

課題

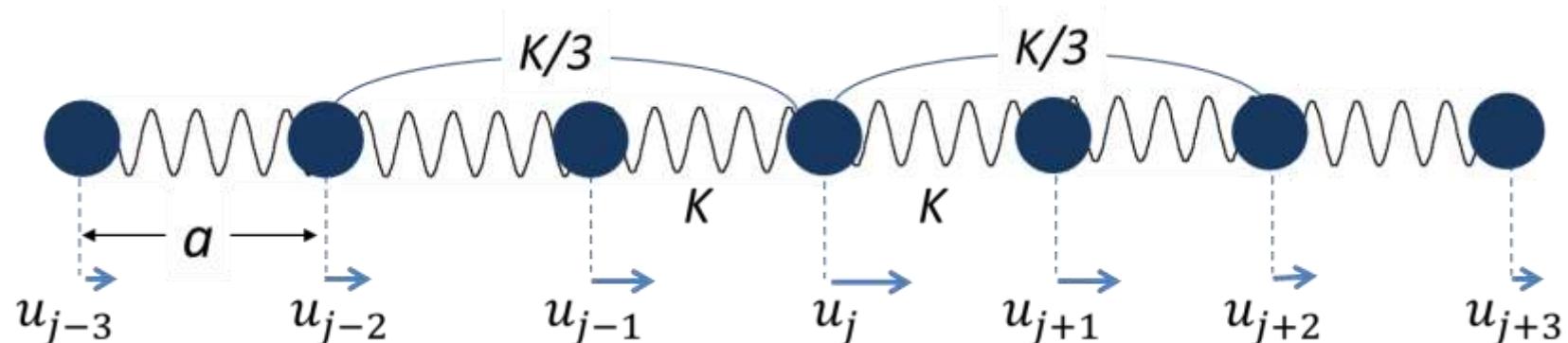
Webclassで提出して下さい
締切: 6/21 (月) 17:00

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？

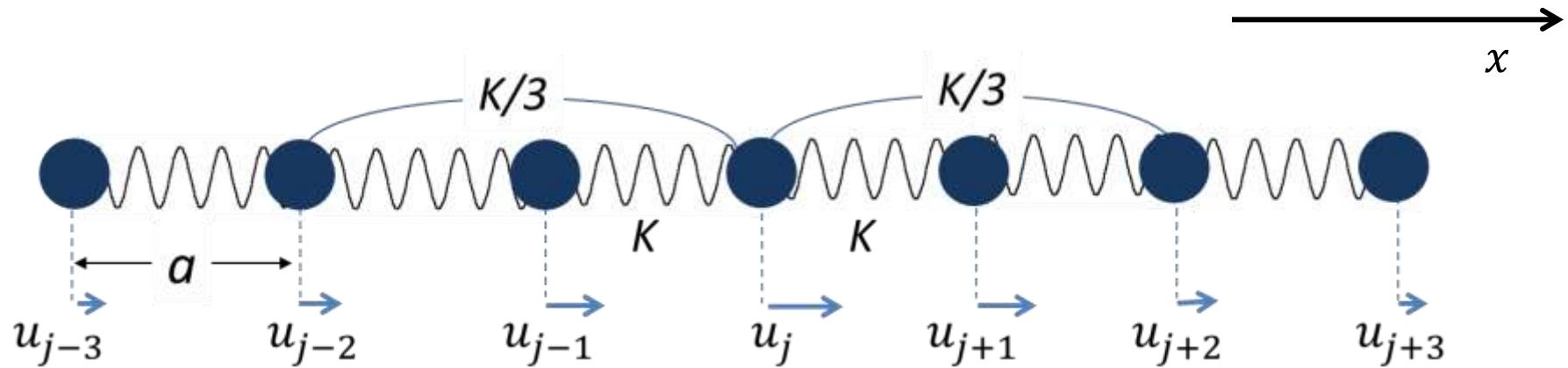
質量 M の原子が等間隔 a で1次元的に無限に並んだ構造を考える。最近接原子間、第2近接原子間には、原子の平衡位置からの変位の差に比例した力が働いていると仮定し、その力の比例定数をそれぞれ、 K $K/3$ とおく。

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。



課題解答例①



● j 番目の原子に働く力

$$F_j = K(u_{j+1} - u_j) - K(u_j - u_{j-1}) + \frac{K}{3}(u_{j+2} - u_j) - \frac{K}{3}(u_j - u_{j-2})$$

● j 番目の原子の運動方程式

$$M \frac{d^2 u_j}{dt^2} = F_j = -K(2u_j - u_{j-1} - u_{j+1}) - \frac{K}{3}(2u_j - u_{j-2} - u_{j+2})$$

課題解答例②

$$M \frac{d^2 u_j}{dt^2} = F_j = -K (2u_j - u_{j-1} - u_{j+1}) - \frac{K}{3} (2u_j - u_{j-2} - u_{j+2})$$

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

$$u_j = A e^{ijk a} e^{-i\omega t}$$

基準モード



u_j を運動方程式に代入

$$\begin{aligned} u_{j+2} &= A e^{i(j+2)ka} e^{-i\omega t} \\ &= A e^{ijk a} e^{-i\omega t} e^{2ika} \\ &= u_j e^{2ika} \end{aligned}$$

$$-M\omega^2 u_j = -K u_j (2 - e^{-ika} - e^{ika}) - \frac{K}{3} u_j (2 - e^{-2ika} - e^{2ika})$$

$$M\omega^2 = 2K (1 - \cos ka) + \frac{2K}{3} (1 - \cos 2ka)$$

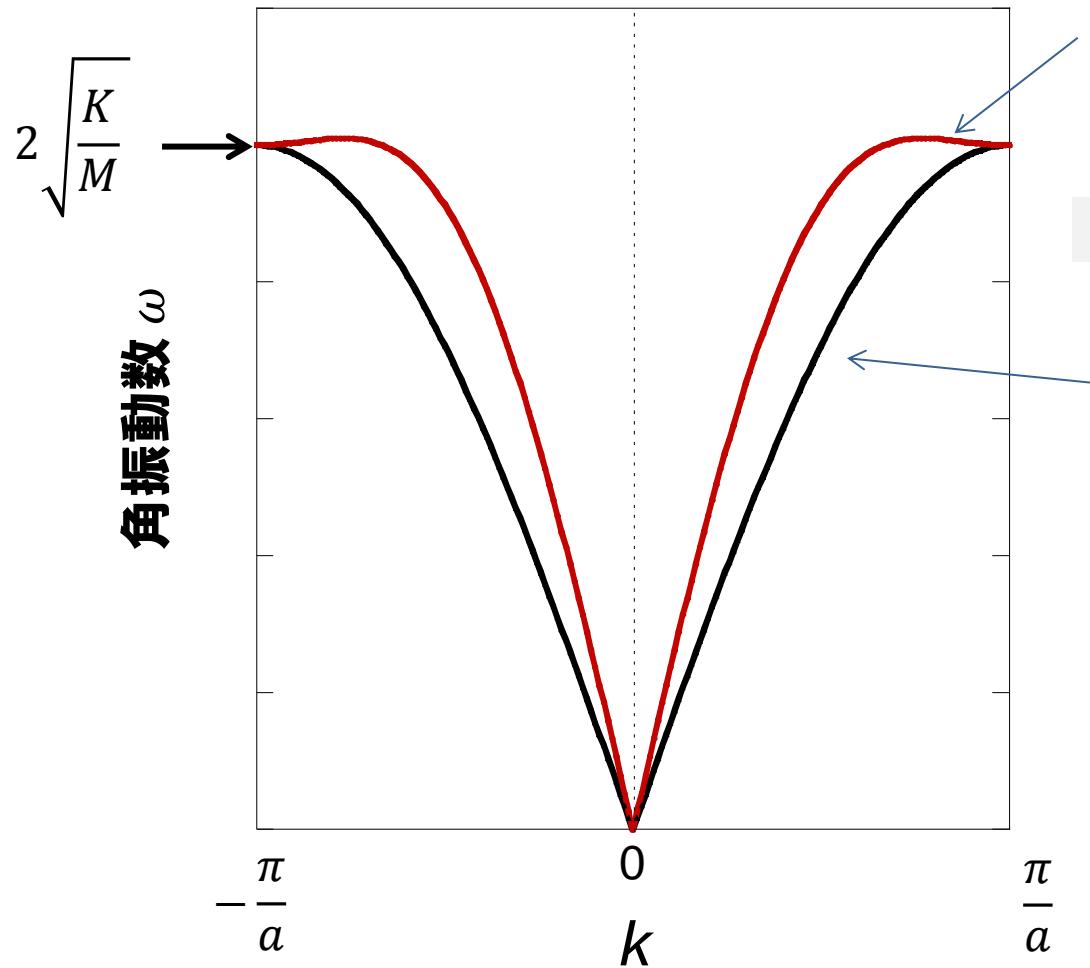
$$M\omega^2 = 4K \sin^2 \frac{ka}{2} + \frac{4K}{3} \sin^2 ka$$

$$\omega = 2 \sqrt{\frac{K}{M} \left(\sin^2 \frac{ka}{2} + \frac{1}{3} \sin^2 ka \right)}$$

課題解答例③

最近接+第2近接原子間の力を考慮

$$\omega = 2 \sqrt{\frac{K}{M} \left(\sin^2 \frac{ka}{2} + \frac{1}{3} \sin^2 ka \right)}$$



最近接原子間の力をのみ考慮

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

課題解答例④

長波長極限

波長が原子間距離に比べて十分長い場合 $ka \ll 1$ ($\lambda \gg a$)

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

● 最近接原子間の力のみ考慮

波の伝わる速さ

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

● 最近接+第2近接原子間の力を考慮

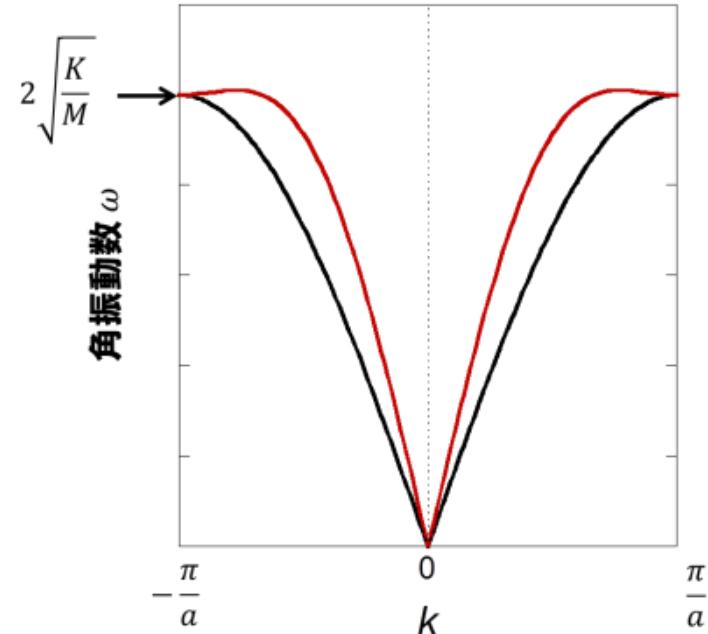
$$\omega = 2 \sqrt{\frac{K}{M} \left(\sin^2 \frac{ka}{2} + \frac{1}{3} \sin^2 ka \right)}$$

$$\cong 2 \sqrt{\frac{K}{M} \left\{ \left(\frac{ka}{2} \right)^2 + \frac{1}{3} (ka)^2 \right\}} = 2 \sqrt{\frac{K}{M} \times \frac{7}{12} (ka)^2} = ka \sqrt{\frac{K}{M} \times \frac{7}{3}}$$

波の伝わる速さ

$$a \sqrt{\frac{K}{M} \times \frac{7}{3}}$$

- ✓ 長波長極限では、振動数は波数に比例（音波と一緒に）
- ✓ 長波長の波の伝わる速さは $\sqrt{7/3}$ 倍



課題解答例⑤

ω の最大値

$$\omega = 2 \sqrt{\frac{K}{M} \left(\sin^2 \frac{ka}{2} + \frac{1}{3} \sin^2 ka \right)}$$

$$f(k) = \sin^2 \frac{ka}{2} + \frac{1}{3} \sin^2 ka$$

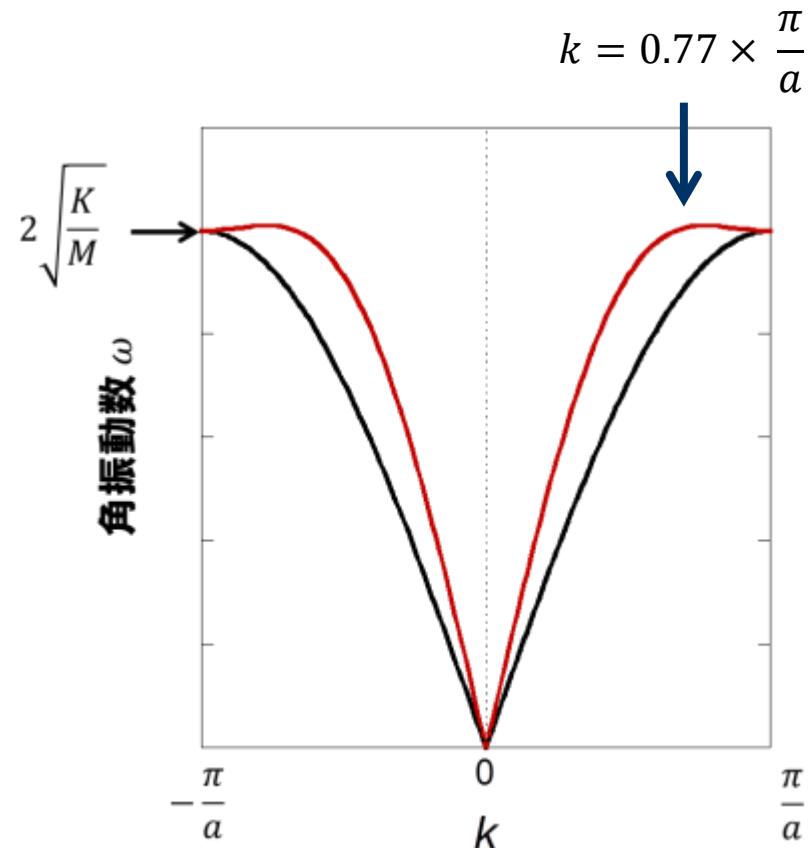
$$\frac{df}{dk} = a \sin \frac{ka}{2} \cos \frac{ka}{2} + \frac{2a}{3} \sin ka \cos ka$$

$$= \frac{a}{2} \sin ka + \frac{2a}{3} \sin ka \cos ka$$

$$= \frac{a}{2} \sin ka \left(1 + \frac{4}{3} \cos ka \right)$$

$\frac{df}{dk} = 0$ の条件で、 $k = 0$ 以外の解は

$\cos ka = -\frac{3}{4}$ を満足する k



ω は、 $k = 0.77 \frac{\pi}{a}$ のとき以下の最大値をとる

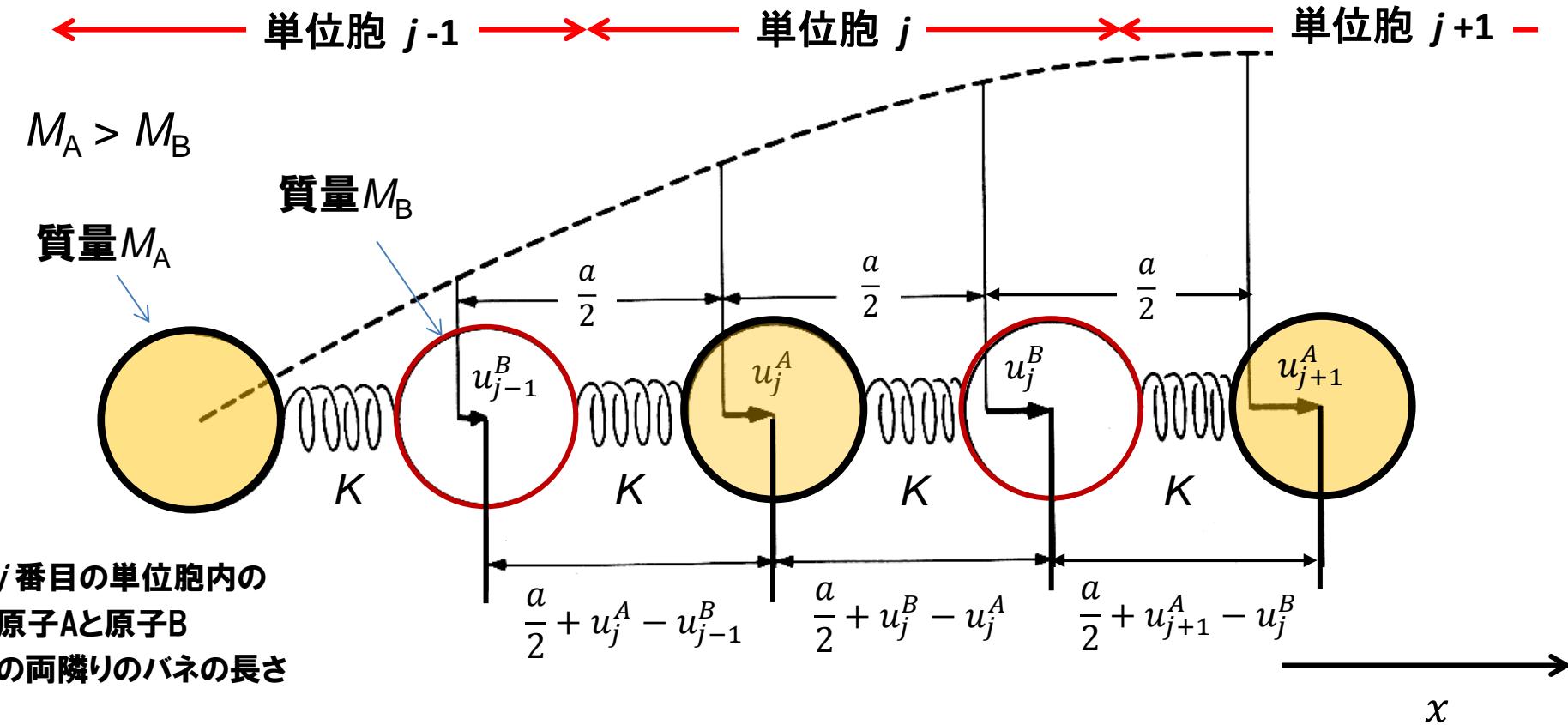
$$\omega = 2 \sqrt{\frac{K}{M} \times \frac{49}{48}} \cong 1.01 \times 2 \sqrt{\frac{K}{M}}$$

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

2種類の原子からなる1次元の格子振動

自然長 a 、バネ定数 K のバネに、質量 M_A, M_B の原子が交互につながれた1次元鎖



j 番目の単位胞内の
原子Aと原子B
の両隣りのバネの長さ

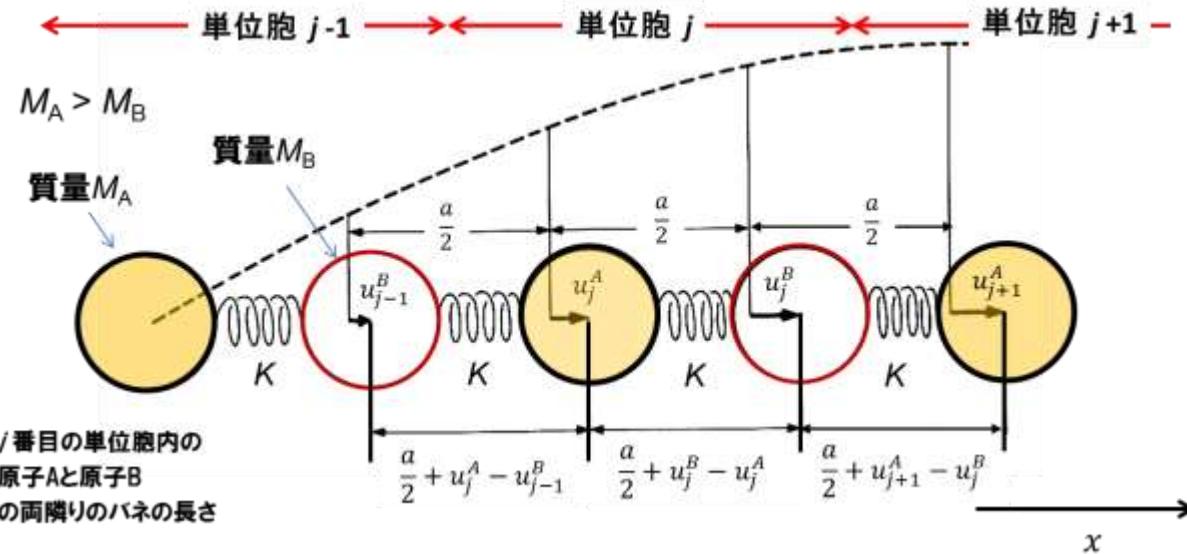
原子Aに働く力:

$$-K(u_j^A - u_{j-1}^B) \quad +K(u_j^B - u_j^A)$$

原子Bに働く力

$$-K(u_j^B - u_j^A) \quad +K(u_{j+1}^A - u_j^B)$$

分散関係の導出①



原子Aに働く力

$$F_j^A = K(u_j^B - u_j^A) - K(u_j^A - u_{j-1}^B)$$

原子Bに働く力

$$F_j^B = K(u_{j+1}^A - u_j^B) - K(u_j^B - u_j^A)$$

原子Aの運動方程式

$$M_A \frac{d^2 u_j^A}{dt^2} = F_j^A = -K(2u_j^A - u_{j-1}^B - u_j^B)$$

原子Bの運動方程式

$$M_B \frac{d^2 u_j^B}{dt^2} = F_j^B = -K(2u_j^B - u_j^A - u_{j+1}^A)$$

分散関係の導出②

原子Aの運動方程式

$$M_A \frac{d^2 u_j^A}{dt^2} = F_j^A = -K(2u_j^A - u_{j-1}^B - u_j^B)$$

原子Bの運動方程式

$$M_B \frac{d^2 u_j^B}{dt^2} = F_j^B = -K(2u_j^B - u_j^A - u_{j+1}^A)$$

原子 A, B は異なる質量を持つ

→ 異なる振幅を持つ

原子 A, B 同士はバネで繋がっている

→ 各原子は同じ振動数で振動し、波数kの波が伝搬



j番目の単位胞内の原子A, Bの変位を

$$u_j^A = A e^{ijk a} e^{-i\omega t} \quad \text{と仮定}$$

$$u_j^B = B e^{ijk a} e^{-i\omega t}$$

原子Aの運動方程式

$$-M_A \omega^2 A e^{ijk a} e^{-i\omega t} = -K (2A e^{ijk a} - B e^{i(j-1)ka} - B e^{ijk a}) e^{-i\omega t}$$

原子Bの運動方程式

$$-M_B \omega^2 B e^{ijk a} e^{-i\omega t} = -K (2B e^{ijk a} - A e^{ijk a} - A e^{i(j+1)ka}) e^{-i\omega t}$$

分散関係の導出③

原子Aの運動方程式

$$-M_A \omega^2 A = -K (2A - Be^{-ika} - B)$$

原子Bの運動方程式

$$-M_B \omega^2 B = -K (2B - A - Ae^{ika})$$

$$\begin{bmatrix} (2K - M_A \omega^2) A - K (1 + e^{-ika}) B = 0 \\ -K (1 + e^{ika}) A + (2K - M_B \omega^2) B = 0 \end{bmatrix}$$

$A = B = 0$ 以外の解が存在する条件:

$$\begin{vmatrix} 2K - M_A \omega^2 & -K (1 + e^{-ika}) \\ -K (1 + e^{ika}) & 2K - M_B \omega^2 \end{vmatrix} = 0 \quad -K^2 (2 + e^{ika} + e^{-ika})$$



$$(2K - M_A \omega^2) (2K - M_B \omega^2) - K^2 (1 + e^{-ika}) (1 + e^{ika}) = 0$$

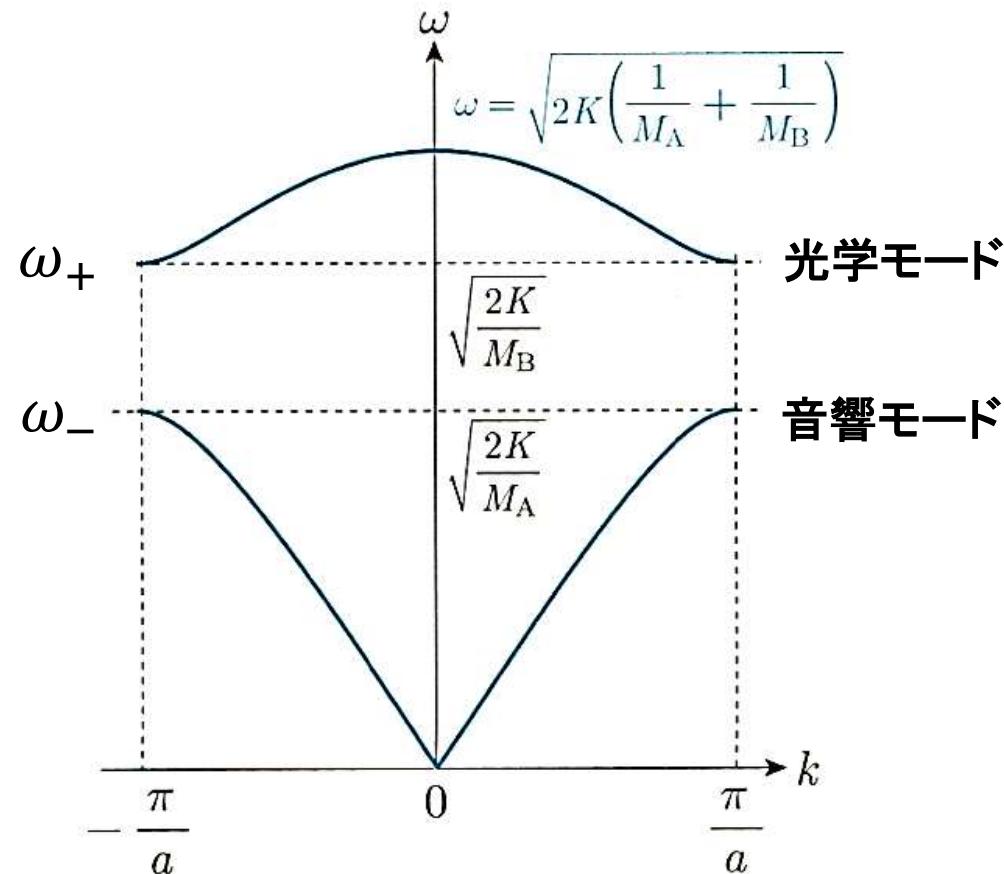
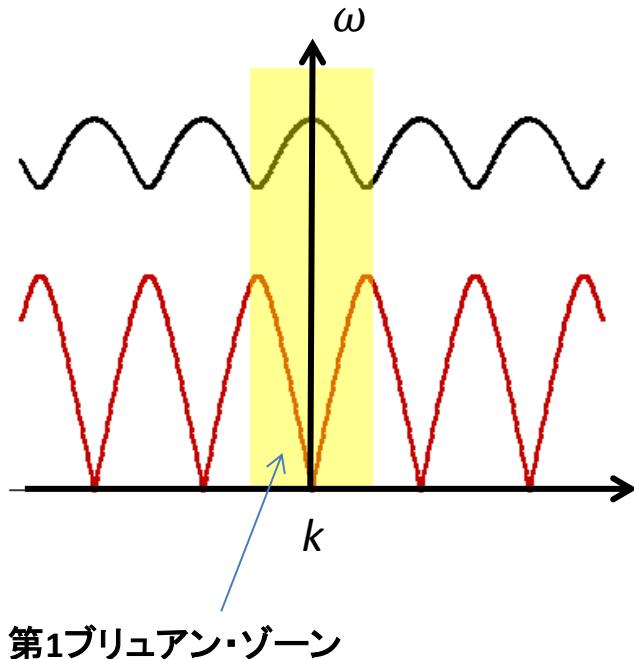
ω^2 に関する二次方程式: $M_A M_B \omega^4 - 2K(M_A + M_B)\omega^2 + 2K^2(1 - \cos ka) = 0$

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{1}{M_A M_B} \left[K(M_A + M_B) \pm \sqrt{K^2(M_A + M_B)^2 - 2M_A M_B K^2(1 - \cos ka)} \right]$$

分散関係の導出④

分散関係

$$\omega^2_{\pm} = K \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right) \pm K \sqrt{\left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 \left(\frac{ka}{2} \right)}{M_A M_B}}$$



ゾーン境界における角振動数

$k=\pi/a$ を ω^2_{\pm} の式に代入:

$$\omega^2_{\pm} = K \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right) \pm K \sqrt{\left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^2 - \frac{4}{M_A M_B}} = K \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right) \pm K \sqrt{\left(\frac{1}{M_A} - \frac{1}{M_B} \right)^2} \xrightarrow{\text{ルートの部分}} - \left(\frac{1}{M_A} - \frac{1}{M_B} \right)$$

$M_A > M_B$ より

$$\omega^2_{\pm} = K \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right) \mp K \left(\frac{1}{M_A} - \frac{1}{M_B} \right)$$

光学モード ω_+

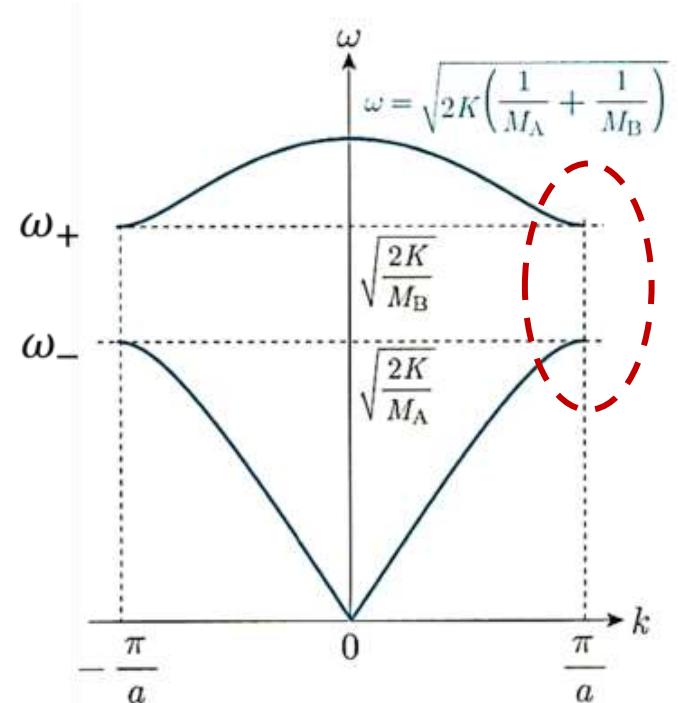
$$\omega^2_+ = \frac{2K}{M_B}$$

$$\omega_+ = \sqrt{\frac{2K}{M_B}}$$

音響モード ω_-

$$\omega^2_- = \frac{2K}{M_A}$$

$$\omega_- = \sqrt{\frac{2K}{M_A}}$$



長波長領域における振動数

$ka = \frac{2\pi a}{\lambda} \ll 1$ の場合

$$\omega^2_{\pm} = K \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right) \pm K \sqrt{\left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 \left(\frac{ka}{2} \right)}{M_A M_B}} \cong K \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right) \pm K \sqrt{\left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^2 - \frac{k^2 a^2}{M_A M_B}}$$

$$= K \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right) \left\{ 1 \pm \left[1 - \frac{M_A M_B k^2 a^2}{(M_A + M_B)^2} \right]^{1/2} \right\}$$

$$\omega^2_{\pm} \cong K \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right) \left\{ 1 \pm \left[1 - \frac{M_A M_B k^2 a^2}{2(M_A + M_B)^2} \right] \right\}$$

光学モード ω_+

$k^2 a^2 \sim 0$ とおくと

$$\omega_+ = \sqrt{2K \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)}$$

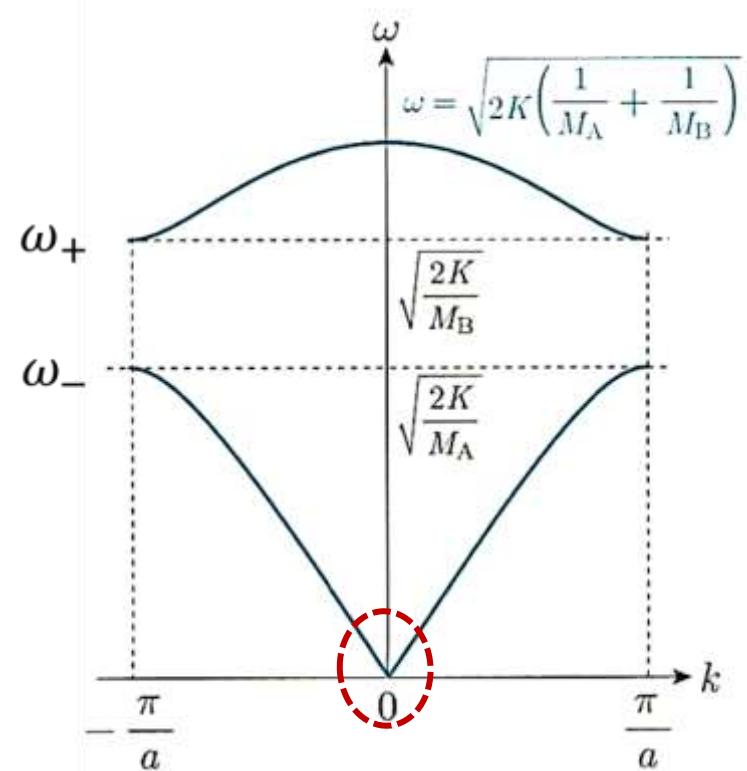
音響モード ω_-

$$\omega_- = ka \sqrt{\frac{K}{2(M_A + M_B)}}$$

$$\omega_- \propto k$$

長波長において音波の分散関係を持つ

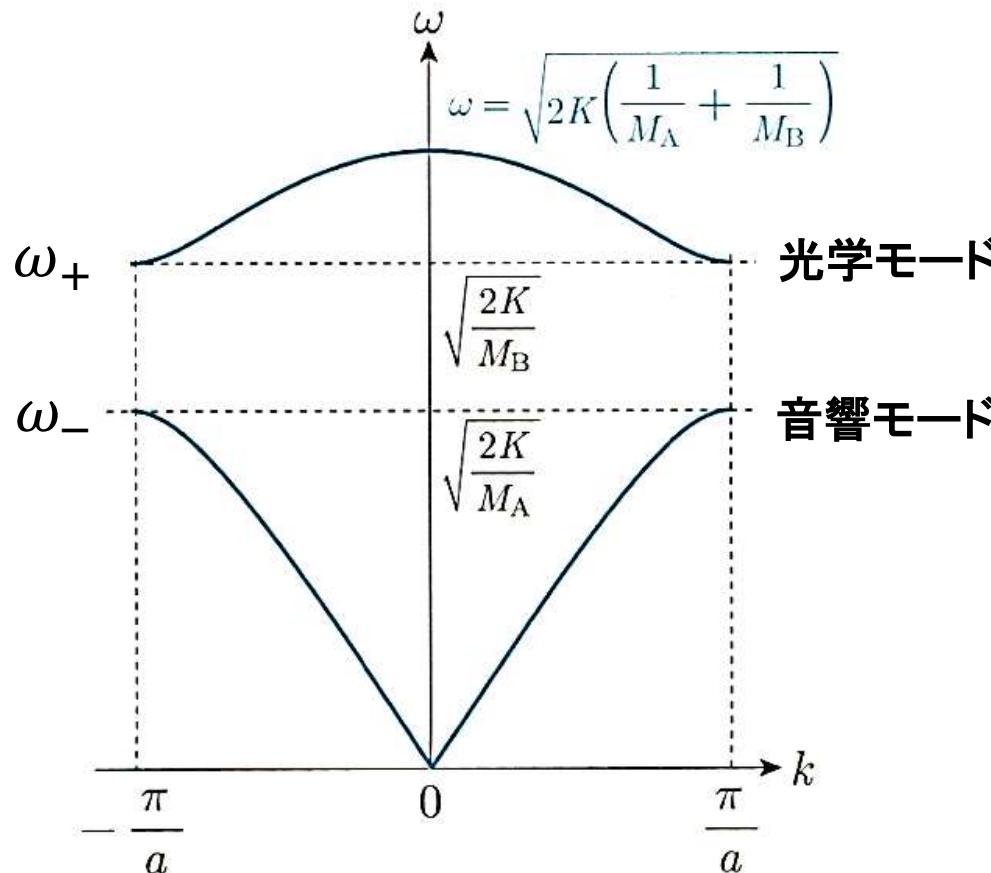
$$\sin \left(\frac{ka}{2} \right) \cong \frac{ka}{2}$$



音響モード、光学モード

分散関係

$$\omega^2 \pm = K \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right) \pm K \sqrt{\left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 \left(\frac{ka}{2} \right)}{M_A M_B}}$$



長波長極限における原子振動の様子①

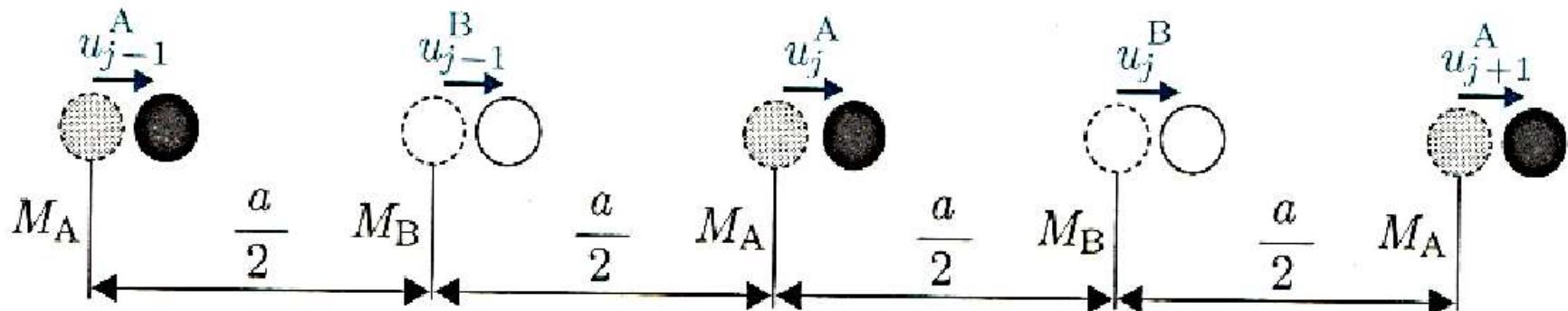
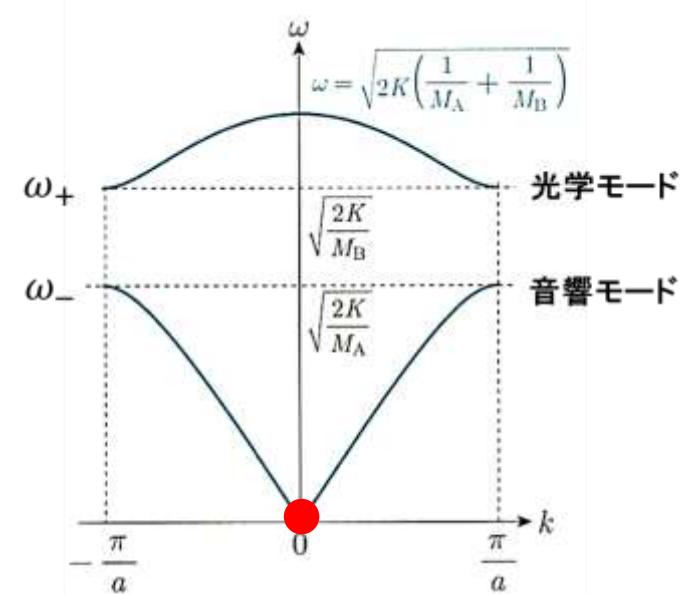
$$\begin{cases} (2K - M_A \omega^2) A - K (1 + e^{-ika}) B = 0 \\ -K (1 + e^{ika}) A + (2K - M_B \omega^2) B = 0 \end{cases}$$

音響モード ω_-

A, Bに関する連立方程式で、 $\omega \sim 0, k \sim 0$ とする

$$A = B$$

原子A, B が同じ方向に一緒に同じ振幅で振動する



長波長極限における原子振動の様子②

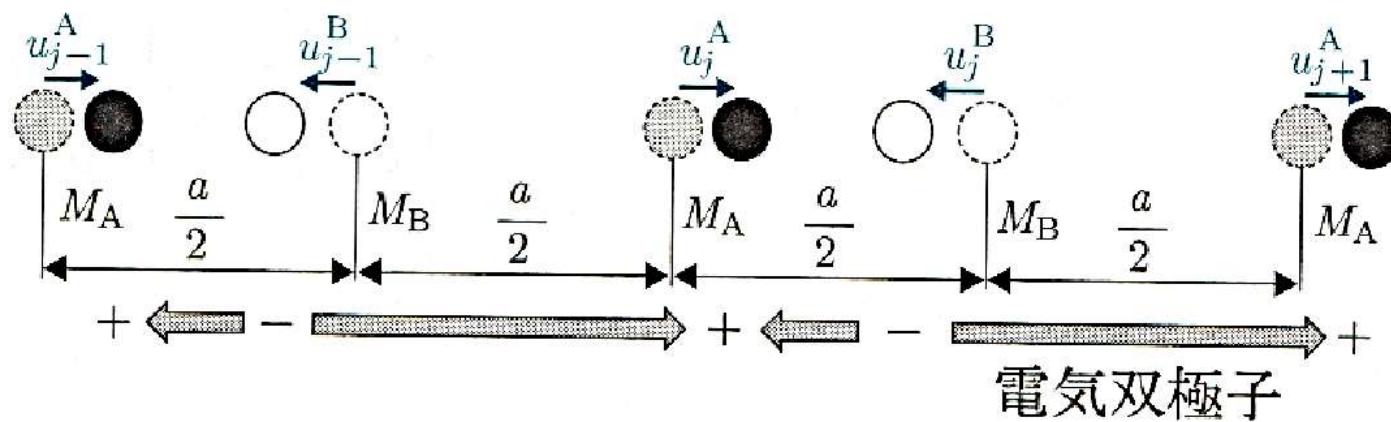
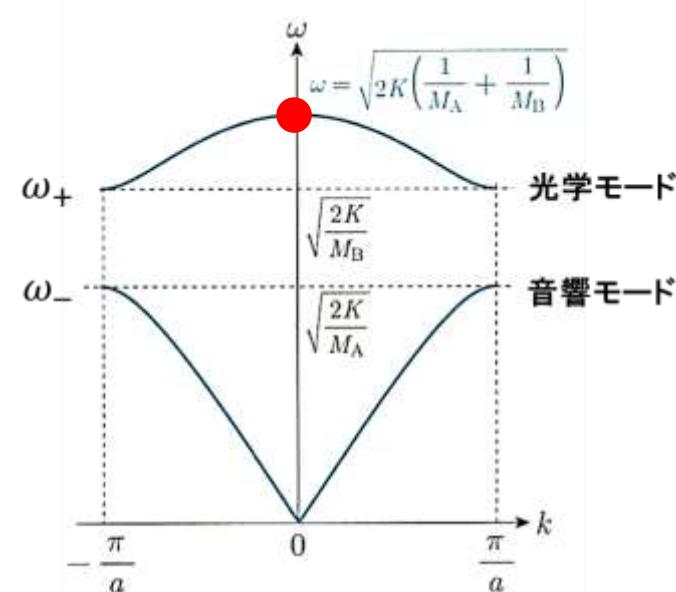
$$\begin{cases} (2K - M_A \omega^2) A - K (1 + e^{-ika}) B = 0 \\ -K (1 + e^{ika}) A + (2K - M_B \omega^2) B = 0 \end{cases}$$

光学モード ω_+

$$\omega_+ = \sqrt{2K \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)}$$

をA, Bに関する連立方程式に代入し
 $k \sim 0$ とする

→ $\frac{B}{A} = -\frac{M_A}{M_B}$ 重心が固定されていて、
 原子A, Bが互いに反対方向に変位
重心 : $AM_A + BM_B = 0$



ゾーン境界における原子振動の様子①

$$\begin{cases} (2K - M_A \omega^2) A - K (1 + e^{-ika}) B = 0 \\ -K (1 + e^{ika}) A + (2K - M_B \omega^2) B = 0 \end{cases}$$

A, Bに関する連立方程式で $k = \pi/a$ とする

$$\begin{cases} (2K - M_A \omega^2) A = 0 \\ (2K - M_B \omega^2) B = 0 \end{cases}$$

音響モード ω_-

$$\omega_- = \sqrt{\frac{2K}{M_A}} \quad \text{より,} \quad \begin{cases} (2K - 2K)A = 0 \\ \left(2K - \frac{2KM_B}{M_A}\right)B = 0 \end{cases}$$

$A=B=0$ 以外の解を持つには、 $A \neq 0$

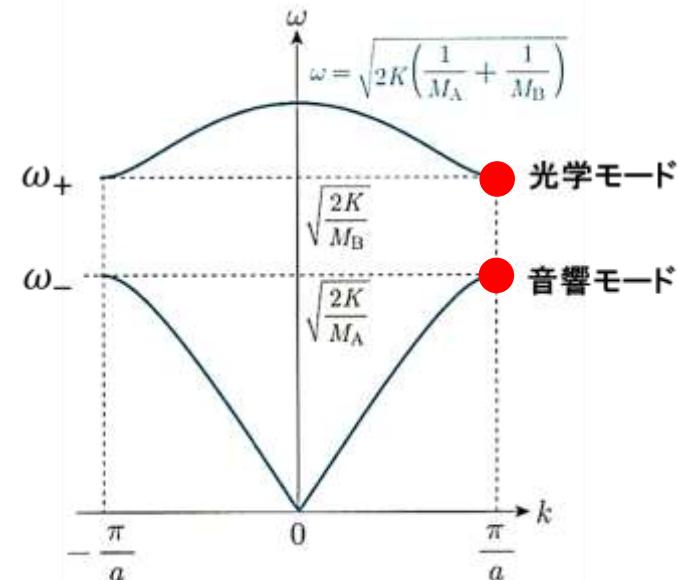
$$\begin{cases} u_j^A = Ae^{ijk\pi}e^{-i\omega t} = Ae^{ij\pi}e^{-i\omega t} \\ u_j^B = 0 \end{cases}$$

光学モード ω_+

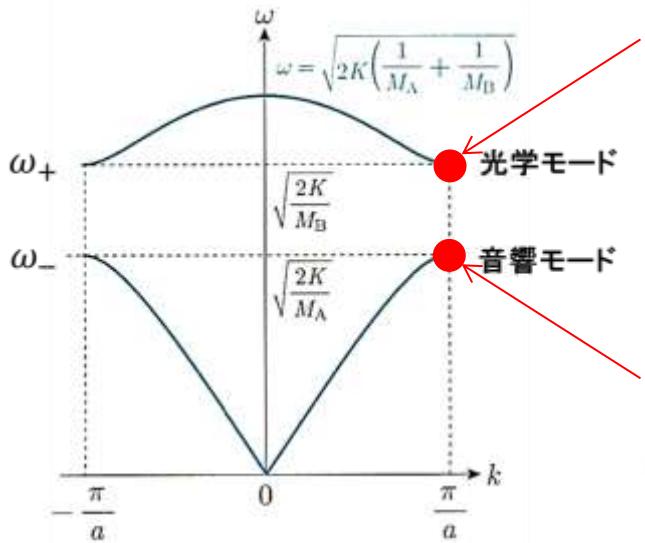
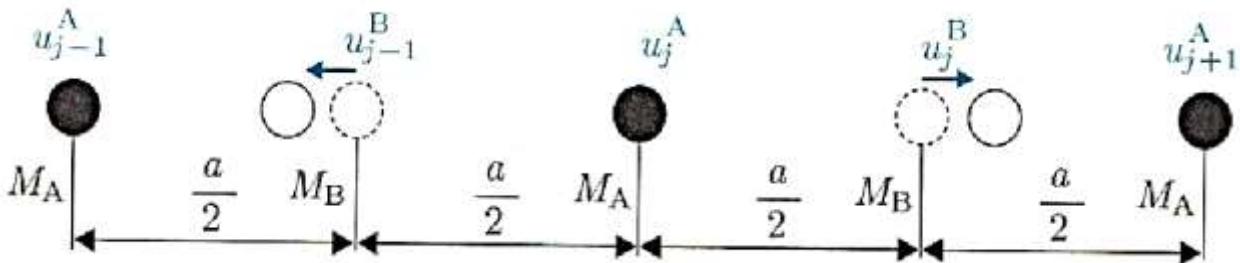
$$\omega_+ = \sqrt{\frac{2K}{M_B}} \quad \text{より,} \quad \begin{cases} \left(2K - \frac{2KM_A}{M_B}\right)A = 0 \\ (2K - 2K)B = 0 \end{cases}$$

$A=B=0$ 以外の解を持つには、 $B \neq 0$

$$\begin{cases} u_j^A = 0 \\ u_j^B = Be^{ijk\pi}e^{-i\omega t} = Be^{ij\pi}e^{-i\omega t} \end{cases}$$

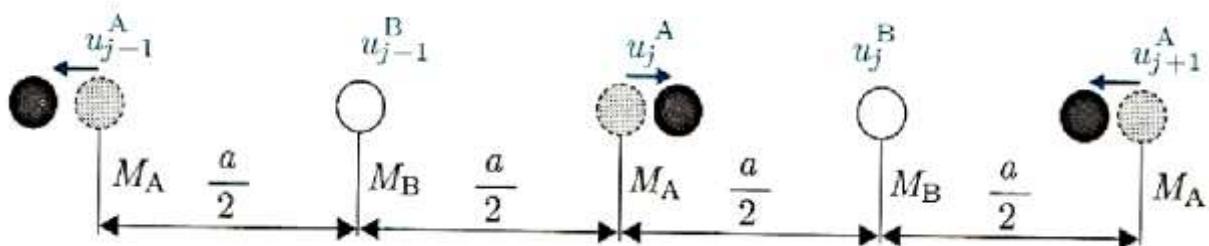


ゾーン境界における原子振動の様子②



$$\begin{cases} u_j^A = 0 \\ u_j^B = B e^{ijk a} e^{-i\omega t} = B e^{ij\pi} e^{-i\omega t} \end{cases}$$

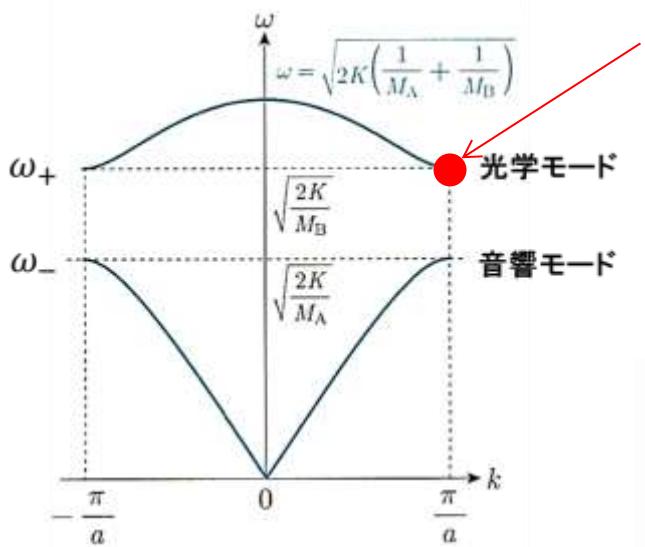
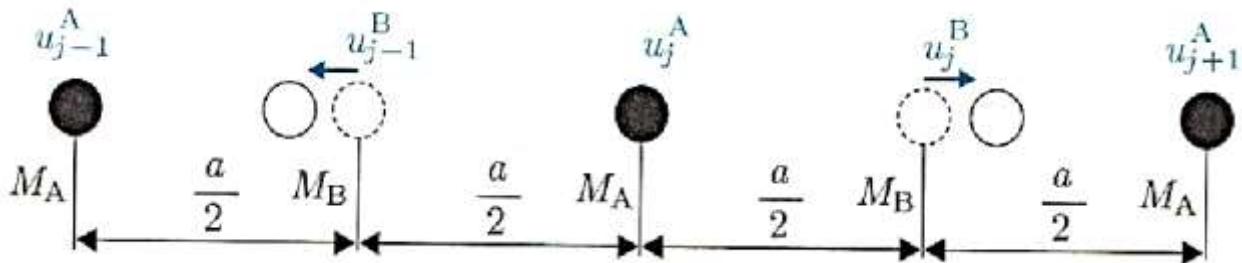
隣合う原子B同士が互いに反対方向に変位し、原子Aは静止するモード



$$\begin{cases} u_j^A = A e^{ijk a} e^{-i\omega t} = A e^{ij\pi} e^{-i\omega t} \\ u_j^B = 0 \end{cases}$$

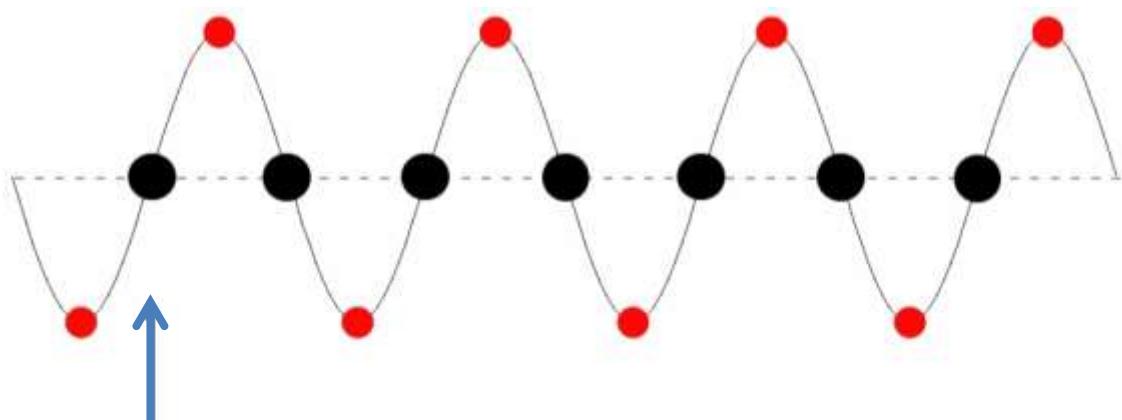
隣合う原子A同士が互いに反対方向に変位し、原子Bは静止するモード

ゾーン境界における原子振動の様子③



$$\begin{cases} u_j^A = 0 \\ u_j^B = Be^{ijk\alpha}e^{-i\omega t} = Be^{ij\pi}e^{-i\omega t} \end{cases}$$

隣合う原子B同士が互いに反対方向に変位し、原子Aは静止するモード



原子A

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。

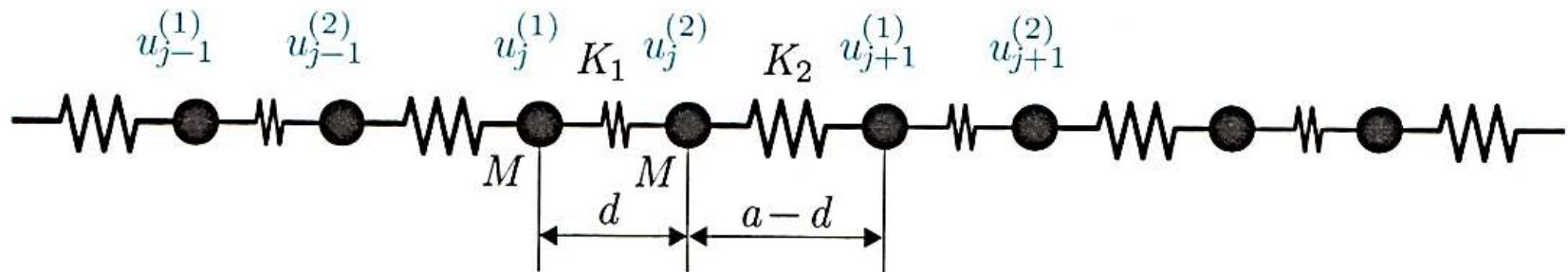
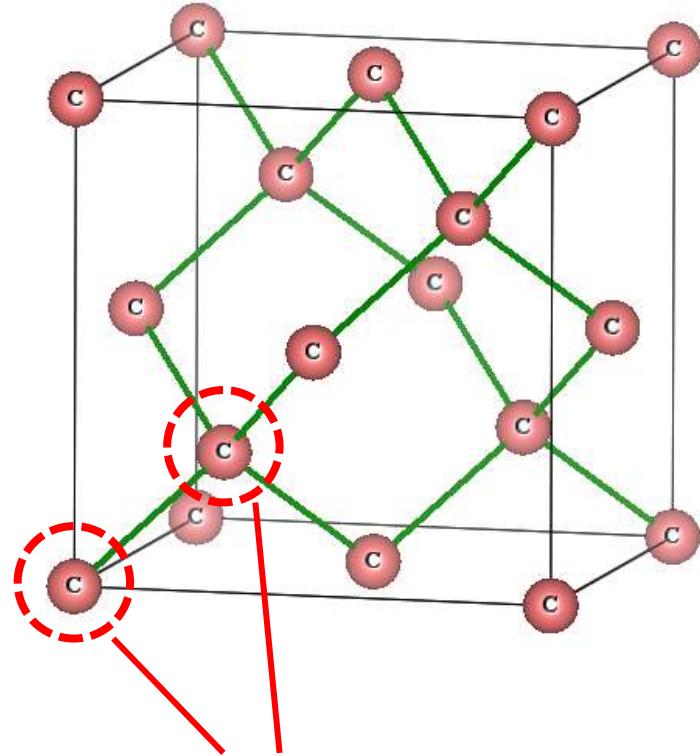


図 バネ定数の異なる 2 種類のバネによってつながっている 1 次元格子

- (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) $k=0, \pi/a$ 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

[111]



単位構造の原子

