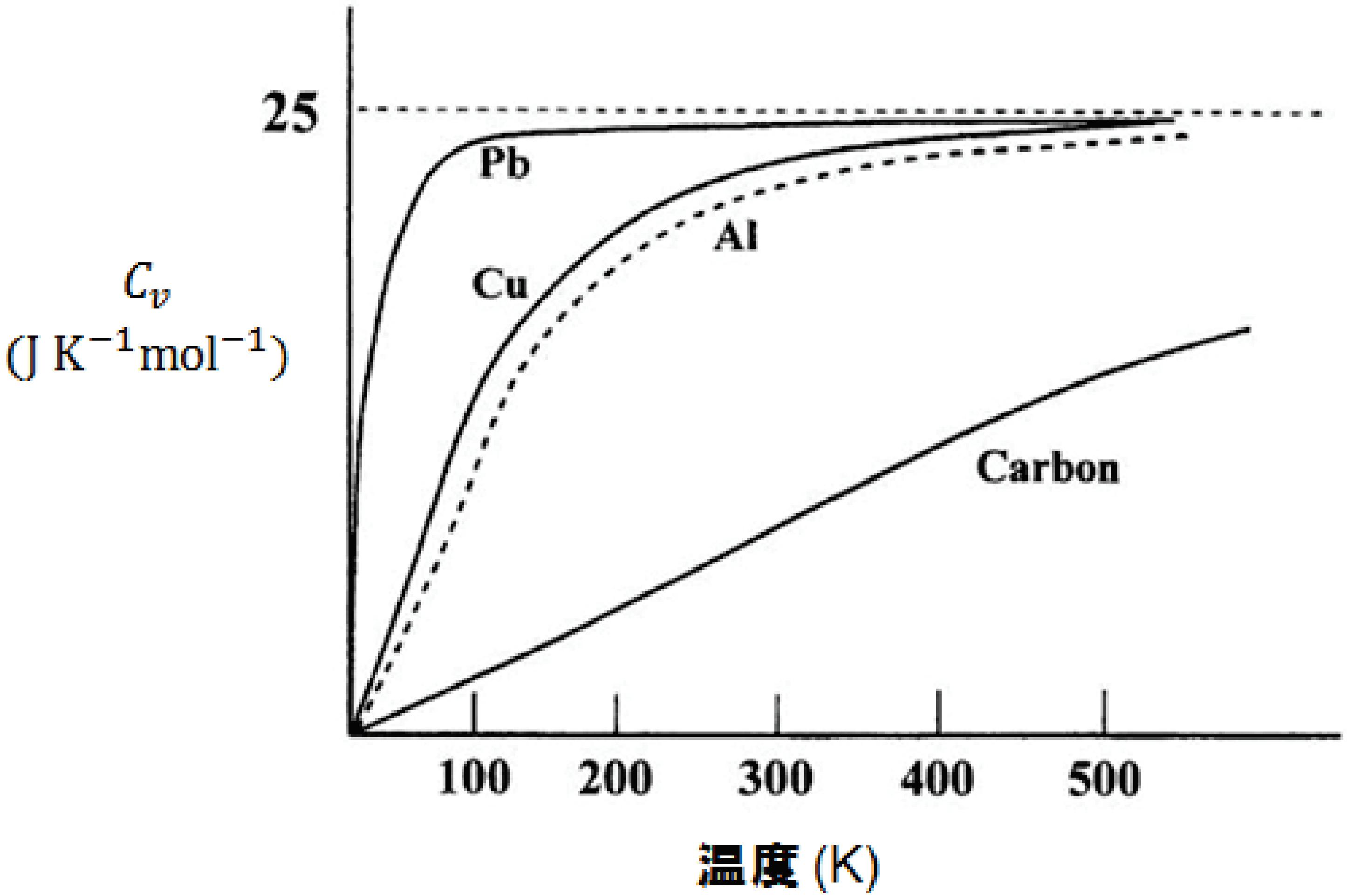
表8.1　25°C におけるモル比熱

固体	モル比熱 (J K^{-1} mol^{-1})
金 (Au)	25.4
銀 (Ag)	25.5
銅 (Cu)	24.5
鉄 (Fe)	25.0
アルミニウム (Al)	24.3
ゲルマニウム (Ge)	23.4
シリコン (Si)	20.0
ダイヤモンド (C)	6.1

多くの物質で、モル比熱は
24～25 J K^{-1} mol^{-1} 程度

同じダイヤモンド構造にも関わらず、なぜ、ダイヤモンドはモル比熱が極端に小さい？

固体の比熱②



なぜ温度を下げると比熱は減少？　なぜ物質によって温度依存性が大きく異なる？

格子比熱①

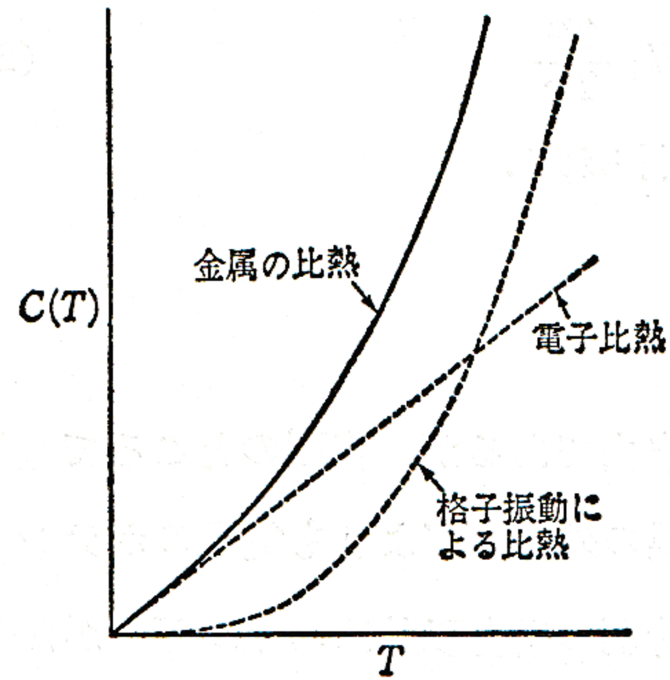
比熱への寄与：

格子比熱 ＋ **電子比熱**

格子振動
による寄与

金属の伝導電子
による寄与

格子比熱に比べて小さい。
温度依存性も少ない



比熱： $$C = \lim_{\Delta T \to 0} \frac{Q}{\Delta T} = \lim_{\Delta T \to 0} \frac{\Delta U}{\Delta T} = \frac{\partial U}{\partial T}$$

物質の温度が ΔT 上昇したときの内部エネルギーの増加分ΔU について、
ΔT → 0 の極限をとったもの

格子振動のエネルギーの温度依存性から、固体の比熱（格子比熱）を議論する

格子比熱②

N個の原子からなる格子振動のエネルギー

$$U = \sum_k \sum_s E_{k,s} = \sum_k \sum_s \left(n_{k,s} + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_{k,s}$$

s : フォノンのモードの種類
（縦波×1、横波×2）

フォノンの個数

温度 T で励起されるフォノンの個数 n の期待値

フォノンの個数がn である確率 P_n → ボツルマン因子に比例

$$P_n \propto \exp(-\varepsilon_{k,s}/k_B T) = \exp\left[-\left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar\omega_{k,s}}{k_B T} \right]$$

$$\langle n_{k,s} \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n P_n}{\sum_{n=0}^{\infty} P_n} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n \exp\left[-\left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar\omega_{k,s}}{k_B T} \right]}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left[-\left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar\omega_{k,s}}{k_B T} \right]} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{k,s}}{k_B T} \right) - 1}$$

プランク分布

無限級数の公式

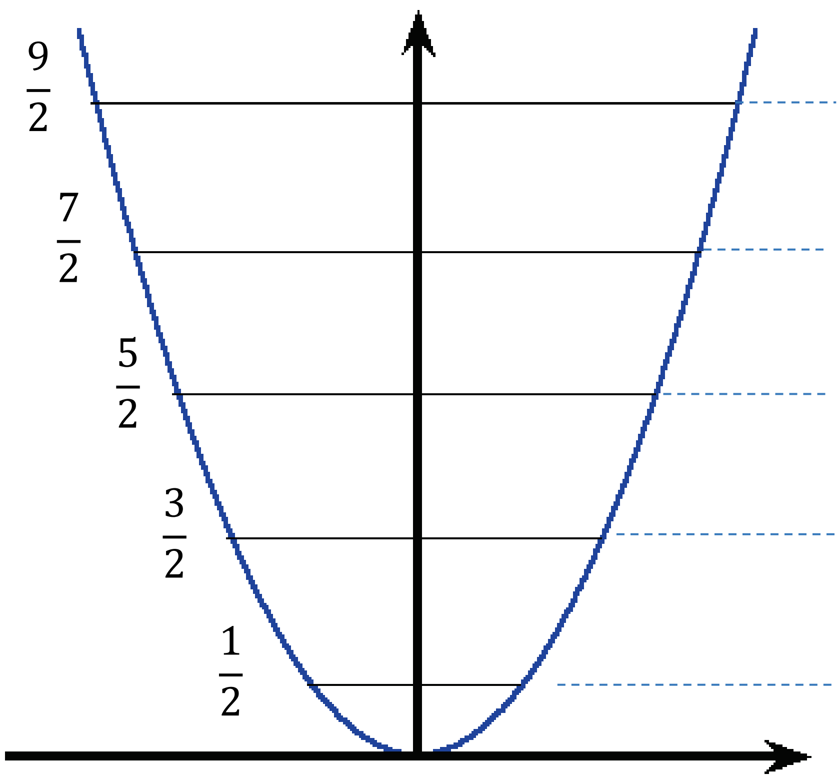
$$\sum_{n=0}^{\infty} n e^{-nx} = \frac{e^{-x}}{(1 - e^{-x})^2}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx} = \frac{1}{1 - e^{-x}}$$

格子比熱③

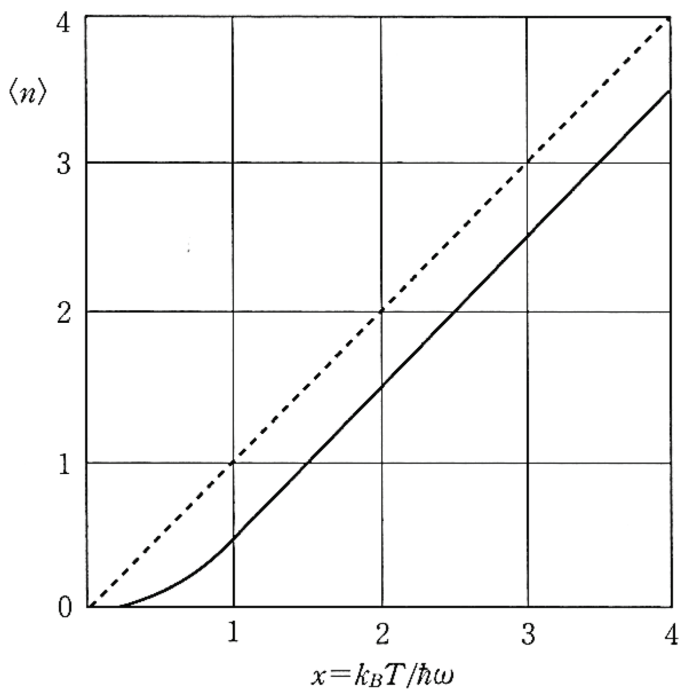
量子化されたフォノン・エネルギー

$$E_{\boldsymbol{k},s} = \left(n_{\boldsymbol{k},s} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_{\boldsymbol{k},s}$$



励起されるフォノンの個数 n の期待値

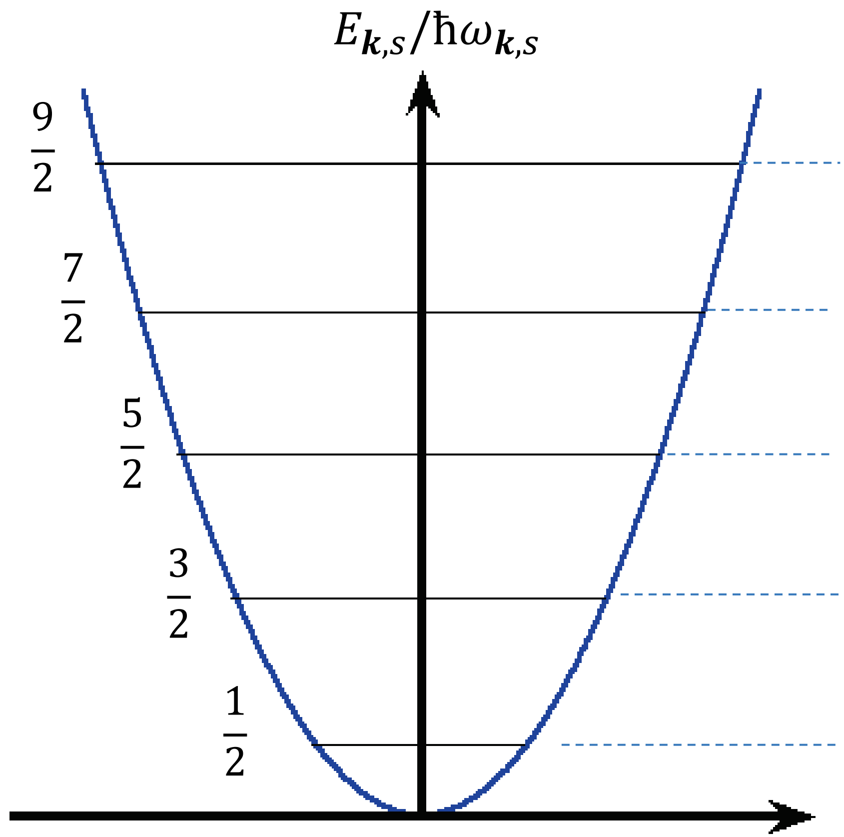
$$\langle n_{k,s}\rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{k,s}}{k_B T}\right) - 1}$$



格子比熱④

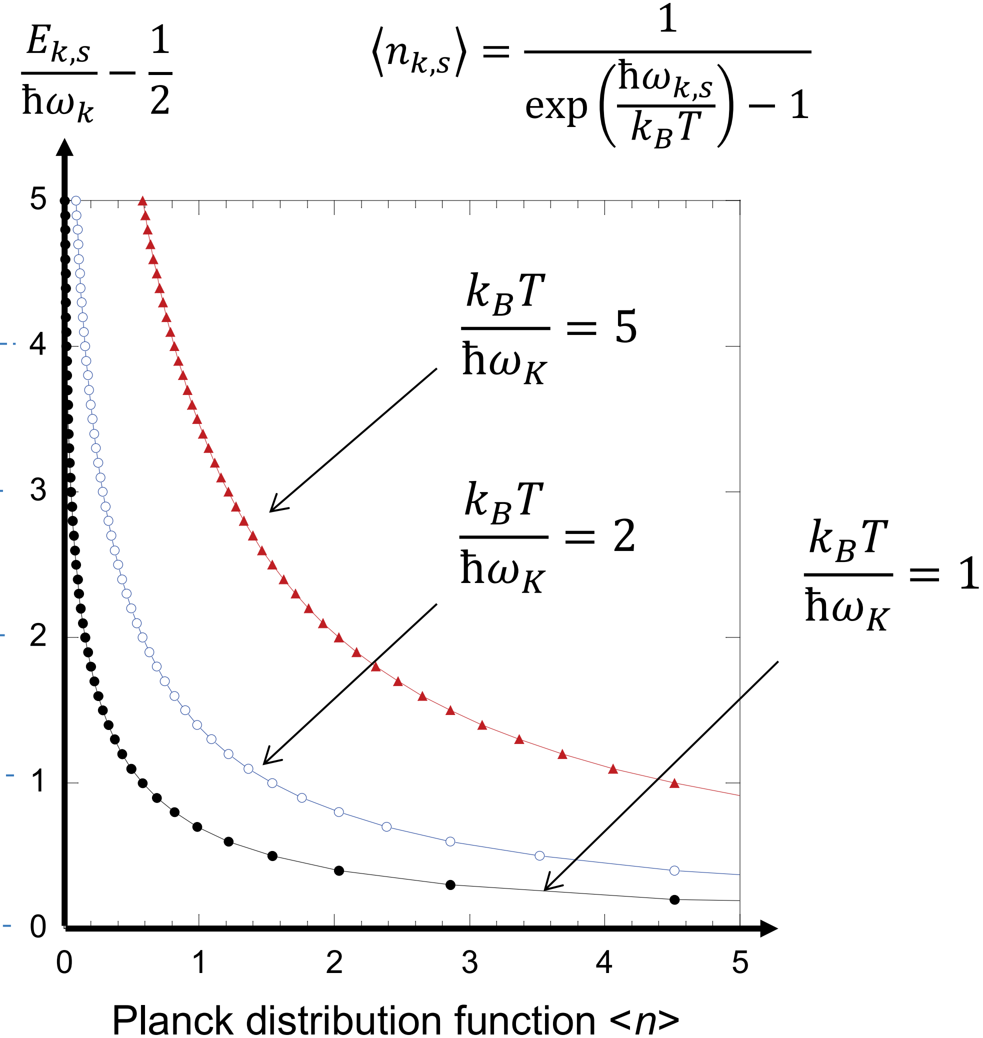
量子化されたフォノン・エネルギー

$$E_{\boldsymbol{k},s} = \left(n_{\boldsymbol{k},s} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_{\boldsymbol{k},s}$$



温度一定におけるフォノンの個数 *n*の期待値

$$\langle n_{k,s}\rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{k,s}}{k_B T}\right) - 1}$$



格子比熱⑤

N個の原子からなる格子振動のエネルギー

$$U=\sum_{k}\sum_{s}E_{k,s}=\sum_{k}\sum_{s}\left(n_{k,s}+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_{k,s}$$

$$U=\sum_{k}\sum_{s}\left\{\frac{1}{\exp\left(\hbar\omega_{k,s}/k_BT\right)-1}+\frac{1}{2}\right\}\hbar\omega_{k,s}$$

格子比熱

$$C=\frac{\partial U}{\partial T}=\frac{\partial}{\partial T}\left[\sum_{k}\sum_{s}\left\{\frac{1}{\exp\left(\hbar\omega_{k,s}/k_BT\right)-1}+\frac{1}{2}\right\}\hbar\omega_{k,s}\right]$$

$$=\frac{\partial}{\partial T}\sum_{k}\sum_{s}\frac{\hbar\omega_{k,s}}{\exp\left(\hbar\omega_{k,s}/k_BT\right)-1}$$