

PR 100 ~ 107

。音響モード/光学モード

 $k=0$ かつ $\omega=0$ の時、格子振動は

$$\begin{bmatrix} 2K & -2K \\ -2K & 2K \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow A=B$$

↑上下向き

⇒波数も角振動数も微小なとき、隣り合う原子は

同じ向き / 同じ振幅で振動

これは固体を伝わる音波と同じ、音響モード

 $k=0$ かつ $\omega=\sqrt{2K(M_A+M_B)}$ の時、

$$\begin{bmatrix} -2K(M_A/M_B) & -2K \\ -2K & -2K(M_B/M_A) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \frac{B}{A} = -\frac{M_A}{M_B}$$

⇒隣り合う原子は互いに逆向き / 質量比に反した振幅で振動

逆向きに振動 → 双光子モード → 分枝、

分枝は光と相互作用するので「光学モード」



音響モード



光学モード

(特殊な例)

 $k=\pi/a$ かつ $\omega=\sqrt{2K/M_B}$ の時、

$$\begin{bmatrix} 2K-2K(M_A/M_B) & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow A=0, Bは任意$$

∴原子Aは静止、原子Bのみが振動する。また原子Bの向きは奇偶番目で変わる

 $k=\pi/a$ かつ $\omega=\sqrt{2K/M_A}$ の時、逆に原子Aが振動して原子Bが静止、向きはやはり奇偶で変わる

○ 3次元の格子振動
これまで考慮した1次元振動

3次元振動 $\Rightarrow$ 変位の自由度が増す
 ↓
 1次元モード
 2次元モード
 3次元モード

・ 縦モードと横モード

単位胞の中の原子に対して、それぞれ番号を振って1で指定する、

$\Rightarrow$ 1番目の原子の変位は $u_j^l = A_l e^{i(k \cdot r_j - \omega t)}$

(j: 単位胞の番号 A_l : 振動のベクトル)

ところで、この場合伝播方向は電磁波と同様振動方向と一致するとは限らない、

└ 縦モード: 伝播方向と振動方向が平行 $A_l \parallel k$
 └ 横モード: 伝播方向と振動方向が垂直 $A_l \perp k$

さらに、それぞれについて音響/光学の2モードも存在するので、

	音響	光学
縦	LA	LO
横	TA	TO

の4モードが存在する。

例えばGaAsの場合、

・ $k \sim 0$ では、 $LO > TO > LA > TA$ の順に振動数が高い

・ LOとTOは周期的に振動数の上下入れ替わる。

・ LOかTOに対してLAとTAは常に低い

・ LAに対してTAは常に低い

※ LAに対してTAの振動数は常に低い $\rightarrow$ 伸縮よりも折り曲げるほうが低エネルギーである

・フォノン: 格子振動の量子化

粒子 $\rightarrow$ 量子力学では 波動 である。
 ならば 波動も量子力学においては粒子なのでは?

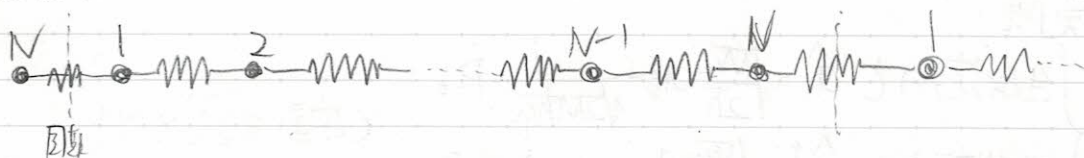
$\downarrow$ なんらかんかの論理展開

各振動数 ω の波動 $\Rightarrow$ $\hbar\omega$ のエネルギーをもつ粒子 (フォノン)

調和振動子のエネルギー $E = (n + 1/2)\hbar\omega$

$\square$ 任意の整数 $\Rightarrow$ ここをフォノン個数とする。

ついでに、 ω は波数 k の関数、かつ伝搬モードによっても変化するのて、
 $E_{k,s} = (n_{k,s} + 1/2)\hbar\omega_{k,s}$ で ある波数あるモードのフォノンの個数 に従って
 表現する。



境界条件: 格子には $1 \sim N$ 番目の原子が含まれ、その単位でループする。

$$\begin{cases} u_{N+1} = u_1 & (\text{周期}) \\ e^{i(N+1)ka} e^{-i\omega t} = e^{ika} e^{-i\omega t} & (\text{接続}) \\ e^{iNka} = 1 & (\text{終端}) \end{cases}$$

終端条件より $Nka = 2\pi m$ (m は整数) $\Rightarrow$ $k = 2\pi m / Na$
 ただし k はブロッホの条件 $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$ に縛られるので、

$$m = \begin{cases} -\frac{N-1}{2}, -\frac{N-3}{2}, -\frac{N-5}{2}, \dots, \frac{N-1}{2} & (\times N \text{ が奇数のとき}) \\ -\frac{N-2}{2}, -\frac{N-4}{2}, -\frac{N-6}{2}, \dots, \frac{N}{2} & (\times N \text{ が偶数のとき}) \end{cases}$$

また、変位がわかれば速度がわかり、運動エネルギー かわかる。

N 個の運動エネルギーの合計は

$$T = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2} M \left(\frac{\partial u_j}{\partial t} \right)^2$$

また、位置エネルギーの合計は

$$V = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2} k (u_{j+1} - u_j)^2$$

よて、ハミルトニアンは

$$H = V + T = \sum_{j=1}^N \left(\frac{1}{2} M \left(\frac{\partial u_j}{\partial t} \right)^2 + \frac{1}{2} k (u_{j+1} - u_j)^2 \right)$$

そのままだとハミルトニアンが扱いづらいので、

離散フーリエ変換 $U_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k U_k e^{i j k a}$ を導入する。

$$H = \sum_{j=1}^N \left[\frac{1}{2} M \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \frac{\partial U_k}{\partial t} e^{i j k a} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} \frac{\partial U_{k'}}{\partial t} e^{i j k' a} \right) + \frac{1}{2} K \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k U_k e^{i j k a} (e^{i k a} - 1) \right) \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} U_{k'} e^{i j k' a} (e^{i k' a} - 1) \right) \right]$$

$$= \frac{N}{2} \left\{ \frac{M}{2N} \sum_k \sum_{k'} \frac{\partial U_k}{\partial t} \frac{\partial U_{k'}}{\partial t} e^{i j (k+k') a} + \frac{K}{2N} \sum_k \sum_{k'} U_k U_{k'} (e^{i k a} - 1)(e^{i k' a} - 1) e^{i j (k+k') a} \right\}$$

さらに $\sum_{j=1}^N e^{i j (k+k') a} = N \delta_{k, -k'}$ となること、運動量が $P_k = M \frac{\partial U_k}{\partial t}$ であることを用いると、

$$H = \sum_k \left\{ \frac{P_k P_{-k}}{2M} + \frac{1}{2} M \omega^2 U_k U_{-k} \right\}$$

⇒ 調和振動子のハミルトニアンとよく類似した形が得られる。
実際

$$\begin{cases} \text{生成演算子} \hat{a}_k = \frac{\sqrt{M\omega}}{\sqrt{2\hbar}} U_k + \frac{i}{\sqrt{2M\hbar\omega}} P_k \\ \text{消滅演算子} \hat{a}_k^\dagger = \frac{\sqrt{M\omega}}{\sqrt{2\hbar}} U_{-k} - \frac{i}{\sqrt{2M\hbar\omega}} P_{-k} \end{cases} \quad \text{と定義することで}$$

$\hat{H} = \sum_k \left(\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$ と、フーリエのハミルトニアンも調和振動子と同様、
簡約な形で書けることからも。