

Date 26/8/31

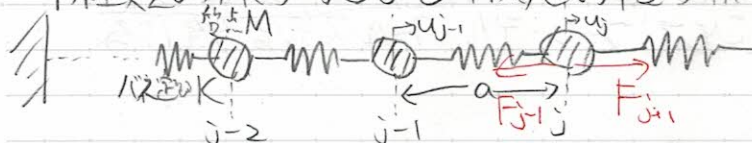
格子振動とフォノン PR94~99

格子振動: 結晶中の原子の振動

→ 量子化するとフォノンになる

固体の光学的性質や超伝導に影響

○ 1種類の原子からなる1次元の格子振動



a の間隔をあけて
質点 M がバネ K で
無限に接続されている
状態を考える。

まずは古典力学ベースで考えると、 j 番目の質点に働く力の運動方程式は

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

$$= -K(2u_j - u_{j-1} - u_{j+1})$$

バネ振動なので、この解は $u_j = A e^{i(jka - \omega t)}$ と仮定する。
波数 k 振動数 ω

これを運動方程式に代入して整理すると

$$-M\omega^2 e^{i(jka - \omega t)} = -K(2e^{i(jka - \omega t)} - e^{i((j-1)ka - \omega t)} - e^{i((j+1)ka - \omega t)})$$

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

$$\omega^2 = \frac{2K}{M} \left(1 - \frac{e^{ika} + e^{-ika}}{2}\right) = \frac{2K}{M} (1 - \cos ka)$$

* $e^{i(jka - \omega t)} \neq 0$ としてくりぬく。

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

$\therefore \omega = 2\sqrt{\frac{K}{M}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right| \Rightarrow$ 角振動数 ω は波数 k の周期関数となる。
(分散関係)

 k についての周期は $2\pi/a$ となっており、実際ある波数 k_0 の1周期 $k_0 + \frac{2\pi}{a}$ で

$$\omega' = 2\sqrt{\frac{K}{M}} \left| \sin \frac{k_0 + \frac{2\pi}{a}}{2} a \right| = 2\sqrt{\frac{K}{M}} \left| \sin \left(\frac{k_0}{2} a + \pi \right) \right|$$

$$= 2\sqrt{\frac{K}{M}} \left| \sin \frac{k_0}{2} a \cos \pi + \cos \frac{k_0}{2} a \sin \pi \right| = 2\sqrt{\frac{K}{M}} \left| \sin \frac{k_0}{2} a \right| \text{ となり、}$$

絶対値符号の中身は正負の違いしかないため、 $\omega' = \omega$ ということになる。このような性質があるので、 k 1周期分だけ計算でそれ以外の周期については繰り返し考えることができる。なので、かつこのような条件では $-\frac{\pi}{a} < k < \frac{\pi}{a}$ の波数に絞って計算することが多い。

(ブリュアンゾーンの1次元版に相当する)

$\omega = 2\sqrt{\frac{K}{M}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|$ であることから、波数が小さいと ω は $\frac{ka}{2}$ であるから、同じ向きに変位する

k が大きくなるにつれてだんだん質点の変位方向はズレていき、 $k = \frac{\pi}{a}$ のときに隣り合う質点は全て逆方向に変位するようになる

また、その $k = \frac{\pi}{a}$ のとき、 ω は最大値 $\omega_{\max} = 2\sqrt{\frac{K}{M}}$ とする。
(これ以上の ω を人為的に与えても、波として破綻してしまう)

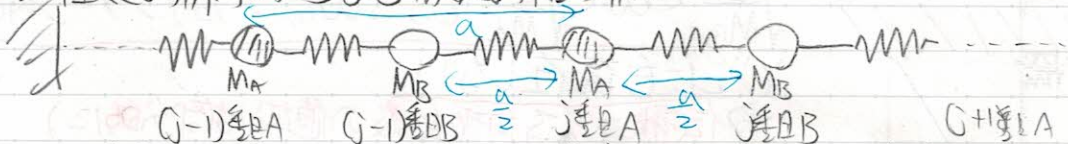
ところで、 k が微小な領域では、 $\frac{ka}{2} \ll 1$ より $\sin \frac{ka}{2} \approx \frac{ka}{2}$ なので、
 $\omega \approx a\sqrt{\frac{K}{M}} k$

このとき、 k についての ω の係数 $c = a\sqrt{\frac{K}{M}}$ は、 $\omega/k = 2\pi f / (2\pi/\lambda) = f\lambda$ (つまり波の速度 $v = f\lambda$) に相当する。

また、固体の弾性を伝える音波の速度はヤング率 E と密度 ρ を用いて $v = \sqrt{E/\rho}$ と表わされるが、棒の断面積を S とおくと $E = Ka/S$ 、 $\rho = M/Sa$ なので、整理すると $v = \sqrt{\frac{E}{\rho}} = \sqrt{\frac{Ka}{S} \cdot \frac{Sa}{M}} = a\sqrt{\frac{K}{M}}$ となる。

$\Rightarrow$ k が微小なときの格子振動の伝播速度は音波伝播と一致する。
このような k が微小時の伝播モードを 音響モード といふ。

2種類の原子からなる1次元の格子振動



バネ定数は全て K だが MA の質点と MB の質点が交互に並んでいる系で考える。
ここでは AB の繰り返しはまとめて1単位とみなし、例えば j 番目の単位に MA の変位を u_j^A 、 MB の変位を u_j^B とおくとこにする。

j 番目の運動方程式は、1種類のときと同様に、

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

となる。同じく $u_j^A = A e^{i(jka - \omega t)}$ 、 $u_j^B = B e^{i(jka - \omega t)}$ とし、 A と B について整理すると

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

という行形での連立方程式が得られる。

A, B 以外の解をもつためには (係数行列の行列式) = 0 でないといけないので
 $(2K - M_A \omega^2)(2K - M_B \omega^2) - \{-K(1 + e^{-ika})\} \{-K(1 + e^{ika})\} = 0$

$$M_A M_B \omega^4 - 2K(M_A + M_B)\omega^2 + 2K^2 - K^2(e^{ika} + e^{-ika}) = 0$$

ω^2 についての 2 次方程式なので、解の公式より

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

と整理される。

ω^2 は 1 項めは 1 種類のとその他が M_A と M_B 2 つに分かれたような状態だが、
 2 項めについては M_A と M_B の間の複雑な相互作用をせしめている。

1 種類のと他の音響モード相当の近似 ($\frac{ka}{2} \ll 1$) を行い、

$$\omega \div a \sqrt{\frac{K}{2(M_A + M_B)}} \approx \sqrt{2K \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)}$$

となる。

音響モード相当時は、固定で $\sqrt{2K \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)}$ が解となっているのと、
 もう一つ k に比例して増加する直線解をもつ。

また周期の端 $k = \pm \frac{\pi}{a}$ では、整理すると

$$\omega = \sqrt{\frac{2K}{M_A}}, \sqrt{\frac{2K}{M_B}}$$

と、各質点ごとに完全に分離された状態となる。

分散関係を図示すると左図のようになる。

$$\sqrt{\frac{2K}{M_B}} < \omega < \sqrt{\frac{2K}{M_A}}$$

となる ω はブロッグアンゾーン内の

どこにも存在しない。

⇒ 伝搬できる角振動数の値域は (部分的に) 不連続となる。

結晶のエネルギー状態を考えると
 主にならる概念、

