



中部大学大学院客員教授 田中基彦

2023年度秋学期・大学院講義

第14, 15回 フォノン I, II

(固体物理学入門, キッテル, 第4,5章)

* Photon vs Phonon

フォトン(電磁波) 第6章から後のテーマ

電磁波, 10^{-12} s (ピコ秒)より速い現象

電子, ときに陽子が関与する

フォノン(音波、弾性波) 第4, 5章

静電波, 10^{-9} s (ナノ秒)までのゆっくりした現象

陽子が関与

* Plasmon (プラズマ)

電子と陽子の集団的現象。気体。

| | 名称 | 場 |
|--|-------|----------|
|  | 電子 | — |
|  | フォトン | 電磁波 |
|  | フォノン | 弾性波 |
|  | プラズモン | 電子の集団的波動 |
|  | マグノン | 磁化の波動 |
| - | ポーラロン | 電子+弾性的変形 |
| - | 励起子 | 分極波 |

第4章 フォノンI: 結晶の振動

フォノンについて、第4章と第5章を述べる。
先の第4章はフォノンの結晶振動を行い、
その次の第5章はフォノンの熱的性質に
ついて行う。

単原子結晶の振動

立方結晶の3辺 [100][110][111]

1辺 面對角 対角線

それぞれ3個のモード

縦分極… 1つ, 縦波

横分極… 2つ, 横波

線形を仮定

u_{n-1} u_n u_{n+1} 隣どうしの相互作用

$$F_s = C(u_{s-1} - u_s) + C(u_{s+1} - u_s)$$

運動方程式

$$M \frac{d^2 u_s}{dt^2} = C(u_{s-1} - u_s) + C(u_{s+1} - u_s)$$

$$d^2 u_s / dt^2 = -\omega^2 u_s \quad \text{より}$$

$$-M \omega^2 u_s = C(u_{s-1} - u_s) + C(u_{s+1} - u_s)$$

$$u_{s\pm 1} = u \exp(isKa \pm iKa), \quad u_s = u \exp(isKa)$$

$$-\omega^2 M u = C u \{ \exp(iKa) + \exp(-iKa) - 2 \}$$

$$2 \cos Ka = \exp(iKa) + \exp(-iKa) \quad \text{より}$$

$$\omega^2 = (2C / M) (1 - \cos(Ka)) \quad (7)$$

第1ブリルアンゾーンの境界 → 図4

波は進まない！

この境界を越えると、同じ繰り返しになる

$$K = \pm\pi / a \rightarrow \omega = 0$$

$$\sin Ka = \sin(\pm\pi) = 0$$

分散関係は、

$$\omega^2 = (2C / M) \sin^2(Ka / 2)$$

$$\rightarrow \omega = (2C / M)^{1/2} |\sin(Ka / 2)|$$

群速度

波束の伝わる速度 $v_g = \frac{d\omega}{dK}$

$$v_{ph} = \omega / K \quad \text{phase velocity}$$

分散式(9)から $v_g = \left(\frac{4C}{M} \right)^{1/2} \cos \frac{Ka}{2}$

ゾーンの端 $Ka = \pi$

定在波, 動かない

長波長の極限

$$Ka \ll 1 \quad 1 - \cos Ka \approx (Ka)^2 / 2$$

$$\omega \approx (C / M)^{1/2} Ka$$

低周波数では，音速は周波数によらない

2個の原子を含む格子

NaClやダイヤモンド構造

音響的分岐 (acoustic branch)

光学的分岐 (optical branch)

縦音響的LA, 縦光学的LO... 1つ

横音響的TA, 横光学的TO... 2つずつ

Geによるフォノンの分散関係

L 縦波 \longleftrightarrow
 T 横波 \updownarrow

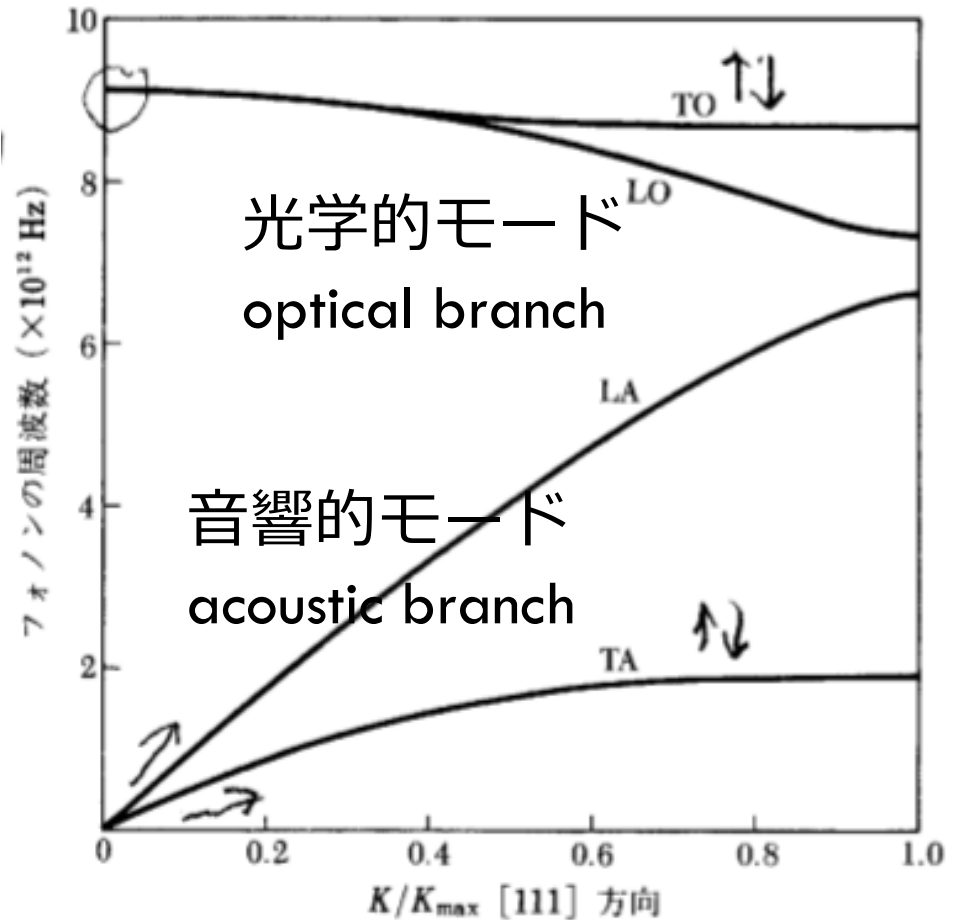


図 8a 80K のゲルマニウムの[111]方向のフォノンの分散関係. 2本の TA 分枝は $K_{max} = (2\pi/a) (\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2})$ であるゾーンの境界で水平となる. LO と TO 分枝は $K=0$ で一致し, このことは Ge の結晶対称性の結果である. これらの結果は G. Nilsson と G. Nelin の中性子の非弾性散乱の実験で得られた.

2種類の原子がある u, v は隣どうしに

$$M_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} = C(v_{n+1} + v_{n-1} - 2u_s)$$

$$M_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} = C(u_{n+1} + u_{n-1} - 2v_s)$$

$$u_s = u \exp(isKa - i\omega t), \quad v_s = v \exp(isKa - i\omega t)$$

$$-M_1 \omega^2 u = Cv(1 + \exp(-iKa)) - 2Cu$$

$$-M_2 \omega^2 v = Cu(1 + \exp(iKa)) - 2Cv$$

これの行列式=0を作る, 計算する

$$M_1 M_2 \omega^4 - 2C(M_1 + M_2) \omega^2 + 2C^2 (1 - \cos Ka) = 0$$

$Ka \ll 1$ のとき

$$\omega = \sqrt{2C} \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^{1/2}$$

光学的分岐

$$\omega = \left(\frac{C}{2(M_1 + M_2)} \right)^{1/2} Ka$$

音響的分岐

フォノンの量子化

角振動数 ω の弾性波モードのエネルギー

$$\varepsilon = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

運動エネルギーの時間平均

半分は運動エネルギー, 残りは
ポテンシャルエネルギー

$$\frac{1}{8} \rho V \omega^2 u_0^2 = \frac{1}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

フォノンの運動量

p.109

運動量 $\hbar\mathbf{K}$ を持っているように相互作用を行う

格子状態のフォノンは全体としては、運動量を運ばない！ 相対座標であるため。

絶対座標であれば、反跳がある。

結晶運動量

入射ベクトル

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}$$

逆格子ベクトル

散乱ベクトル

第5章 フォノンII: 熱的性質

フォノンの比熱

定積比熱

$$C_v = (\partial U / \partial T)_v$$

U エネルギー, T 温度

$$U_{tot} = \sum_{K,p} \langle n_{K,p} \rangle \hbar \omega_{K,p}$$

(1)

K 波動ベクトル

p 偏りの指標

プランクの分布関数

$$\langle n \rangle = \frac{1}{\exp(\hbar \omega / k_B T) - 1}$$

以下で証明する

プランク分布 熱平衡の調和振動子 基本!

$$N_{n+1} / N_n = \exp(-\hbar \omega / \tau) \quad \tau \equiv k_B T \quad (3)$$

n番目の量子状態と全体の割合は,

$$\frac{N_n}{\sum_{s=0}^{\infty} N_s} = \frac{\exp(-n\hbar\omega / \tau)}{\sum_{s=0}^{\infty} \exp(-s\hbar\omega / \tau)}$$

励起した振動子 量子数の平均 $\langle n \rangle$ をとる

$$\langle n \rangle = \frac{\sum_s s \exp(-s\hbar\omega / \tau)}{\sum_s \exp(-s\hbar\omega / \tau)} \quad \leftarrow s \text{個の自由度がある}$$

>> 計算する

$$\sum_{s=0}^{\infty} x^n = 1 + x + x^2 + \dots + x^n = S_n$$
$$xS_n = x + x^2 + \dots + x^{n+1}$$
$$S_n - xS_n = 1 - x^{n+1} \rightarrow S_n = \frac{1 - x^{n+1}}{1 - x}$$
$$\therefore |x| < 1 \rightarrow S_{\infty} = \frac{1}{1 - x}$$

$$\sum_{s=0}^{\infty} s x^s = x \frac{d}{dx} \sum_{s=0}^{\infty} x^s = \frac{x}{(1-x)^2} \quad \text{as } |x| < 1$$

よって、フォノンでは

$$\langle n \rangle = \frac{x}{1-x} = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/\tau) - 1} \quad (7)$$

規準モード

$$U = \sum_{K,p} \frac{\hbar\omega_{K,p}}{\exp(\hbar\omega_{K,p}/\tau) - 1}$$

積分で近似する

$$U = \sum_p \int \frac{\hbar\omega_{K,p}}{\exp(\hbar\omega_{K,p}/\tau) - 1} D_p(\omega) d\omega$$

$$C_{tot} = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_v = k_B \sum_p \int \frac{x^2 \exp(x)}{(\exp(x) - 1)^2} D_p(\omega) d\omega$$

$$x \equiv \hbar\omega / k_B T \quad (10)$$

微分について p.121

$$\frac{d}{dT} \frac{1}{\exp(\hbar\omega/\tau) - 1} = \frac{-1}{(\exp(\hbar\omega/\tau) - 1)^2} \frac{d}{dT} \exp(\hbar\omega/\tau)$$

$$= \frac{-\exp(\hbar\omega/\tau)}{(\exp(\hbar\omega/\tau) - 1)^2} \frac{d}{dT} \frac{\hbar\omega}{k_B T}$$

$$= \frac{\exp(\hbar\omega/\tau)}{(\exp(\hbar\omega/\tau) - 1)^2} \frac{\hbar\omega}{k_B T^2}$$

$$C_v = \frac{3V\hbar}{2\pi^2 v^3} \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{\exp(\hbar\omega/\tau)}{(\exp(\hbar\omega/\tau) - 1)^2} \frac{\hbar\omega}{k_B T^2} \omega^3$$

$$= \frac{3V\hbar^2}{2\pi^2 k_B v^3 T^2} \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{\omega^4 \exp(\hbar\omega/\tau)}{(\exp(\hbar\omega/\tau) - 1)^2}$$

デバイの T^3 則

低温において ∞ とできる

$$\begin{aligned} U &\rightarrow \int_0^{\infty} \frac{x^3}{\exp(x)-1} dx = \int_0^{\infty} x^3 \sum_{s=1}^{\infty} \exp(-sx) dx \\ &= 6 \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s^4} = \frac{\pi^4}{15} \end{aligned}$$

$$T \ll \theta \quad \rightarrow \quad U \approx 3\pi^4 Nk_B T^4 / 5\theta^3$$

$$C_v \approx \frac{12\pi^4}{5} Nk_B \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \propto T^3$$

Si, Geで, T^3 が良いのは, $T < 50 \text{ K}$ のとき
重い原子 θ の値が小さい

理由：音響モードが低い温度でよい -> 表1

Li 344 K Na 158 K K 91 K Rb 56 K

デバイ近似による固体の比熱 C_V

比例関係 T^3 になるのは
 $T < 0.1 \theta$ のみ

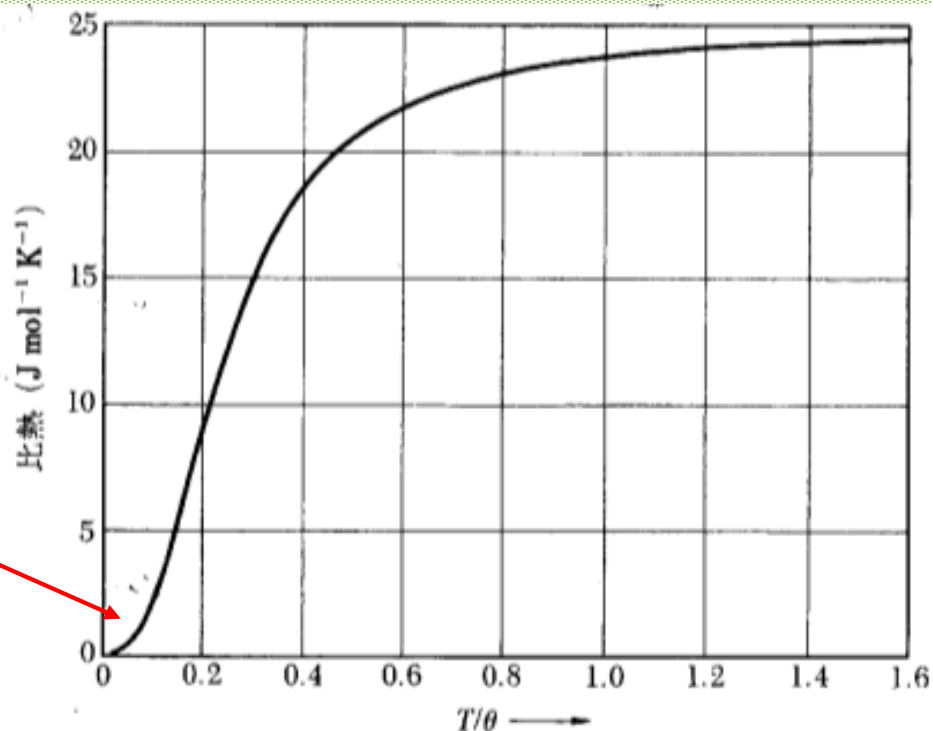


図 7 デバイ近似による固体の比熱 C_V . 縦軸の単位は $J mol^{-1} K^{-1}$, 横軸の単位はデバイ温度 θ で規格化された温度. T^3 法則の区域は 0.1θ 以下である. T/θ の高い値での漸近値は $24.943 J mol^{-1} deg^{-1}$ である.