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

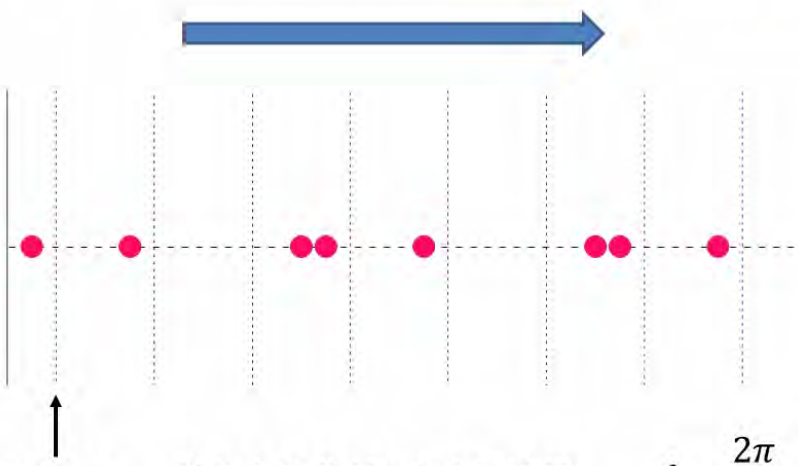
7.4　３次元の格子振動

7.5　フォノン：格子振動の量子化

結晶中の原子の振動①

- ✓ 固体中の原子は平衡点の周りで振動（振動数～10^{12}Hz）
- ✓ 原子の振動は波となって結晶中を伝播 ➡ 熱伝導、熱膨張等と密接に関連

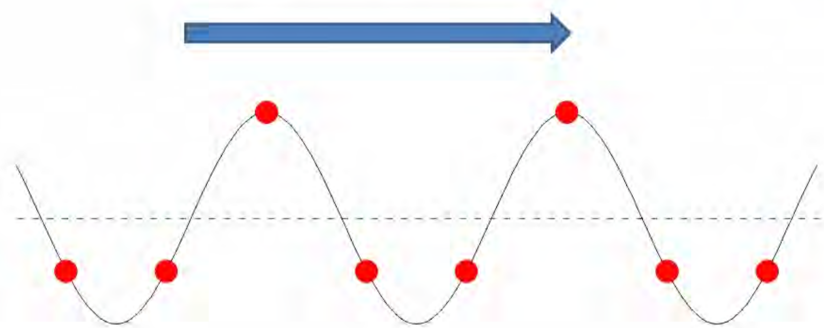
$k = \frac{2\pi}{3a}$ の場合：進行波 **縦波**



平衡点　疎密な部分がK方向に進行

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = 3a$$

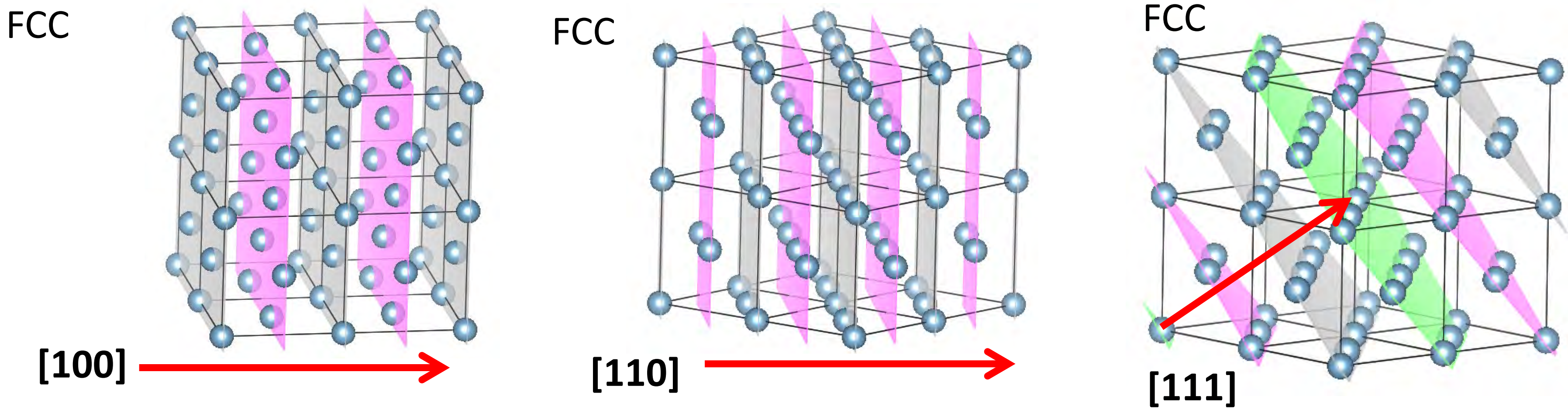
$k = \frac{2\pi}{3a}$ の場合：進行波 **横波**



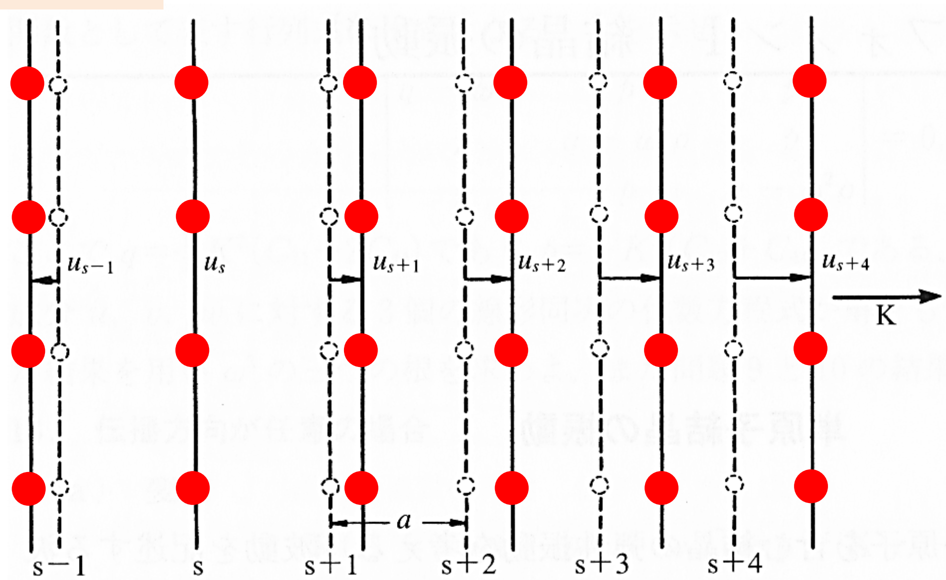
$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = 3a$$

原子振動の波は、どのような波長とエネルギーをもっているのか？

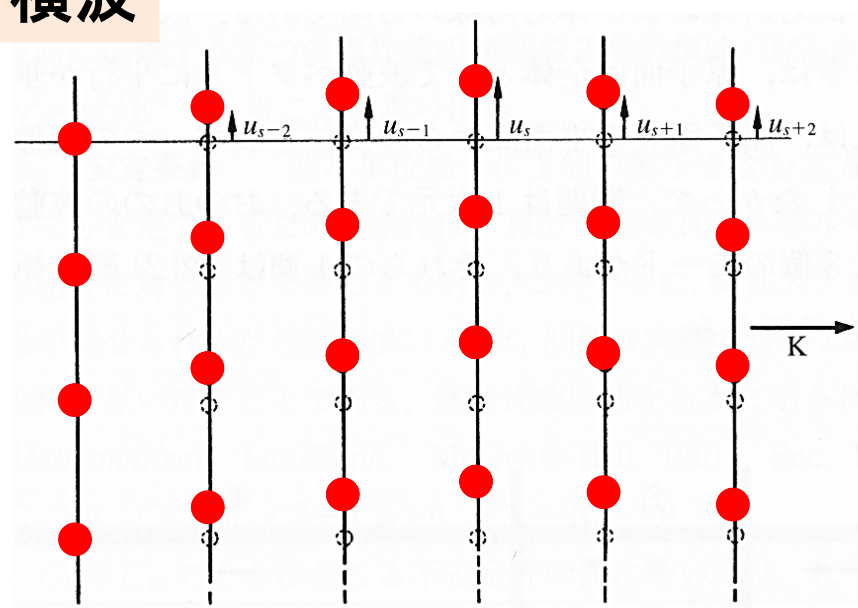
結晶中の原子の振動②



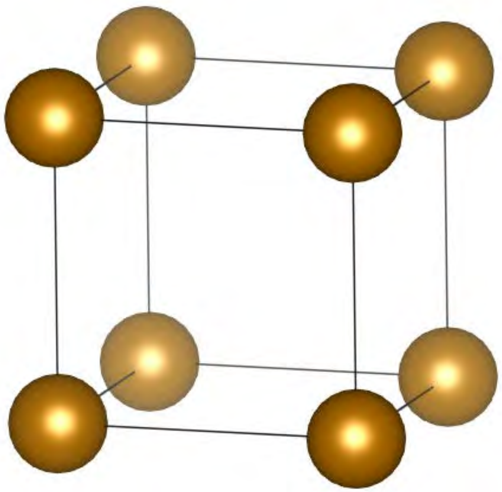
縦波



横波



調和近似

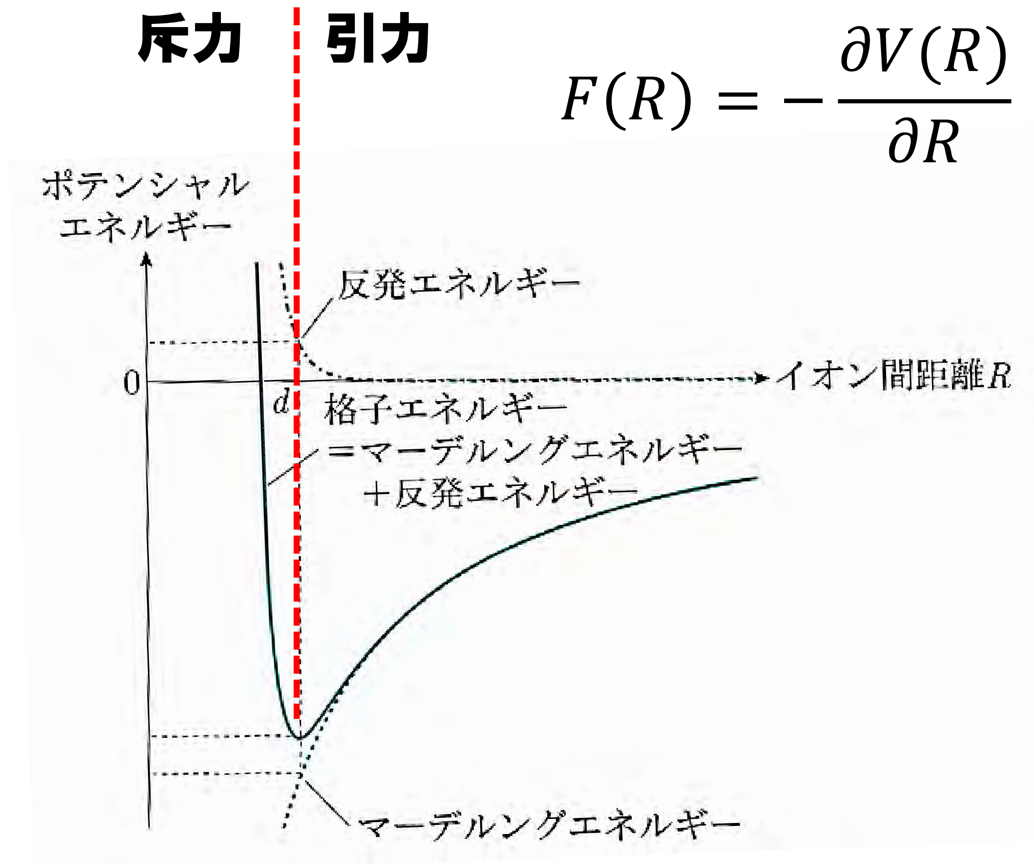


２つの原子間に働く力

平衡位置からの変位の差に比例すると仮定

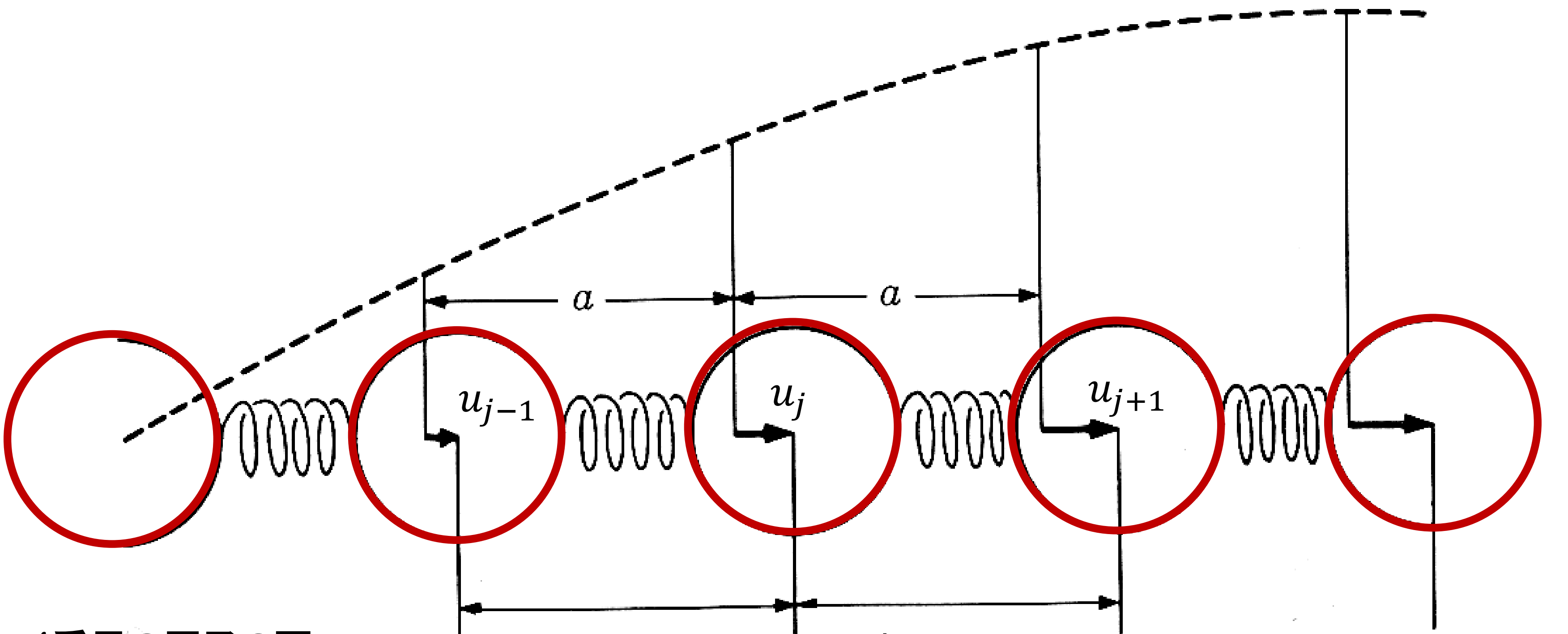
➡ **調和近似**

$$F(R) = -\frac{\partial V(R)}{\partial R}$$



分散関係の導出①

自然長 a 、バネ定数 Kのバネに、質量 M の原子がつながれた1次元鎖



j 番目の原子の両隣りのバネの長さ

$a + u_j - u_{j-1}$　　$a + u_{j+1} - u_j$

x

個々のバネにより、j 番目の原子に働く力

$-K\,(u_j - u_{j-1})$　　$K(u_{j+1} - u_j)$

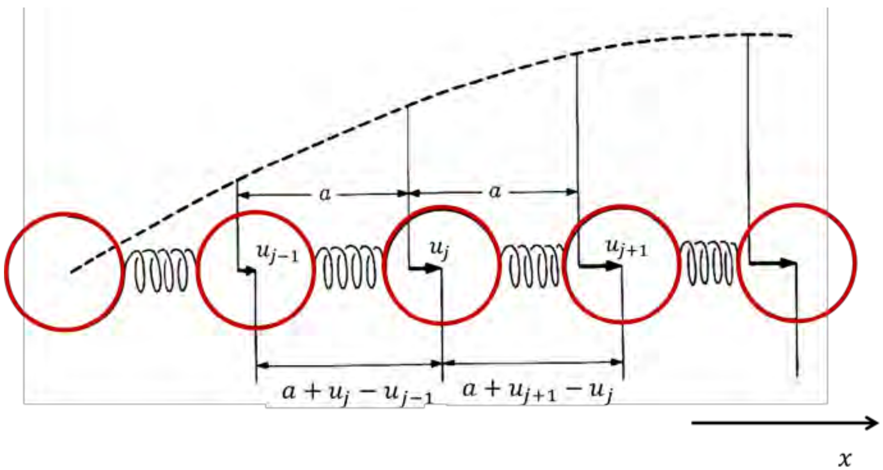
分散関係の導出②

● j 番目の原子に働く力

$$F_j = K\left(u_{j+1} - u_j\right) - K\left(u_j - u_{j-1}\right)$$

● j 番目の原子の運動方程式

$$M\frac{d^2u_j}{dt^2} = F_j = -K\left(2u_j - u_{j-1} - u_{j+1}\right)$$



全ての変位が1つの角振動数 ω、振幅 Aで振動する波を仮定

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

基準モード

u_j**を運動方程式に代入**

$$-M\omega^2u_j = -Ku_j\left(2 - e^{-ika} - e^{ika}\right)$$

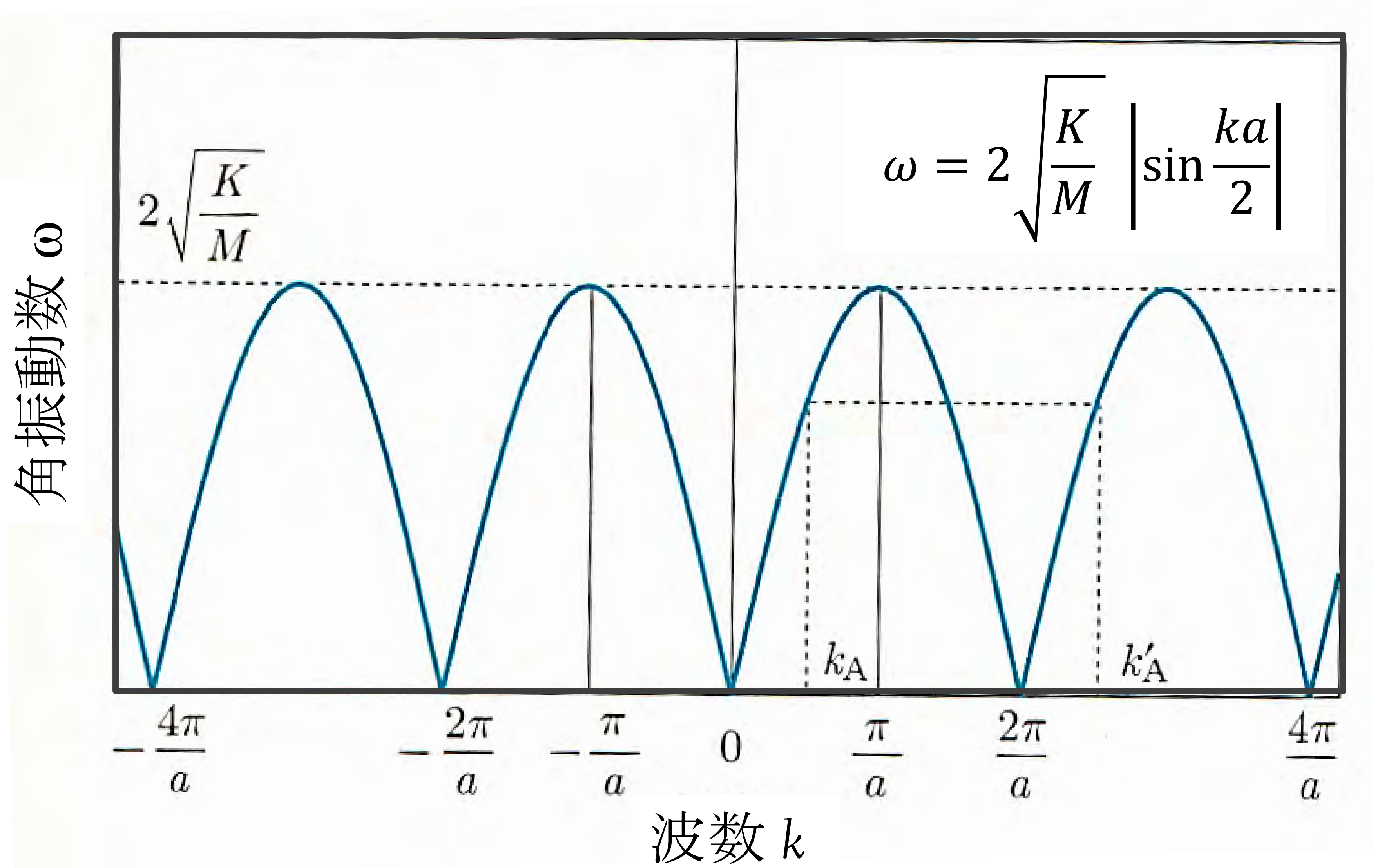
$$M\omega^2 = 2K\left(1 - \cos ka\right) = 4K\sin^2\frac{ka}{2}$$

$$\omega = 2\sqrt{\frac{K}{M}}\left|\sin\frac{ka}{2}\right|$$

角振動数ωと波数 k の関係

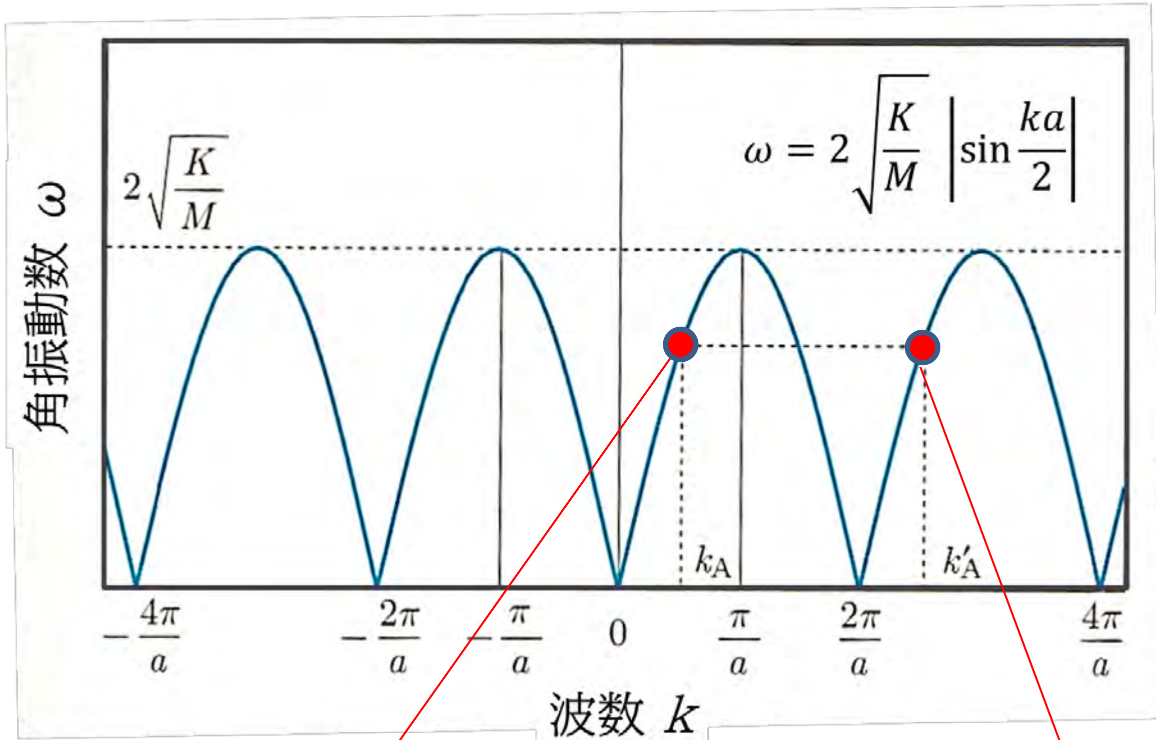
分散関係

分散関係の導出③



$\omega = 2\sqrt{\frac{K}{M}}\left|\sin\frac{ka}{2}\right|$
$2\sqrt{\frac{K}{M}}$
角振動数 ω
k_A
k'_A
$-\frac{4\pi}{a}$
$-\frac{2\pi}{a}$
$-\frac{\pi}{a}$
0
$\frac{\pi}{a}$
$\frac{2\pi}{a}$
$\frac{4\pi}{a}$
波数 k

第１ブリユアン・ゾーン①



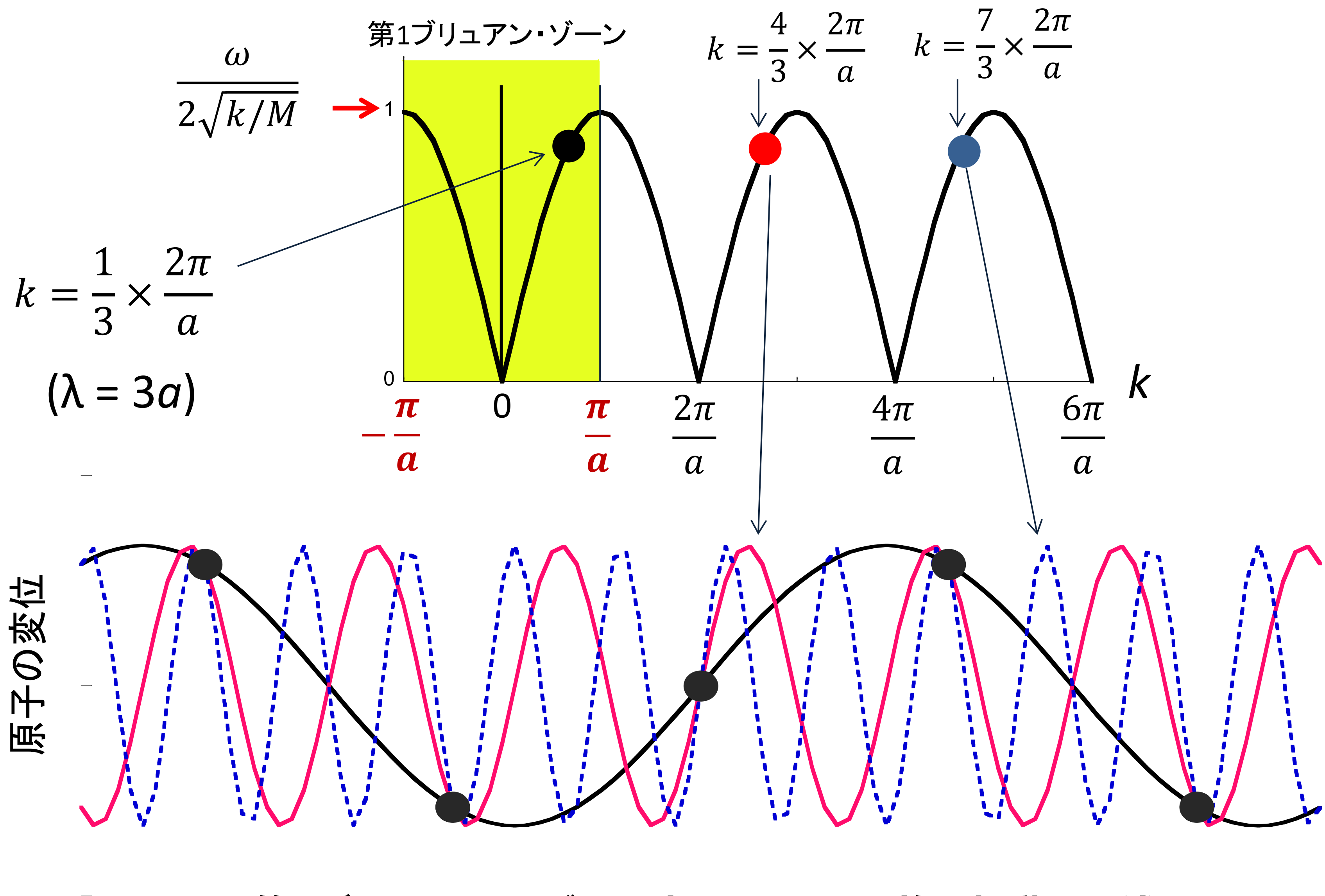
$k+\frac{2\pi}{a}$ の波数に変位

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

$$Ae^{ij\left(k+\frac{2\pi}{a}\right)a}e^{-i\omega t} = Ae^{2\pi ij}e^{ijka}e^{-i\omega t}$$

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

第１ブリユアン・ゾーン②



第1ブリュアン・ゾーン内の k のみで格子振動を記述できる

長波長極限における原子の振動

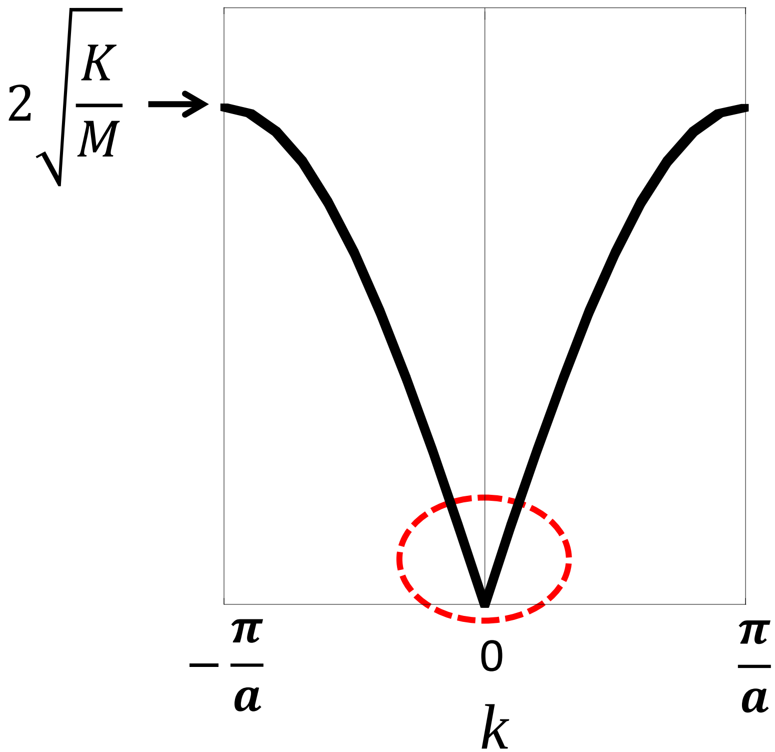
波長が原子間距離に比べて十分長い

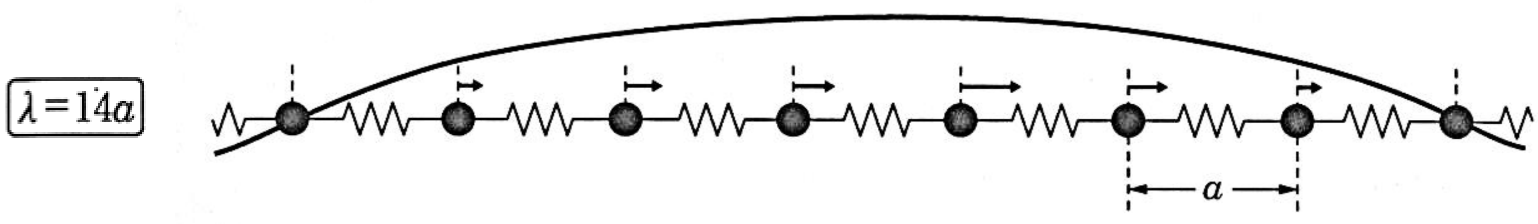
$ka << 1 \ (\lambda >> a)$

$\sin\frac{ka}{2} \cong \frac{ka}{2}$ と近似できるので

$$\omega = 2\sqrt{\frac{K}{M}}\left|\sin\frac{ka}{2}\right| \cong \underline{ka\sqrt{\frac{K}{M}} \propto k}$$

長波長極限では、連続媒質中の波
（音波など）の結果 ω = vk と一致





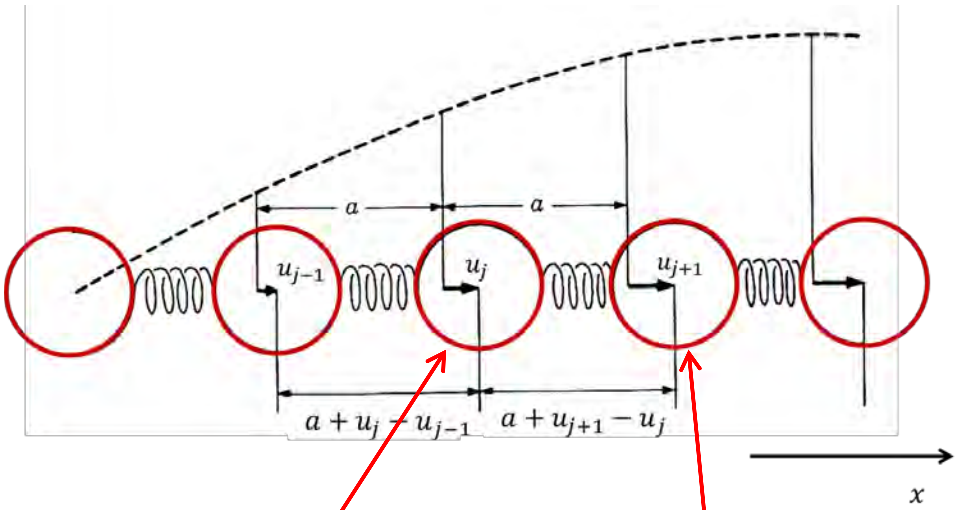
原子間の変位差が小さく、復元力が小さい → 振動数が小さい（長周期振動）

ゾーン境界における原子の振動①

ゾーン境界: $k = \pm\pi/a$

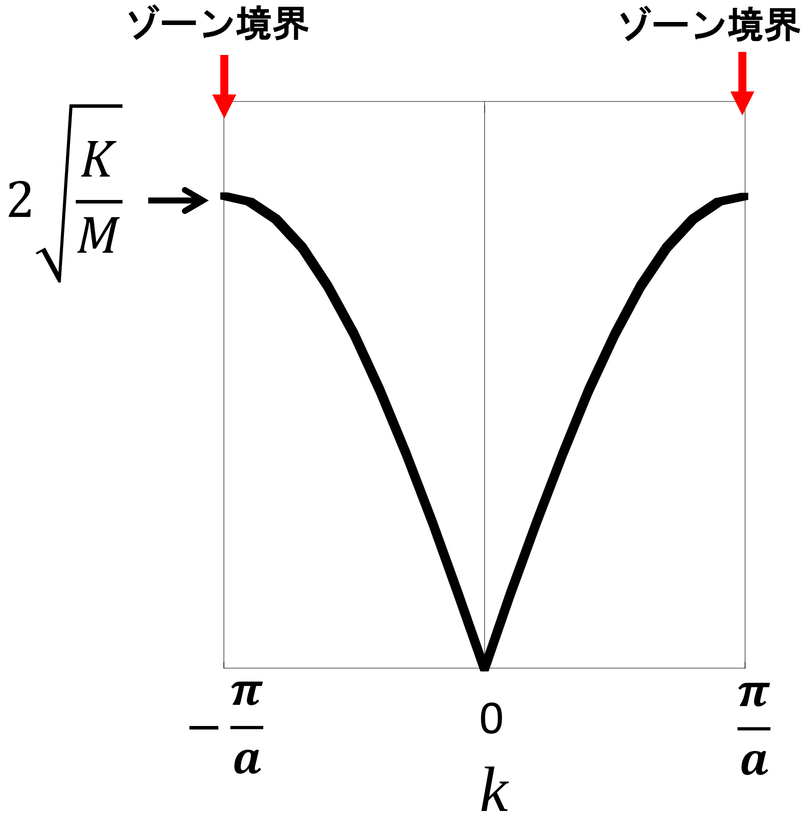
$$\omega = 2\sqrt{\frac{K}{M}}\left|\sin\frac{ka}{2}\right| = 2\sqrt{\frac{K}{M}}$$

●この時、どのような原子の振動？



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

$$u_{j+1} = Ae^{ik(j+1)a}e^{-i\omega t}$$

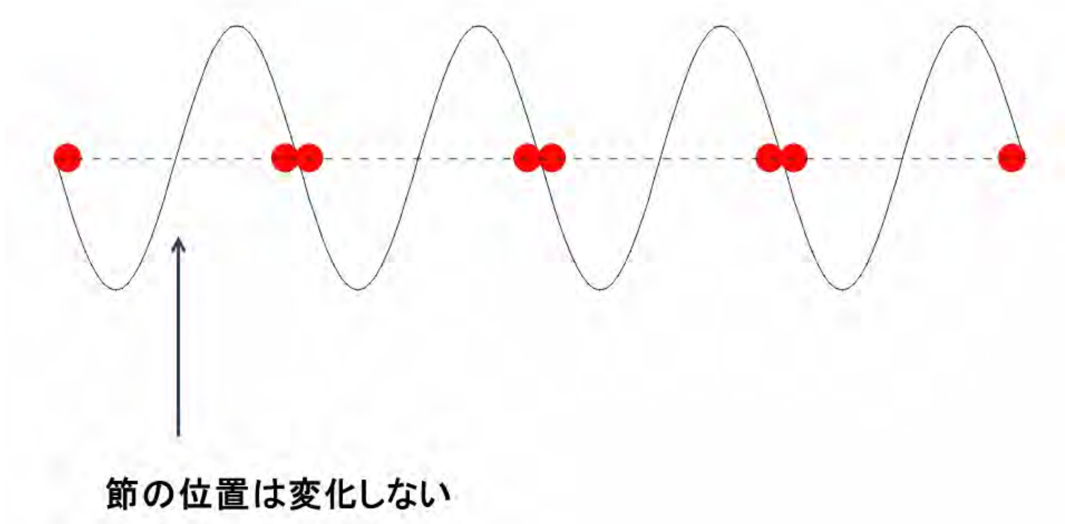


隣合う原子の変位の比：

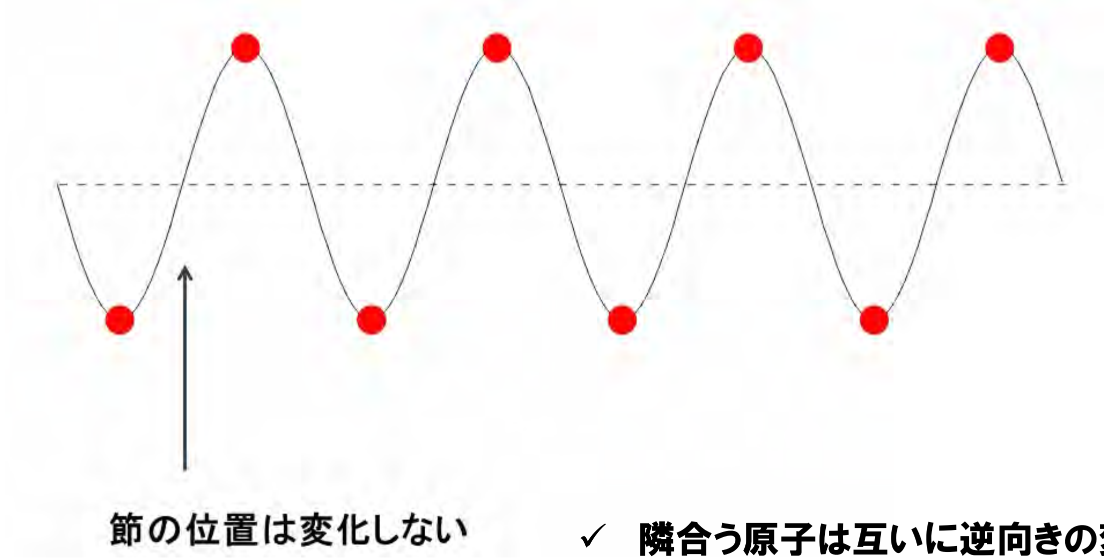
$$\frac{u_{j+1}}{u_j} = e^{ika} = e^{i\pi} = -1$$

ゾーン境界における原子の振動②

縦波



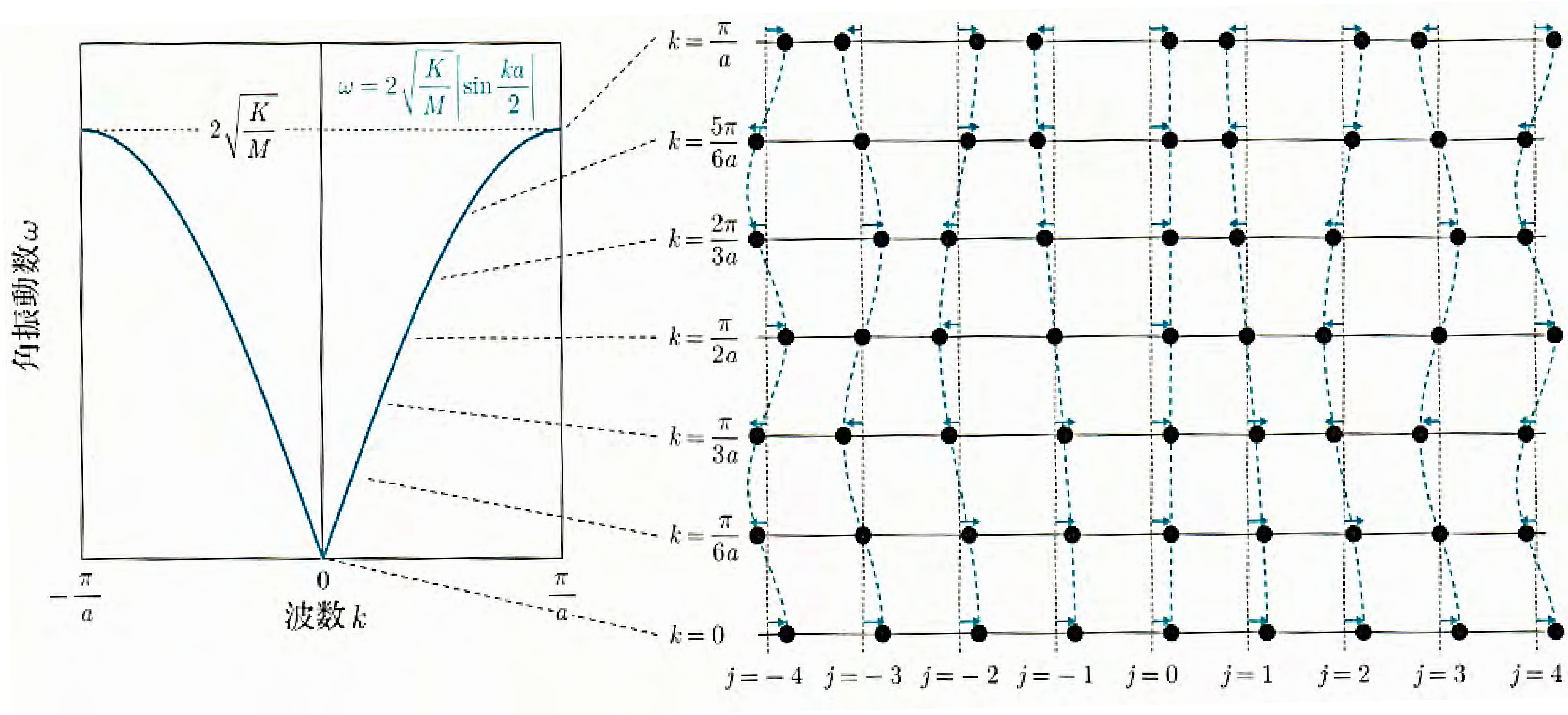
横波



- ✓ **隣合う原子は互いに逆向きの変位を持ち$e^{-i\omega t}$ で振動**
- ✓ **定在波となる(節の位置は不変)**

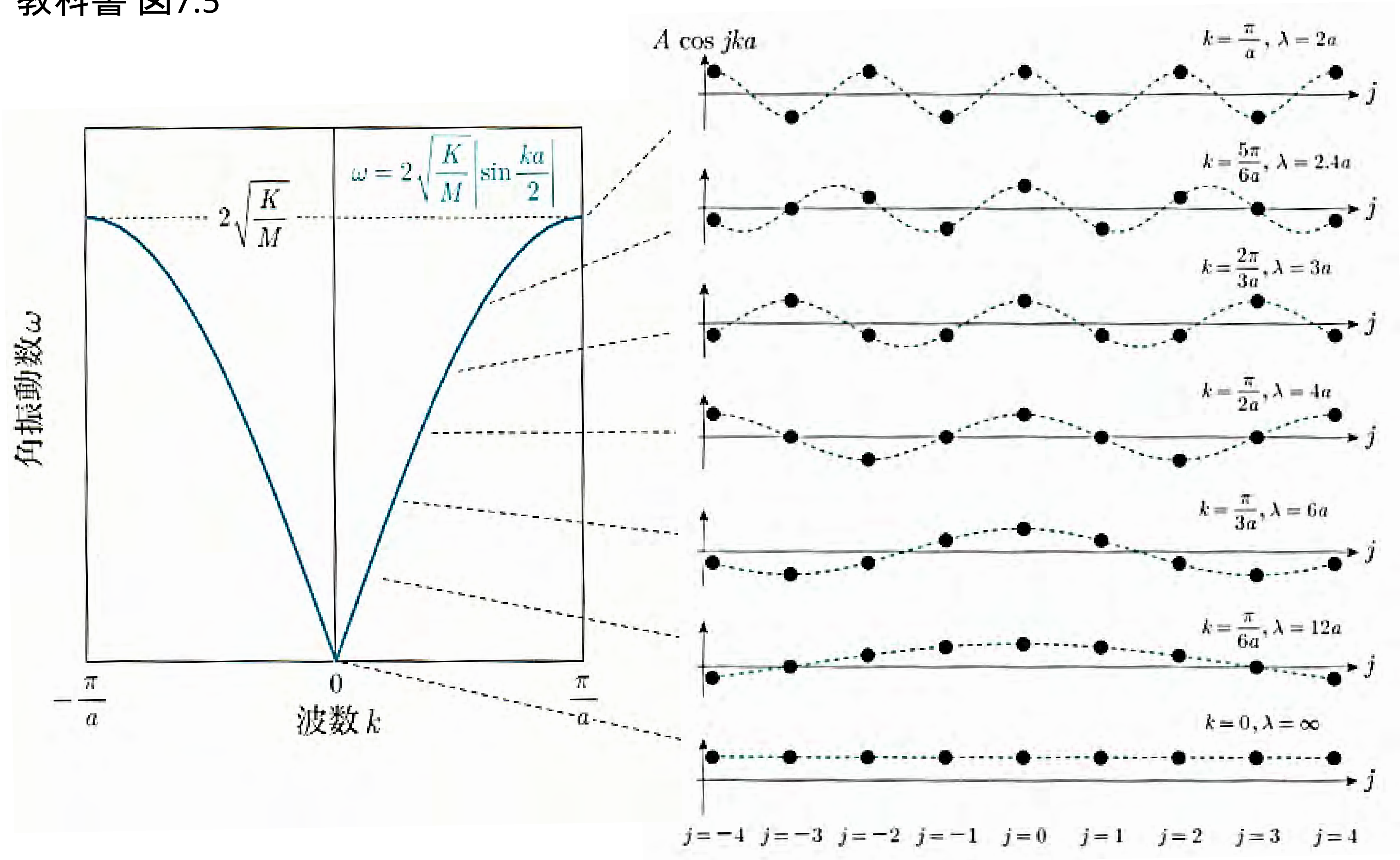
様々な波数に対する格子振動の様子①

教科書 図7.4



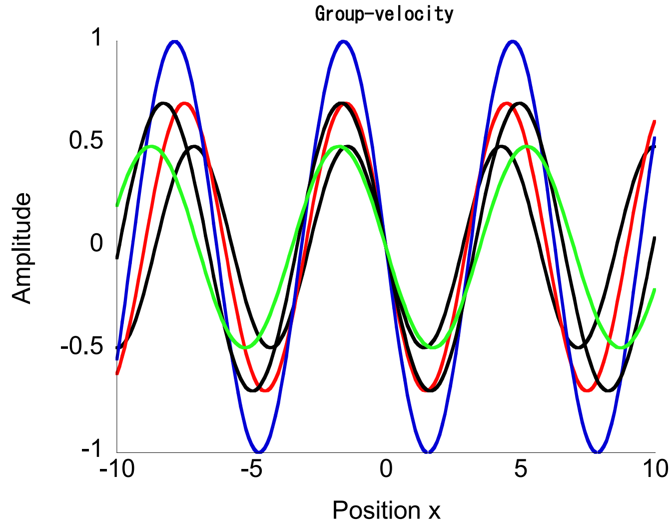
様々な波数に対する格子振動の様子②

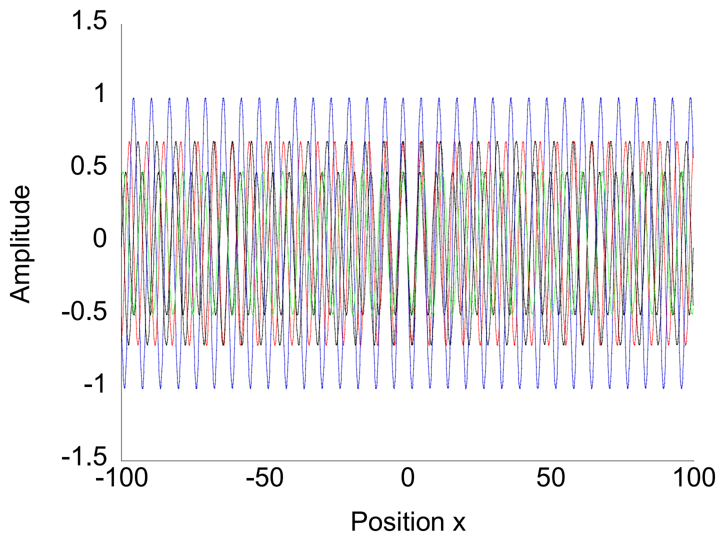
教科書 図7.5



波束①

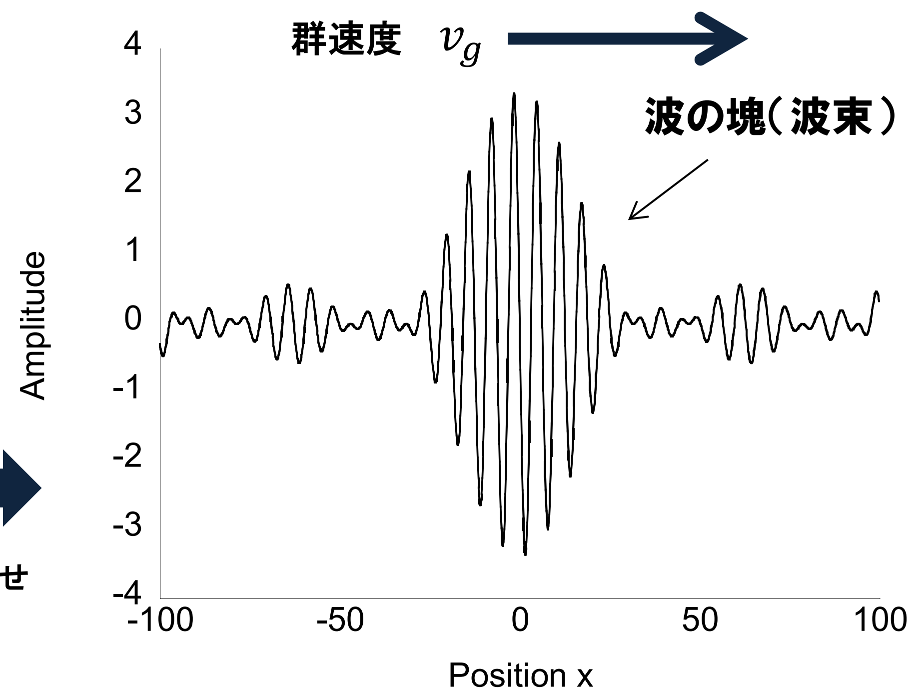
波束：　様々な波数 k の波の重ね合わせ。空間的に局在





重ね合わせ

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$　（包絡線の速度）



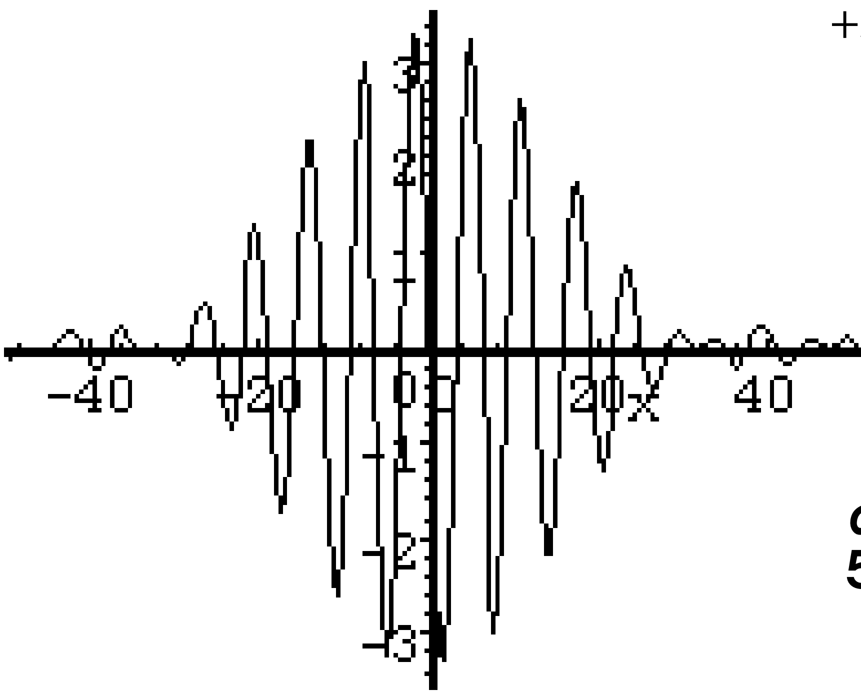
波束②

（例）位相速度（=ω/k）が同じ、振幅が異なる5つの波の重ね合わせ

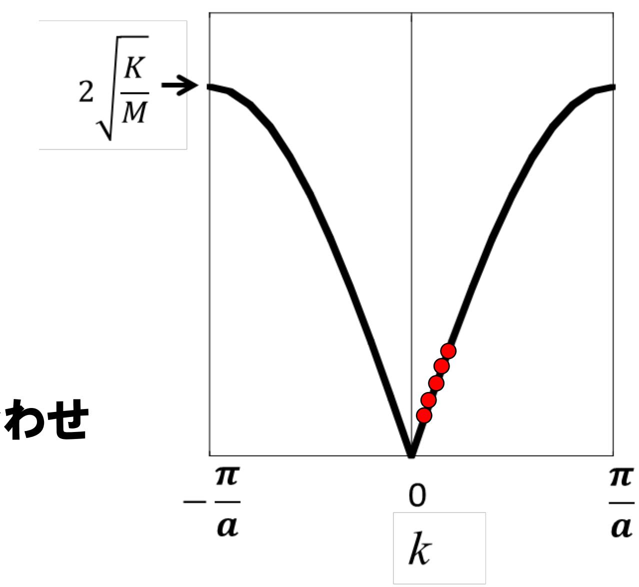
A=0.7, $\omega_0=k_0=1$, $\Delta\omega=\Delta k=0.05$

位相速度 = 群速度

$$f(x,t) = A^2\sin[(\omega_0+2\Delta\omega)t-(k_0+2\Delta k)x] + A\sin[(\omega_0+\Delta\omega)t-(k_0+\Delta k)x] + \sin[\omega_0 t-k_0x] + A\sin[(\omega_0-\Delta\omega)t-(k_0-\Delta k)x] + A^2\sin[(\omega_0-2\Delta\omega)t-(k_0-2\Delta k)x]$$



ω/k が等しい
5つの波の重ね合わせ



John Mallinckrodt 氏製作:
Phase and Group Velocities of wave packets

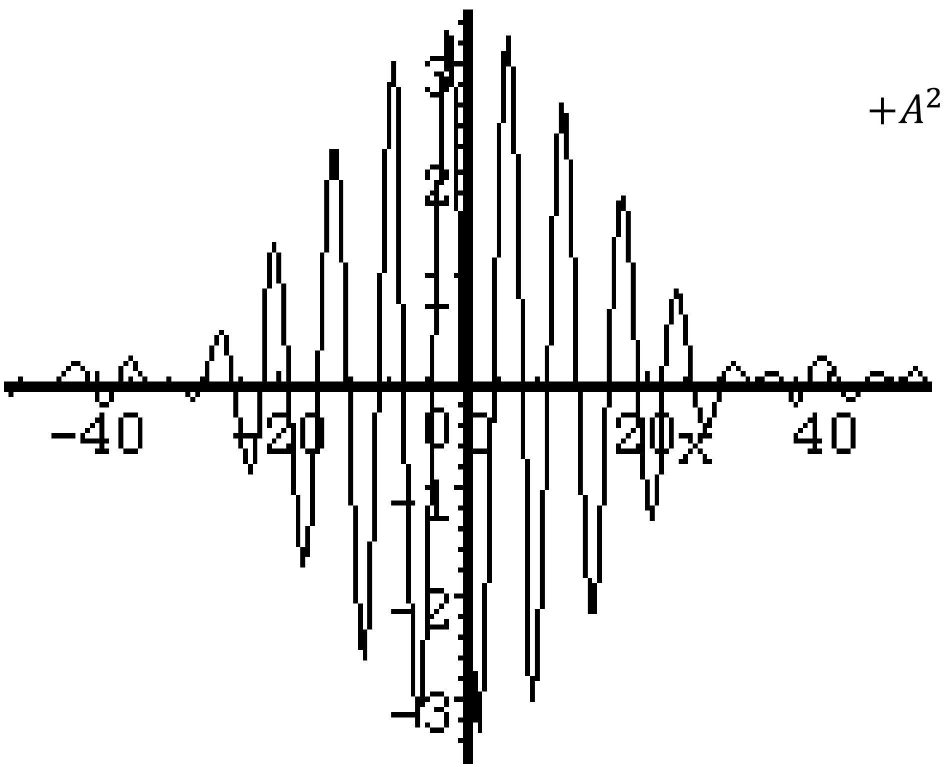
波束③

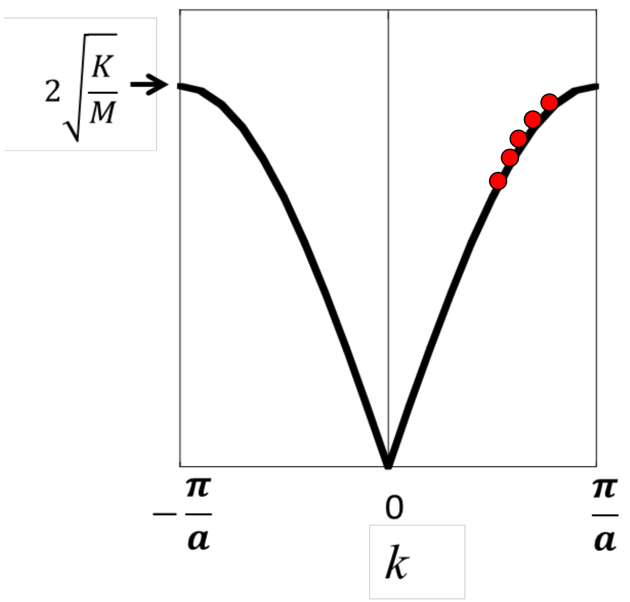
（例）位相速度、振幅が異なる、5つの波の重ね合わせ

A=0.7, ω_0=k_0=1, $\Delta\omega$=0.025, Δk=0.05

位相速度 ≠ 群速度

$$
\begin{aligned}
f(x,t) = \; & A^2 \sin[(\omega_0 + 2\Delta\omega)t - (k_0 + 2\Delta k)x] \\
& + A \sin[(\omega_0 + \Delta\omega)t - (k_0 + \Delta k)x] \\
& + \sin[\omega_0 t - k_0 x] \\
& + A \sin[(\omega_0 - \Delta\omega)t - (k_0 - \Delta k)x] \\
& + A^2 \sin[(\omega_0 - 2\Delta\omega)t - (k_0 - 2\Delta k)x]
\end{aligned}
$$





課題

Webclassで提出して下さい
締切：6/21 (月) 17:00

もし、原子間力が遠くまで及ぶと格子振動の様子はどう変わるか？

質量 M の原子が等間隔 a で1次元的に無限に並んだ構造を考える。最近接原子間、第2近接原子間には、原子の平衡位置からの変位の差に比例した力が働いていると仮定し、その力の比例定数をそれぞれ、K, $K/3$ とおく。

原子の振動の基準モードについて、以下の問いに答えなさい。

① 分散関係を求め、第1ブリュアン・ゾーンの範囲について図示して下さい。

② 第2近接原子間にも力が働くと、格子振動の様子がどのように変わるか説明して下さい。