

卒業論文

Phonon 分散曲線の 視覚化の基礎

関西学院大学 理工学部 情報科学科
6690 後藤 緑

2010年 3月

指導教員 西谷 滋人 教授

概要

材料設計の分野において、結晶多形の安定性の検討は非常に重要な事柄である。相安定性を計算するためには熱振動効果における Phonon 分散曲線が重要である。熱における原子の振動は、ばねモデルが当てはまり、その振動の様子は波と見なすことができる。本研究ではその波の曲線を理解するために、高校生が見ても分かりやすいように、高校物理の基本から順を追って Phonon 分散曲線を視覚化していくことにする。

Phonon 分散曲線の視覚化をする際に、最も単純な振動として、2つの原子の運動をバネでつながっているように考えた、ばねモデルを用意する。次に、2原子分子の連成振動のシミュレーションから、原子の振動の軌跡を視覚化する。そのシミュレーションには、数値計算ソフトである Maple を使用した。2原子分子の振動では、原子の運動を追跡する方法として、原子間に働く力をもとに原子を逐次的に移動させる Verlet 法を用いた。

まず、固体中の結晶を考える際に、原子の振動の様子は、ニュートンの運動方程式から解を得ることができる。そこから単振動で表される基準振動を得る。2原子分子の連成振動からはじめ、3原子、 N 原子と運動方程式を当てはめ、波の視覚化を行う。また、Phonon 分散曲線を理解するためには、分散関係を知る必要がある。

原子を増やし、 N 原子分子に関して運動方程式を立てると、角振動数 ω と波数 k に関する式が求まる。これを分散関係と言う。ここで、 N 原子分子を鎖と見なした。さらに、鎖の一つ一つの間隔を限りなく0に近づけていくと、原子は埋め尽くされ、弦と見なすことができる。この鎖と弦の違いから分散関係を導いた。

結果、鎖の部分で、波長が限りなく長いところ、つまり長波長極限では、弦に近似されることが分かった。鎖の分散関係のグラフを作成すると、カーブを描くが、弦の分散関係のグラフは、比例関係を表す原点を通る直線を描いた。要するに、鎖には分散関係があるが、弦にはないということがグラフから読み取れる。このことから、1原子種の分散関係だけでなく、2原子種の分散関係では、光学振動が自然に導かれることが分かった。これら理想化した一次元のモデルから、現実結晶の Phonon 分散曲線の各要素、つまり波数・振動数、音響振動、光学振動、ゾーン境界の意味が視覚化されることを期待する。

目次

| | | |
|-------|------------------------------|----|
| 第1章 | 序論 | 2 |
| 1.1 | 背景と目的 | 2 |
| 1.2 | 実空間 | 3 |
| 1.3 | 逆格子空間 | 4 |
| 1.4 | Phonon 分散曲線 | 5 |
| 第2章 | 計算原理とツール | 7 |
| 2.1 | Maple | 7 |
| 2.2 | オイラーの公式 | 7 |
| 2.3 | Verlet 法 | 9 |
| 2.4 | ばねモデル | 10 |
| 2.4.1 | レナード-ジョーンズポテンシャル | 12 |
| 2.4.2 | 一次元調和振動子 | 13 |
| 2.4.3 | 連成振動 | 13 |
| 2.5 | 運動方程式 | 14 |
| 2.6 | フックの法則 | 14 |
| 第3章 | 2原子分子の連成振動から Phonon 分散曲線の視覚化 | 15 |
| 3.1 | 1原子規則格子 | 15 |
| 3.1.1 | Maple によるプログラムの作成 | 15 |
| 3.1.2 | 2原子分子 | 18 |
| 3.1.3 | 3原子分子 | 21 |
| 3.1.4 | N原子分子 | 22 |
| 3.1.5 | 鎖と弦 | 23 |
| 3.1.6 | 分散関係 | 25 |
| 3.2 | 2原子規則格子 | 27 |
| 3.2.1 | 光学的振動と音響的振動 | 29 |
| 3.2.2 | Phonon 分散曲線上での波 | 31 |
| 第4章 | 総括 | 34 |
| 4.1 | 結論 | 34 |
| 4.2 | 考察 | 36 |

第1章 序論

1.1 背景と目的

西谷研究室で行われている材料の第一原理計算は，量子力学を理解する必要がある．量子現象は，日常の直感が働きやすい粒子の運動よりも，波の運動に近いとされる．しかし，私たちが波を学習した際に出てくる数式の羅列を，目で追っただけでは，簡単に理解することは困難である．よって波を視覚化することによって，イメージを持ち，学習する多くの者にとって分かりやすくなるのではないかと考える．そこで，量子現象の一種でもある Phonon 分散曲線を対象とした．材料設計の分野において，様々な結晶多形における相安定性を考慮することは，非常に重要である．その相安定性を議論するためには，Phonon 分散曲線が鍵となる．

本研究では Phonon 分散曲線を直感的に理解するために原子の振動の土台となる実空間での連成振動から順を追って，視覚化していく．その流れを以下のフローチャート (図 1.1) に示す．

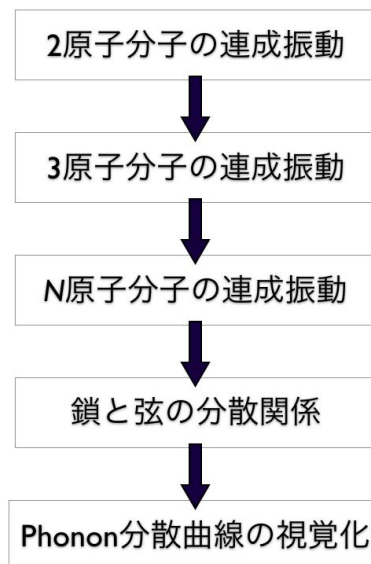


図 1.1: フローチャート

1.2 実空間

Phonon 分散曲線を理解するためには，実空間と逆格子空間の関係を前知識として知る必要がある．ここでは，実空間について説明する．実空間における物理現象の波を表す図 1.2 では，ある時刻における波の形を表しており，横軸が時間に対し，縦軸は原子の運動の基準からの変位を表している．以下が，図 1.2 に対応する高校物理で習う一般的な波の式である [1] ．

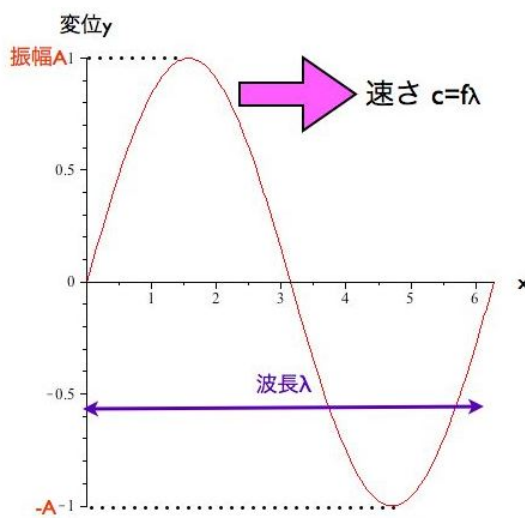


図 1.2: 実空間における 1 次元の正弦波

$$y = A \sin \left\{ 2\pi \left(ft - \frac{x}{\lambda} \right) \right\} \quad (1.1)$$

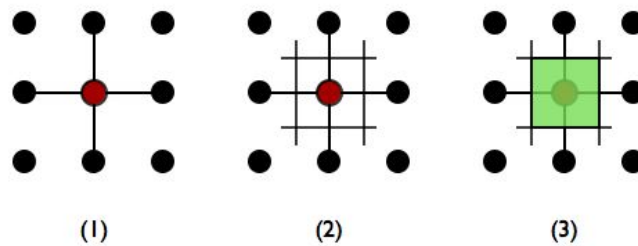
ここで， y ; 変位， A ; 振幅， f ; 振動数， t ; 時間， x ; x 軸上でのある点 x の位置， λ ; 波長と表す．そこで，等速円運動の基礎公式である， $\omega = 2\pi f$ を用いる (ω は角振動数)．最も基本的な正弦波 ($y = \sin \theta$) における 1 波長の長さは 2π である (波数は 1 である)．したがって，1 波長の長さが λ である波の波数を k とすると， $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ と書けるので，この 2 式を式 (1.1) に代入すると，

$$y = A \cos(\omega t - kx) \quad (1.2)$$

となる． y は位置 x と時間 t の関数である．一般的に，位置は位置ベクトルで表されるが，三角関数の中身はベクトルで表示できない．よって，方向を持たない量を持つスカラーに直す必要があり，位置ベクトルと別のベクトルを掛け合わせると，内積を作ることができる．つまり，式の中の波数は，波が進む向きを向いたベクトルを表すので，波数ベクトルとし，位置ベクトルと波数ベクトルの内積で波の式が立てられることになる．

1.3 逆格子空間

逆格子とは、実在の結晶において定義される面を逆空間における格子点として扱う概念である。逆格子空間を二次元の座上軸で表すと、横軸がブリルアンゾーンにおける座標に対し、縦軸はその座標に対する運動量の周波数を表している。ブリルアンゾーンは実格子空間におけるウィグナーザイツセルと同様に導くことができる。格子点と格子点を結ぶ線分の垂直二等分線で囲まれた領域における最小のセルのことをウィグナーザイツセルという。具体的な例として正方格子を図 1.3 にこのウィグナーザイツセルの求め方を記した。面心立方格子 (fcc) 構造と体心立方格子 (bcc) 構造のブリルアンゾーンを図 1.4 に示す。



- (1) 中央の格子に注目し、隣り合う格子をそれぞれ直線で結ぶ。
- (2) 各直線の垂直二等分線を引く。
- (3) 垂直二等分線で囲まれた範囲がウィグナーザイツセルである。

図 1.3: ウィグナーザイツセル

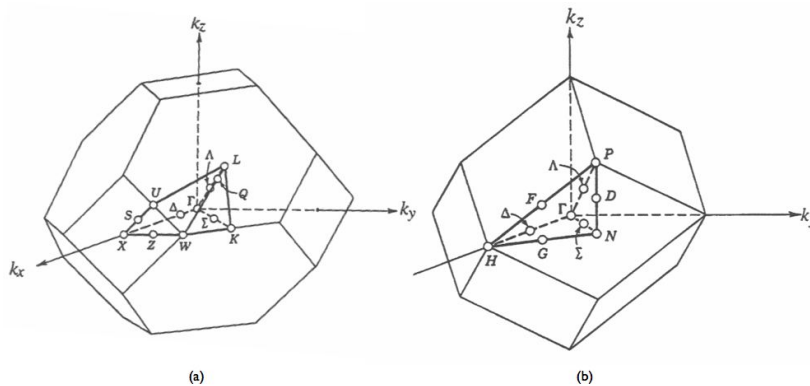


図 1.4: ブリルアンゾーン (a) fcc 構造 (b) bcc 構造

1.4 Phonon 分散曲線

Phonon とは、振動を量子化したものであり、結晶中での格子振動を表す。図 1.5 に Phonon 分散曲線を示した。これは 3C-SiC の結晶の格子モデルの分散曲線を表している。

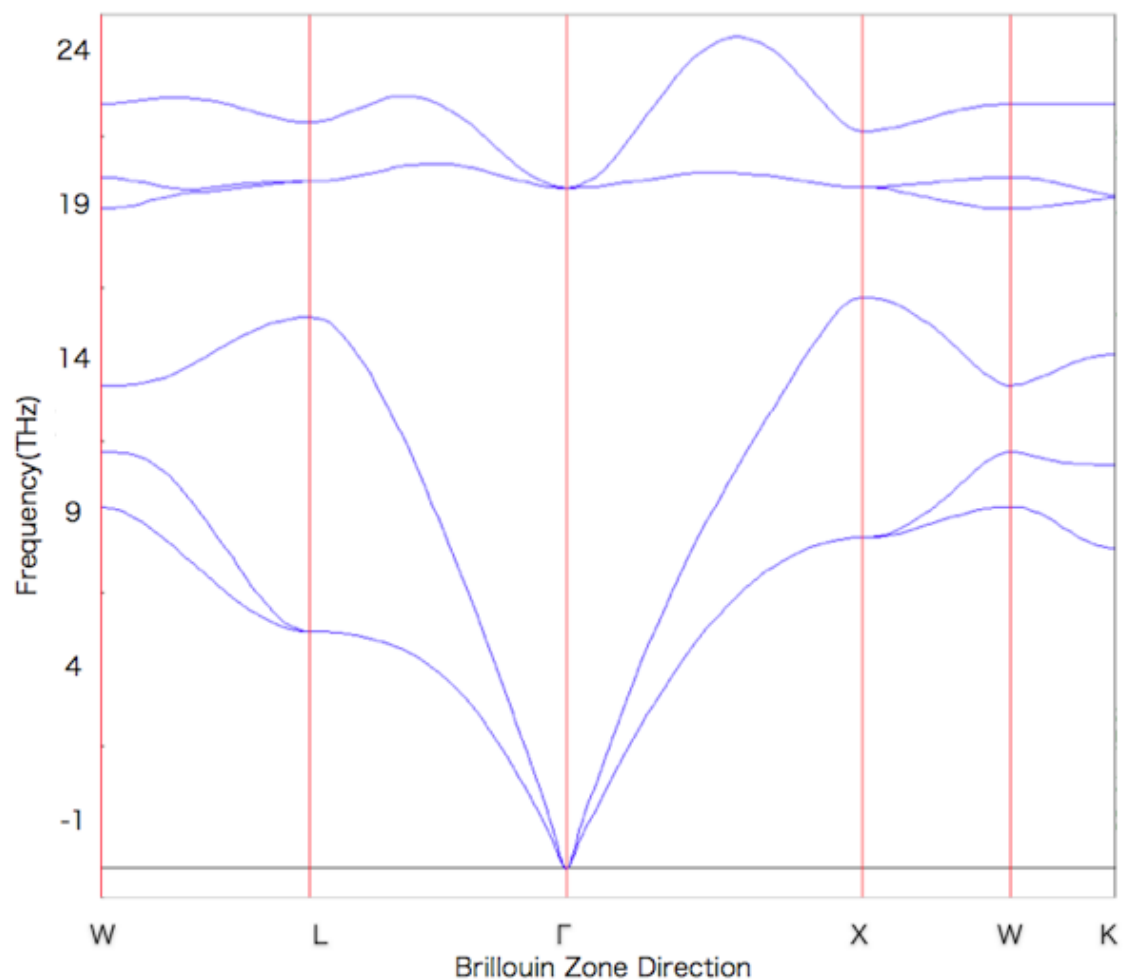


図 1.5: 3C-SiC の Phonon 分散曲線 [修士論文] .

この図は、逆格子空間においてプロットされている。Phonon 分散曲線の横軸は、図 1.6 のようにブリルアンゾーンの対称点の記号と対応している。つまり、実空間における結晶の周期性を、逆格子空間に変換し、Phonon 分散曲線を描くために必要な知識となる。

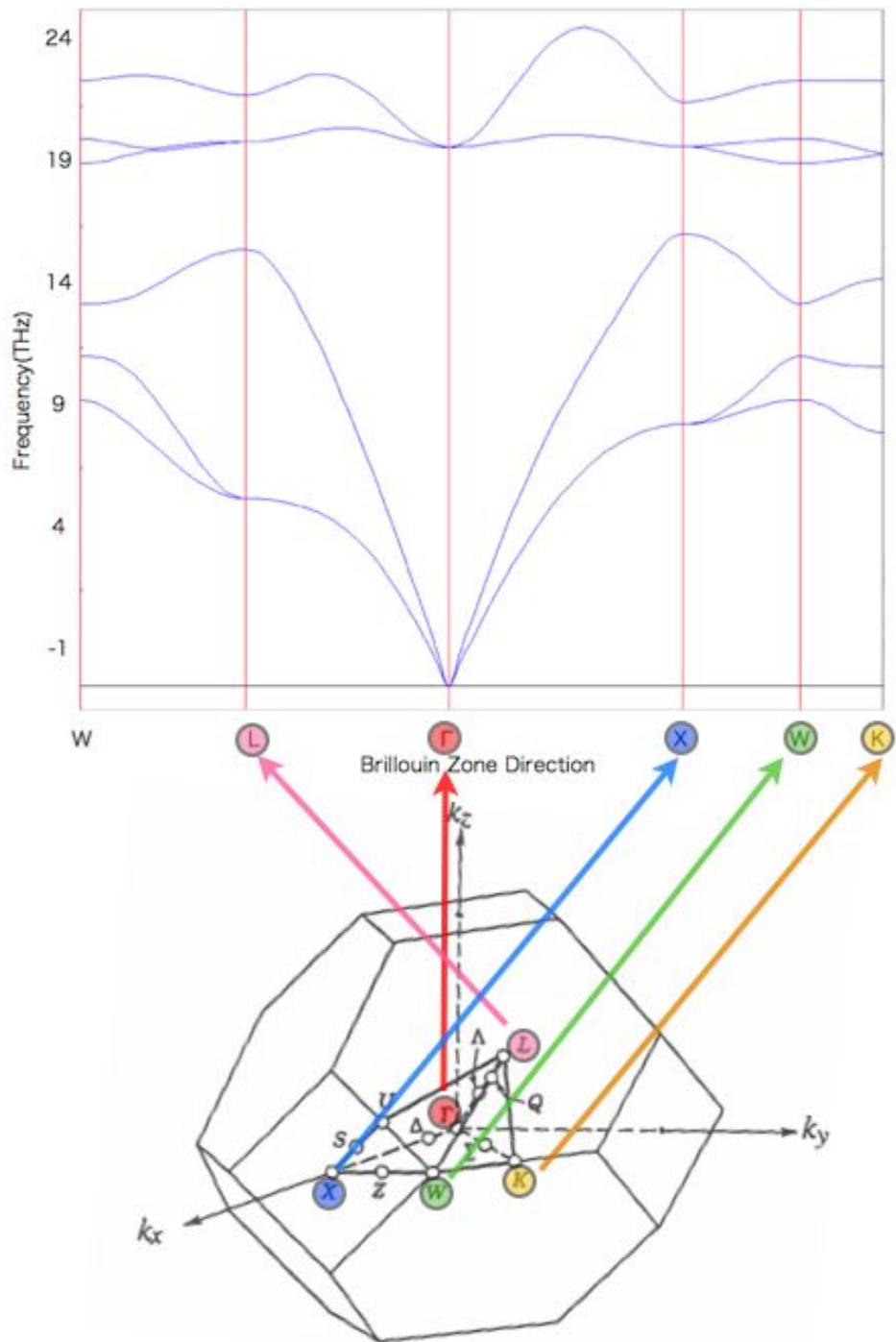


図 1.6: Phonon 分散曲線の横軸とブリルアンゾーンの対称点

第2章 計算原理とツール

2.1 Maple

Maple は数式処理や数値計算，グラフ作成などを行う数値計算ソフトの一つである．時間がかかる計算もこれを用いれば，すぐに答えを導くことができる．例えば，高校数学で習う微分積分の授業で，生徒側は，教科書の内容を黒板やホワイトボードを使って教えられる．そして，問題演習として計算を解くことになるが，紙と鉛筆を用いた手計算では，時間に限りがあり，問題によれば膨大な時間を要する．しかし，Maple を利用すれば，パソコン上で微分積分のコマンドと，解きたい式を入力すれば，簡単に計算結果が出力され，グラフ描画も容易に行える．このことは，本研究における様々な計算を手助けしてくれるものとなった．

2.2 オイラーの公式

ここでは，厳密的に証明を行い，オイラーの公式を導出するのではなく，波動の概念から説明する．1.2 節で，1次元の正弦波の式があったが，これは三角関数で表されている式である．この三角関数の式から指数関数 e の式へ変換する．そこで考えるのが，複素平面である．まず，複素平面の座標は，横軸が実数，縦軸が虚数 i を取る．次に1つの複素数 C を，原点を支点とする1本のベクトルとして表すと図 2.1 となり，横軸成分を a ，縦軸成分を b を用いると，

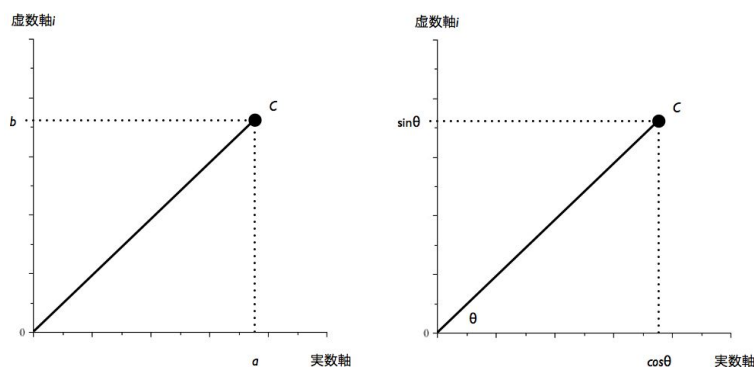


図 2.1: 複素数平面

$$C = a + ib \quad (2.1)$$

と表すことができる．さらに，複素数のある点を $e^{i\theta}$ とおき，三角関数の座標表現で，横軸とのなす角を θ とおき，長さが1のベクトルとして考えると，ベクトル C は，

$$C = \cos \theta + i \sin \theta \quad (2.2)$$

と書ける．また，複素ベクトルの長さを C の長さを r ，横軸とのなす角を α とすると， C は $e^{i\alpha}$ を用いて， $C = r e^{i\alpha}$ と変形することができる．つまり，

$$\begin{aligned} e^{i\theta} \cdot C &= e^{i\theta} \cdot r e^{i\alpha} = r e^{i\theta} e^{i\alpha} \\ &= r e^{i(\theta+\alpha)} \end{aligned}$$

となる．このベクトルは，長さが r で，横軸とのなす角が $\theta + \alpha$ であるので，結局は，

$$e^{i\theta} \cdot C$$

となる．要するに，長さは同じだが，ベクトル C から，さらに角度を θ 回転したベクトルとなり，図 2.2 にそれを表す．結果的に， $e^{i\theta}$ を掛けると， θ 回転する操作になるということである．

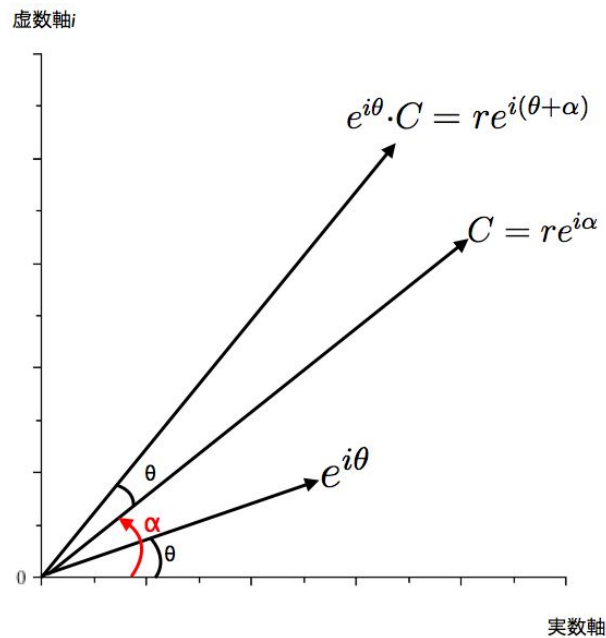


図 2.2: θ 回転したときのベクトル

以上のことをふまえると，

$$e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta \quad (2.3)$$

と書け，これをオイラーの公式と言う．これは，以後本研究の物理計算の式変形に使用する．

2.3 Verlet 法

Verlet 法 (ヴェルレ法) とは，分子動力学法の方法の一つである．分子動力学法とは，原子を準備し，1つ1つの原子に対して，ニュートンの運動方程式を適用する．それを順次数値的に解くことによって，すべての原子の動きを追跡する手法であり，Verlet 法では，原子と原子に働く力をもとに原子を逐次的に動かす方法である．実際の計算方法を以下に示す．

Verlet 法の計算では，テイラー展開を使う．

x=a におけるテイラー展開

$$f(x) = f(a) + \frac{f'(a)}{1!}(x-a) + \frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x-a)^n + \dots \quad (2.4)$$

まず，直接原子の位置の時間発展を求める差分方程式を作る．原子の位置を r_i ，時間を t ，微小時間を h とし，時刻 $(t+h)$ と時刻 $(t-h)$ における原子の位置 $r_i(t \pm h)$ をテイラー展開すると，

$$r_i(t+h) = r_i(t) + h \frac{dr_i(t)}{dt} + \frac{1}{2!} h^2 \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} + \frac{1}{3!} h^3 \frac{d^3 r_i(t)}{dt^3} + \dots \quad (2.5)$$

$$r_i(t-h) = r_i(t) - h \frac{dr_i(t)}{dt} + \frac{1}{2!} h^2 \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} - \frac{1}{3!} h^3 \frac{d^3 r_i(t)}{dt^3} + \dots \quad (2.6)$$

を得る．テイラー展開の h の2次以上の項は無視し，式 (2.5) と式 (2.6) の和をとると，

$$r_i(t+h) + r_i(t-h) = 2r_i(t) + h^2 \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} \quad (2.7)$$

となる．これに，原子 i に働く力を f_i ，原子の質量を m とし，ニュートンの運動方程式， $f_i = m_i \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2}$ を合わせると，

$$r_i(t+h) = 2r_i(t) - r_i(t-h) + \frac{f_i h^2}{m_i} \quad (2.8)$$

と作られ，これは時刻 $t+h$ における位置を表している．この代数方程式にしたがって原子の運動を追跡する．式 (2.8) を見ると，原子の新しい位置を求めるには，時間的に一つ前の原子の位置と，二つ前の原子の位置を知る必要がある．しかし，これでは，原子の初期配置をしても，次の原子の位置が求められないので，もう一つの代数方程式を求める必要がある．よって，式 (2.5) と式 (2.6) の差，

$$r_i(t+h) - r_i(t-h) = 2h \frac{dr_i(t)}{dt} \quad (2.9)$$

を取る．ここで，位置を微分すると速度ベクトル v_i が求められるので， $\frac{dr_i(t)}{dt} = v_i$ を用いると，

$$v_i = \frac{r_i(t+h) - r_i(t-h)}{2h} \quad (2.10)$$

と書ける．これによって時刻 t における速度が分かる．さらに，これをはじめの代数方程式 (2.8) に代入すると，

$$r_i(t+h) = r_i(t) + hv_i + \frac{\hbar^2}{2m_i} f_i(t) \quad (2.11)$$

を得る．この式では，新しく原子の位置を求める際に，時間的に一つ前の原子の座標から分かる．したがって，式 (2.11) を使うと，初期配置をしてから次の原子の位置を求めることができる [3]．

2.4 ばねモデル

ばねモデルの説明の前に，原子の周りに存在する電子におけるポテンシャルについて言及する．高校物理や化学で，原子の周りには電子が飛び回っているというモデルを学習した．また，窒素原子が2個集まると，外側の電子が軌道を共有して共有結合をつくることも既習内容である．このような電子の振る舞いを記述するのが，量子力学で，これを支配する方程式がシュレディンガー方程式である．このシュレディンガー方程式を精確に解き，原子の種類だけから電子構造を求め，いろいろな物性を予測する計算を第一原理計算という．西谷研究室では，物性計算を第一原理計算を用いて行っている．

シュレディンガー方程式は，以下の式で書かれている．

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (2.12)$$

ここで， m は質量， E はエネルギー準位， $V(x)$ は座標 x において量子が感じるポテンシャルエネルギー， \hbar は $h/2\pi$ (h : Planck 定数)， $\psi(x)$ は波動関数である．波動関数 $\psi(x)$ は波動関数の2乗が粒子の存在確率を与える．ポテンシャルエネルギーと波動関数が分かれば，シュレディンガー方程式の解が解け，何を意味しているのかが分かる．ここでは，ポテンシャルの理解のため，実際に解は求めない．

ここでポテンシャルの意味を理解するために，量子力学の初歩で扱う例として井戸型ポテンシャルを挙げる．図 2.3 に井戸型ポテンシャルと波動関数，波動関数の2乗を模式的に示した．(a) のような井戸型ポテンシャルに閉じ込められた電子を考える際に，無限の高さを持った壁において，ポテンシャルは井戸の中では， $V(x) = 0$ となり，その他の領域では， $V(x) = \infty$ で与えられる．一般的に，古典的な系は，任意のエネルギーをとることができるが，量子的な系は，ある決まったとびとびのエネルギーしかとることができない．これを系のエネルギー準位と

いう．図 2.3(b)(c) には，波動関数 $\psi(x)$ と波動関数の 2 乗 $|\psi(x)|^2$ を，それぞれのエネルギー準位に対応した高さに示した．

次にばねモデルの説明をする．図 2.4(a) の上段は，A，B 原子のまわりにある球対称のポテンシャルによって引きつけられた電子の軌道 (ψ_A, ψ_B) を示す．この 2 原子同士を近づけてくると電子の波動関数は重なり合い，新たな軌道 ((a) の下段) を作る．原子が無限に離れている状態と結合した状態のエネルギー差を結合エネルギーと言う．このエネルギーの変化を模式図に記したのが図 2.4(b) である．2 原子が十分離れた距離でのエネルギーを基準として 0 とし，2 原子を近づけてくると，結合順位の低下にともなってある距離までエネルギーは下がってくる．近づきすぎると電子同士が重なり，反発する力が強くなる．するとエネルギーは急激に上昇する．最もよく相互作用する距離であり，エネルギーが最も低い距離を平衡原子間距離，そのエネルギー値を凝集エネルギーと呼ぶ．このような事実から，最も単純な固体のモデルとしてばねモデル (図 2.5) が得られる [6] ．

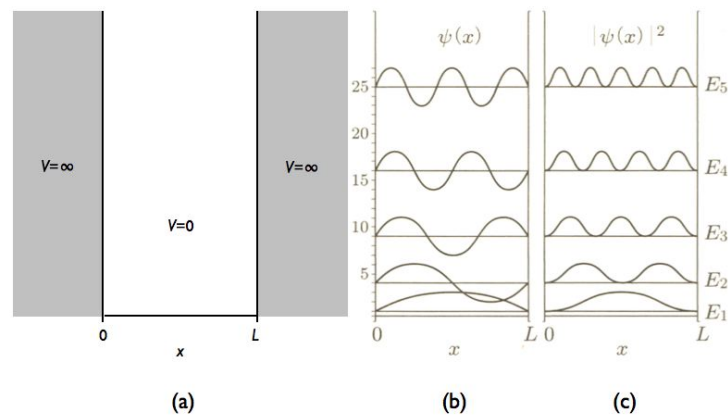


図 2.3: (a) 井戸型ポテンシャル $V(x)$ (b) 波動関数 $\psi(x)$ (c) 波動関数の 2 乗 $|\psi(x)|^2$

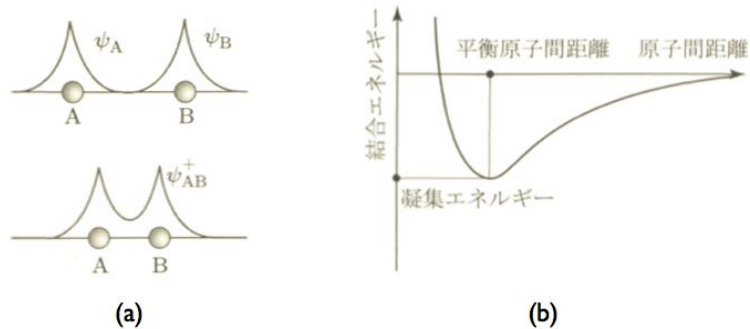


図 2.4: 2 原子分子の (a) 波動関数 (b) 相互作用エネルギーの距離依存性

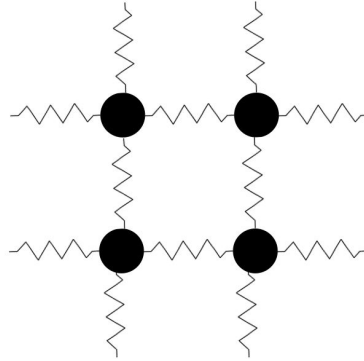


図 2.5: 固体の原子のばねモデル

2.4.1 レナード-ジョーンズポテンシャル

レナード-ジョーンズポテンシャルとは、2つの原子間の相互作用ポテンシャルエネルギーを表す経験的なモデルの一つであり、一般系は次の式で表される。また図 2.6 にレナード-ジョーンズポテンシャルを示す。

$$u(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^p - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^q \right] \quad (2.13)$$

ここで、縦軸 u はポテンシャルエネルギー、横軸 r は原子間距離を表している。レナード-ジョーンズポテンシャルは長さ ϵ とエネルギー σ という2つのパラメータを持っている。これと、次数 p, q を定めることによって、レナード-ジョーンズポテンシャルが求まり、ここでは、 $p = 12, q = 6$ とすると、

$$u(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (2.14)$$

とおける。パラメータ ϵ は、 $u(r)$ の極小点でのポテンシャルの深さである。極小は、 $r = 2^{1/6}\sigma$ のところに生じる。ポテンシャルに生じる力はポテンシャルを微分することで得られる。

$$F(r) = -\frac{d}{dr}u(r) = 4\epsilon \left(12\frac{\sigma^{12}}{r^{13}} - 6\frac{\sigma^6}{r^7} \right) \quad (2.15)$$

なお、Verlet 法で用いる原子間に働く力は、レナード-ジョーンズポテンシャルにより算出する [3][7]。

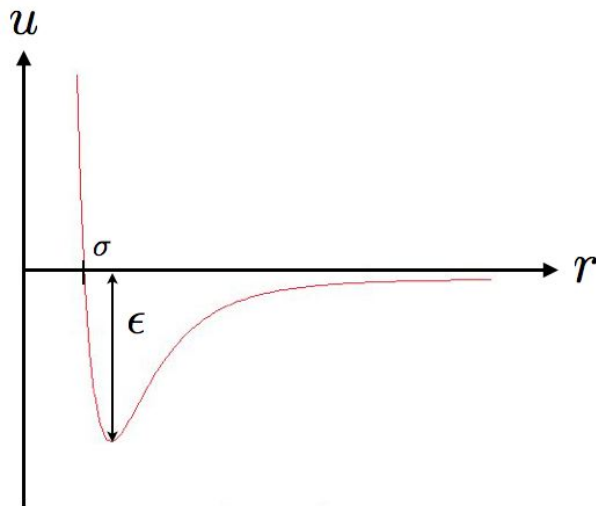


図 2.6: レナード-ジョーンズポテンシャル .

2.4.2 一次元調和振動子

一次元調和振動子とは，ばねモデルを用いた物体の振動のことであり，例として水平バネ振り子 (図 2.7) を挙げる．力の大きさは，フックの法則で用いる力と同様だが，力は常に振動の中心の 0 の向きに働き，その大きさは中心からのずれに比例した復元力が働く．運動によって一次元，二次元，三次元調和振動子がある．

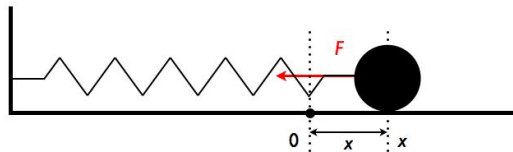


図 2.7: 一次元調和振動子

2.4.3 連成振動

2.4.2 節の一次元調和振動子において，2つ以上の振動系が互いに力を及ぼし合っ
て運動することを連成振動と言う．その最も単純な振動として，2つの原子の運動
をバネでつながっているように考えた連成振動のばねモデル (図 2.8) を用意する．
このばねモデルをもとに，今後，多原子分子の連成振動を作成する．



図 2.8: 連成振動のばねモデル

2.5 運動方程式

物体に力を作用すると、力の方向に順方向の加速度が生じる。質量 1kg の物体に 1m/s^2 の大きさの加速度を生じさせるときの力の大きさを 1N とし、力を F 、質量を m 、加速度を a として、次のように表す。

$$F = ma \quad (2.16)$$

今回は、原子の動きを簡単なばねモデルで表した際に用いた。今後原子の振動の様子は、この基本方程式であるニュートンの運動方程式を用いて考える。

2.6 フックの法則

今回は、ばねモデルに用いて、原子に働く力とバネの弾性力のつり合いを利用する。バネの弾性力の大きさは、バネの伸びまたは縮みに比例し、このことをフックの法則 (図 2.9, 図 2.10) という。

$$F = -Cu \quad (2.17)$$

ただし、バネの弾性力の大きさを $F[\text{N}]$ 、バネの自然長からの伸びまたは、平衡位置の点からの変位を $u[\text{m}]$ 、バネ定数は $C[\text{N/m}]$ とおく。

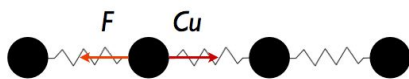


図 2.9: フックの法則

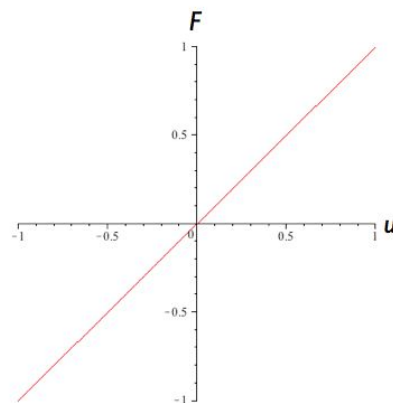


図 2.10: フックの法則の $F-u$ のグラフ

第3章 2原子分子の連成振動から Phonon 分散曲線の視覚化

3.1 1原子規則格子

原子が規則的に配列しているものを規則格子と呼ぶ．ここでは一次元で原子の振動の様子を見ていく．

3.1.1 Maple によるプログラムの作成

実空間による原子の振動のシミュレーションはすべて Verlet 法で Maple を用いて行った．今回は2原子分子のシミュレーションを例としてそのスクリプトを以下に示す．

```
>restart;
>with(plots):
>with(plottools):

>nmax:=300:
>with(plots):
>Fmax:=100:
>speed:=proc() evalf(1*rand()/(10^12-1)); >end proc;

>init:=[[1, [2,0], [speed(),speed()],[2,3]], [2, [3,0], [speed(),speed()],[1,4]], [3, [1,0]], [4, [4,0]]]:
>init;

[[1, [2, 0], [0.3957188605, 0.1931398164], [2, 3]], [2, [3, 0],
 [0.02242417046, 0.8001874845], [1, 4]], [3, [1, 0]], [4, [4, 0]]]

>tmp:=[]:
>for i from 1 to 4 do
  tmp:=[op(tmp), [init[i][2][1], init[i][2][2]]];
```

```

    x[i]:=init[i][2][1];
    y[i]:=init[i][2][2];
>od:
>for i from 1 to 2 do
    vx[i]:=init[i][3][1];
    vy[i]:=init[i][3][2];
    ax[i]:=0;
    ay[i]:=0;
>od:
>pointplot({op(tmp)},symbol=circle,symbolsize=30,color=blue);

>force:=proc(dx,dy)
>global Fmax;
local x0,r2,rm2,rm6,KK,fxij,fyij;
>x0 := -1.122462048;
>r2:=dx*dx+dy*dy;
>rm2:=1/r2/(x0*x0);
>rm6:=rm2*rm2*rm2;
>KK:=24*rm6*(2*rm6-1)*rm2;
>fxij:=KK*dx;
>fyij:=KK*dy;
>[Fmax*fxij,Fmax*fyij];
>end:
>Force:=proc()
>local i,j,dx,dy,tmp,jj;
>global x,y,ax,ay;
>for i from 1 to 2 do
    ax[i]:=0;
    ay[i]:=0;
>od;
>for i from 1 to 2 do
    for j from 1 to 2 do
        jj:=init[i][4][j];
        dx:=x[i]-x[jj];
        dy:=y[i]-y[jj];
        tmp:=force(dx,dy);
        ax[i]:=ax[i]+tmp[1];
        ay[i]:=ay[i]+tmp[2];
    od;

```

```

>od;

>end:
>Verlet:=proc()
>local ke,i;
>global x,y,ax,ay,vx,vy,dt,dt2,yy1,yy2;
>for i from 1 to 2 do
  x[i]:=x[i]+vx[i]*dt+0.5*ax[i]*dt2;
  y[i]:=y[i]+vy[i]*dt+0.5*ay[i]*dt2;
  vx[i]:=vx[i]+0.5*ax[i]*dt;
  vy[i]:=vy[i]+0.5*ay[i]*dt;
>od;
>yy1:=[op(yy1),y[1]];
>yy2:=[op(yy2),y[2]];
>Force();
>for i from 1 to 2 do
  vx[i]:=vx[i]+0.5*ax[i]*dt;
  vy[i]:=vy[i]+0.5*ay[i]*dt;
>od;
>end:
>show_conf:=proc(x,y)
>local tmp,i;
>tmp=[];
>for i from 1 to 4 do
  tmp:=[op(tmp),[x[i],y[i]]];
>od;
>pointplot({op(tmp)},axes=BOXED,symbol=circle,symbolsize=30,color=blue);
>end proc;
>dt:=0.01;
>dt2:=evalf(dt^2);
>tmp1=[];
>yy1=[];
>yy2=[];
>for i from 1 to nmax do
>for j from 1 to 2 do
  Verlet();
>end do;
>tmp1:=[op(tmp1),show_conf(x,y)];
>end do:

```

このシミュレーションを行った結果を図 3.1 に示した .

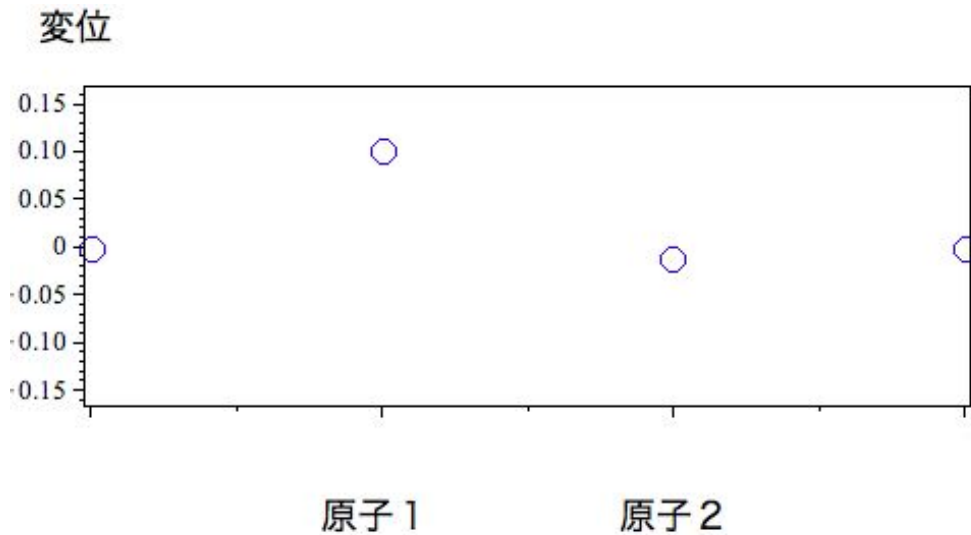


図 3.1: 連成振動のシミュレーション .

3.1.2 2 原子分子

まず , 両端を固定した 2 原子分子のばねモデル図 3.2 を用意する .

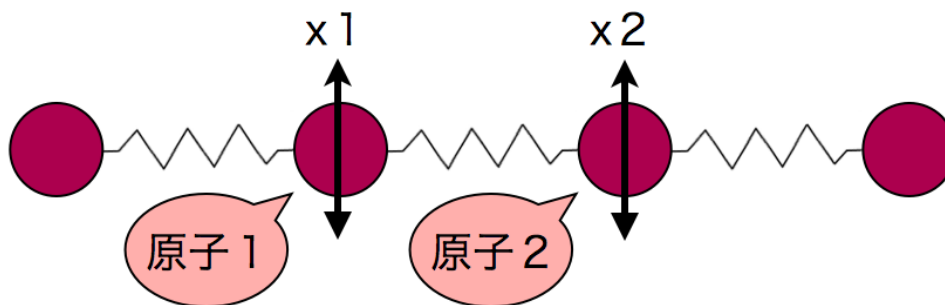


図 3.2: 2 原子分の連成振動

次に , 真ん中の 2 つの原子に対して Verlet 法を用いて動かす . そして , その 2 つの原子の動きがどういった変化をしているかを Maple を用いてシミュレーションを行い , 縦軸を基準点からの変位 , 横軸を時間とし , 時間が変化すると変位はどのように変化するかを原子 1 , 原子 2 を共にグラフ図 3.3 に表した .

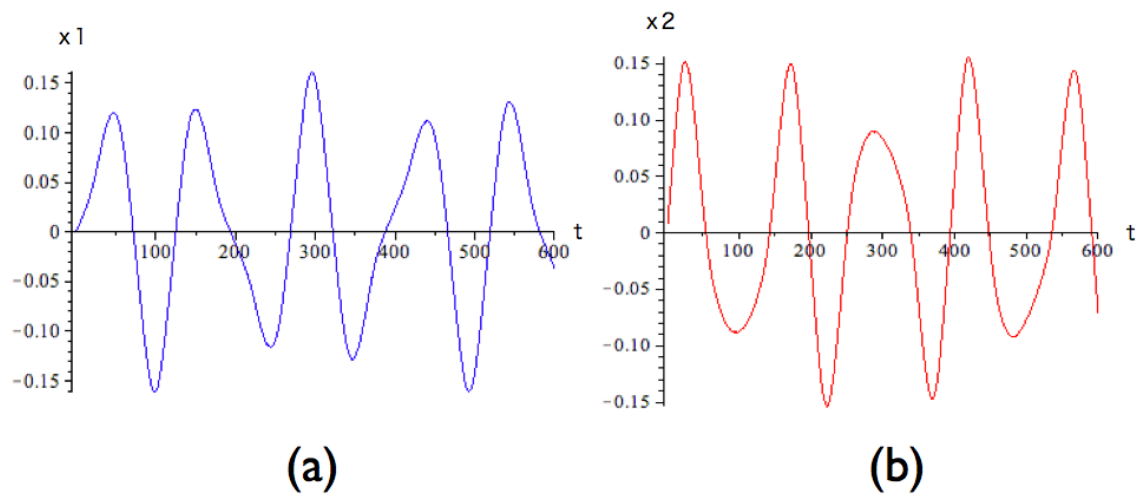


図 3.3: 2 原子分子の振動の時間経過 . (a) 時間毎の x_1 の変位 (b) 時間毎の x_2 の変位

さらに、よりグラフを分かりやすく描くために、この2つの解について調べると、それぞれ下の図 3.4 のようなバネの動きをすることが分かる。この2つの解はそれぞれ独立していて、これらの重ね合わせ（和、差）を行うと、1つの単振動と見なすことができる。それをグラフ化したものが図 3.5 であり、単原子分子の振動と見なせることから、これを基準振動という。

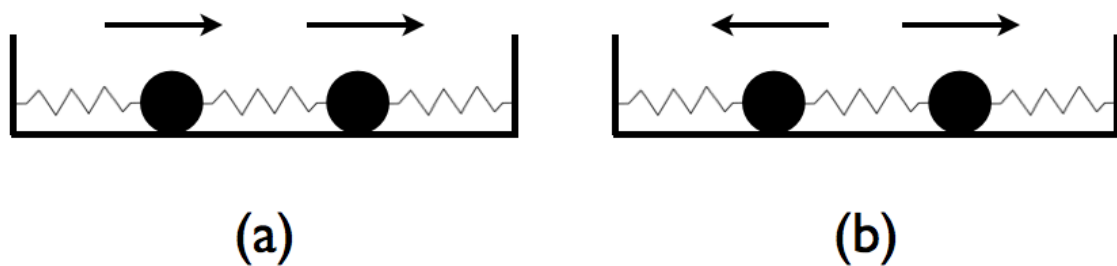


図 3.4: 基準振動 . (a) (b)

ここで、座標軸の x 軸を x_1 , y 軸を x_2 として、時間の変化と共に点の軌跡を取る。また、基準振動を表すように、普通の座標を変換する。 $Q_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}x_1 + \frac{1}{\sqrt{2}}x_2$, $Q_2 = -\frac{1}{\sqrt{2}}x_1 + \frac{1}{\sqrt{2}}x_2$ とおくと、それぞれ図 3.6 が得られる。ここで Q_1 , Q_2 で表された座標のことを基準座標と呼ぶ。この軌跡は、ランダムに動いていた点がき

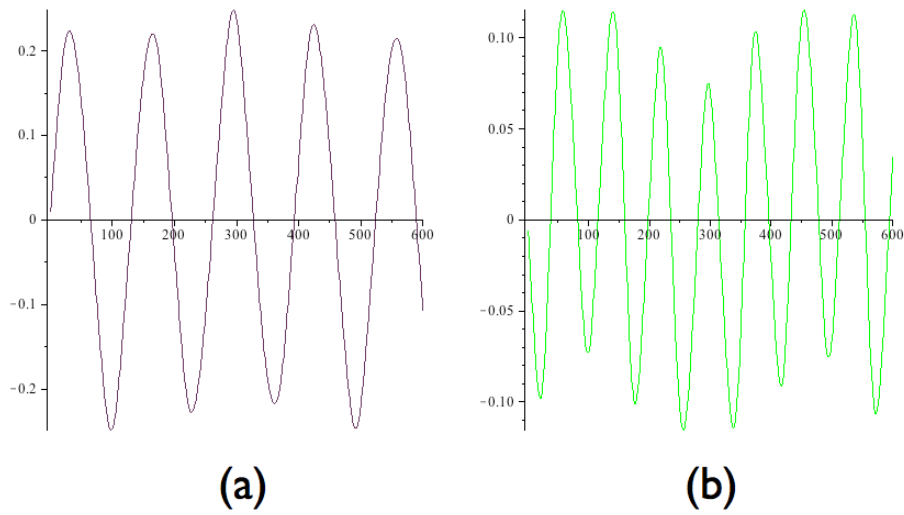


図 3.5: 基準振動のグラフ . (a) x_1+x_2 (b) x_1-x_2

れいな形になり，整数比のリサージュ図形によく似た形状を示している．リサージュ図形とは，互いに直角方向に振動する二つの単振動を合成して得られる平面図形のことを言う [2] ．

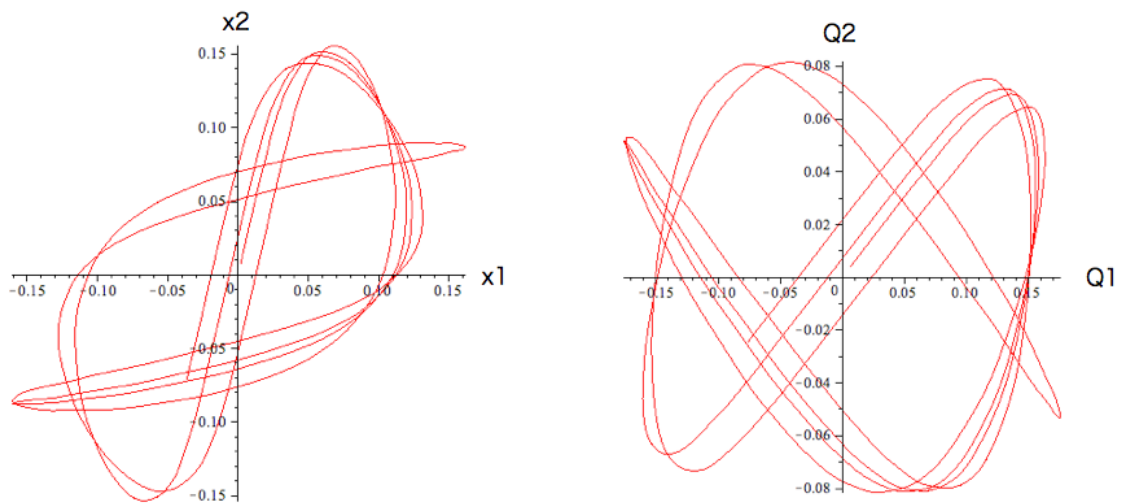


図 3.6: 変位の座標による軌跡 . (a) 座標 (b) 座標

3.1.3 3原子分子

2原子分子と同様に、3原子分子のばねモデル図3.7を用意する。

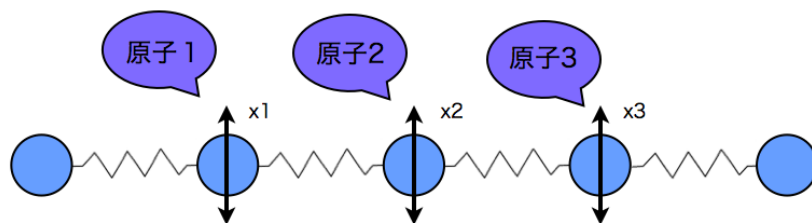


図 3.7: 3原子分子の連成振動。

そして、シミュレーションを行い、時間経過と共に、変位 x_1 , x_2 , x_3 がそれぞれどのように変化するかをグラフ図3.8に表した。

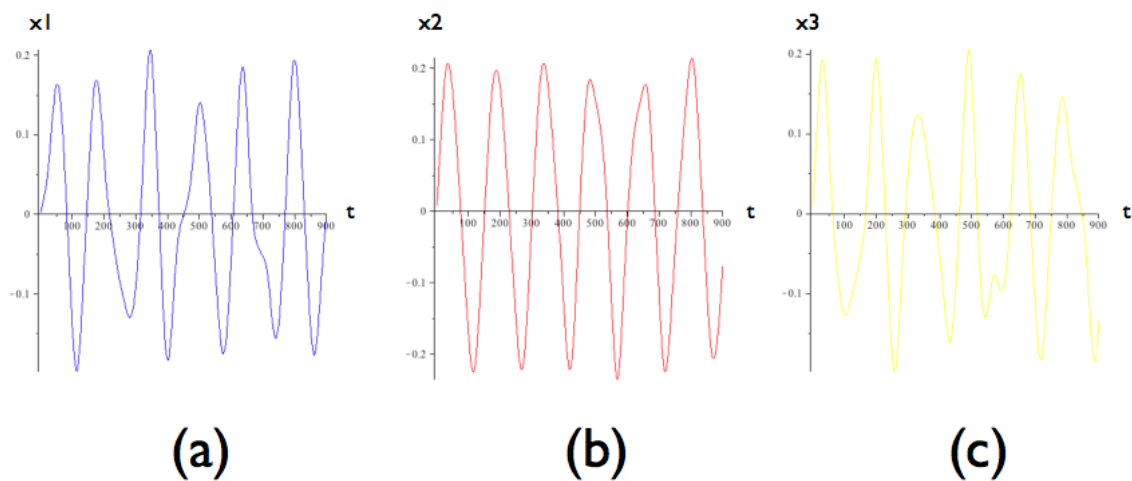


図 3.8: 3原子分子の振動の時間経過。(a) 時間毎の x_1 の変位 (b) 時間毎の x_2 の変位 (c) 時間毎の x_3 の変位

ここで、2原子分子と同様に、基準座標 $Q_i(t) = A_i \cos(\omega_i t + \alpha_i) (i=1, 2, 3)$ を導

入ると，一般解は，

$$\begin{aligned}
 x_1(t) &= \frac{1}{2}Q_1(t) + \frac{1}{\sqrt{2}}Q_2(t) + \frac{1}{2}Q_3(t) \\
 x_2(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}}Q_1(t) - \frac{1}{\sqrt{2}}Q_3(t) \\
 x_3(t) &= \frac{1}{2}Q_1(t) - \frac{1}{\sqrt{2}}Q_2(t) + \frac{1}{2}Q_3(t)
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

と求まり，図 3.9 に基準振動を示した [4]．

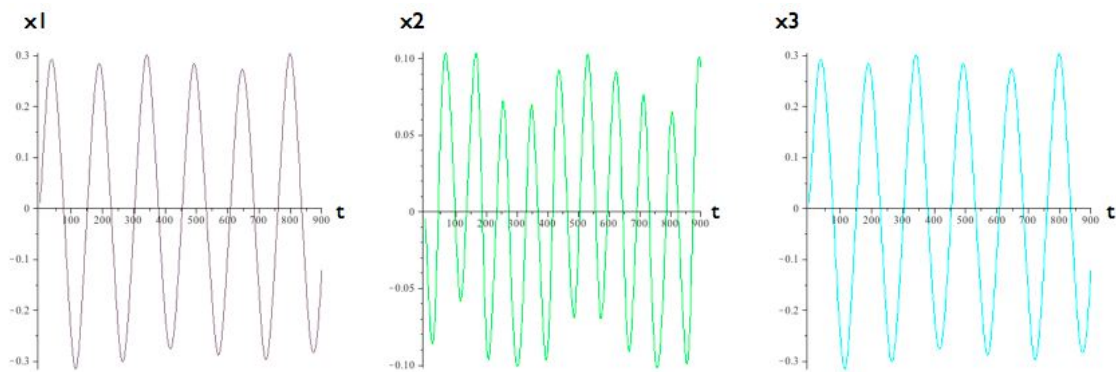


図 3.9: 3 原子分子の基準振動

3.1.4 N 原子分子

まず N 原子のばねモデル図 3.10 を用意する．

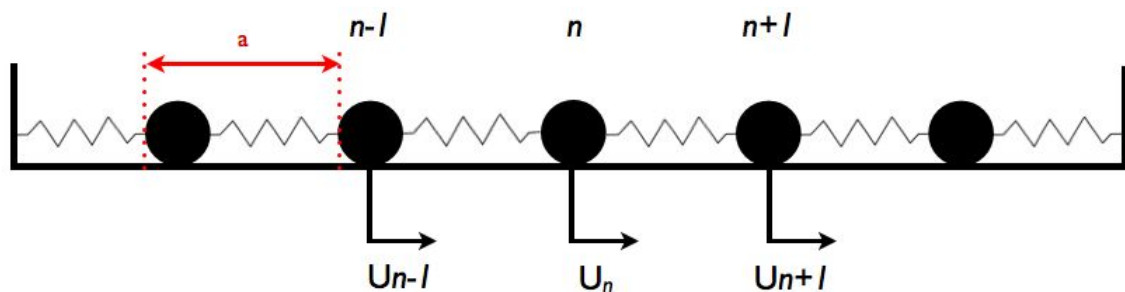


図 3.10: N 原子分子のばねモデル．

ここで，原子 n に対して注目し，運動方程式を立てる．ニュートンの運動方程式

とフックの法則を用いると，

$$ma = -Cu \quad (3.2)$$

が成り立つ．左辺の加速度は，位置を時間で2階微分でき， n 番目の原子の平衡位置の点からの変位を U_n とし，右辺を示すと，次のようになる．

$$m \frac{d^2 U_n}{dt^2} = C(U_{n-1} + U_{n+1} - 2U_n) \quad (3.3)$$

1つの原子が振動すると，その隣の原子も振動し，これは，結晶中を伝搬する波動となるので，方程式に解が存在すると考えられる．そこで，進行波の解を

$$U_n = A \exp^{i(\omega t - kna)} \quad (3.4)$$

とする．これは，1.2節で波の式を $y = A \sin \left\{ 2\pi \left(ft - \frac{x}{\lambda} \right) \right\}$ とおいていたのを指数関数に変換したものである．この解を用いると，他の変位もそれぞれ， $U_{n+1} = \exp^{ika} U_n$ ， $U_{n-1} = \exp^{-ika} U_n$ となる．ただし a は，質点間の距離である．また，式 (3.3) の左辺の $\frac{d^2 U_n}{dt^2} = -\omega^2 U_n$ となるので，これらを式 (3.3) に代入すると，

$$m(-\omega^2 U_n) = C(\exp^{-ika} U_n + \exp^{ika} U_n - 2U_n) \quad (3.5)$$

となる．オイラーの公式 $e^{\pm i\theta} = \cos \theta \pm i \sin \theta$ と三角関数の半角の公式 $\sin^2 \frac{\theta}{2} = \frac{1 - \cos \theta}{2}$ を用いると，

$$\omega = 2 \sqrt{\frac{C}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right| \quad (3.6)$$

となる．この角振動数 ω と波数 k の関係式を分散関係という．この式の縦軸を ω ，横軸を k とおく．なお，この横軸を k で表すことで今までの実空間から逆格子空間に移行することとする．分散関係のグラフを図 3.11 に示す．

3.1.5 鎖と弦

ここで N 原子分子 (図 3.12) を考える．先ほどの分散関係の式 (3.6) において， $\omega_j = 2 \sqrt{\frac{C}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|$ としたとき．波数 k を $k_j = \frac{j\pi}{(N+1)a}$ とする．両端を固定しているので，境界条件 $U_0 = U_{n+1} = 0$ を考慮する．原子 N に注目し，波を複素数で表すと指数関数になることを用いて，この解を $U_n = c \exp^{i(kna)}$ とする． c は振幅であり， $+c$ と $-c$ があるので， $U_n = c_1 \exp^{i(kna)} + c_2 \exp^{-i(kna)}$ とする．このとき， $n = 0$ での境界条件は， $U_n = c_1 + c_2 = 0$ となるので， $c_2 = -c_1$ とすると，境界条件は満たされる．すると， n 番目の変位は，

$$U_n = c_1 \exp^{i(kna)} - c_1 \exp^{-i(kna)} \quad (3.7)$$

となり，オイラーの公式を当てはめ，式変形すると，

$$U_n = 2ic_1 \sin(kna) \quad (3.8)$$

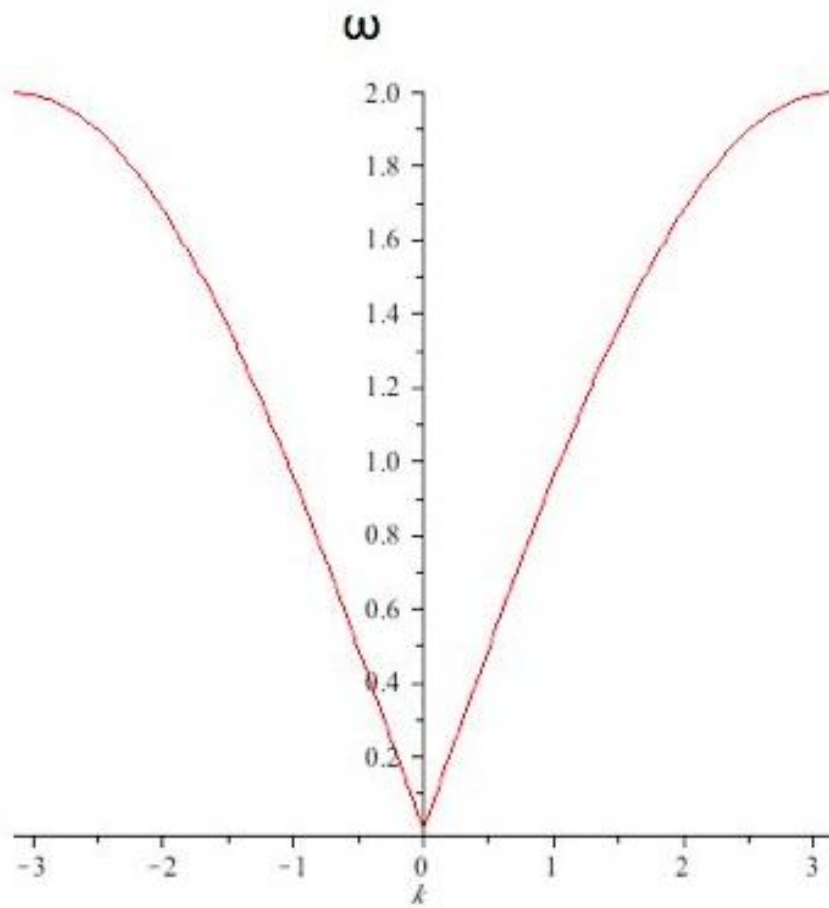


図 3.11: 分散関係 .

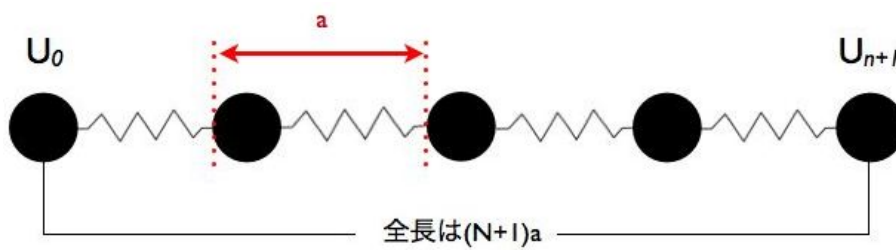


図 3.12: 両端を固定した N 原子分子 .

となる．ここで境界条件の n が 0 番目と， $n + 1$ 番目の値を代入すると， $U_n = 0$ ， $U_{n+1} = 2ic_1 \sin(k(n+1)a) = 0$ となる． U_{n+1} の式が満たされるためには，任意の整数を j とすると， $k(n+1)a = j\pi$ とすればよく，これを k について解くと， $k = \frac{j\pi}{(n+1)a}$ となる．よって以上のことをまとめると， j 番目の基準振動は，

$$\omega_j = 2\sqrt{\frac{C}{m}} \sin \frac{j\pi}{2(N+1)} \quad (3.9)$$

となる．そこで，式 (3.9) の N に数値を代入し，分散関係の図 3.13 を描く．その際，Maple を用いたので，スクリプトを以下に示す．なお，分散関係については次節で論述する．

```
>restart;>with(plots):
>k:=j*Pi/2/((N+1)*a);
>p1:= -2*sqrt(C/m)*abs(sin(k*a/2));
>p2:=N->2*sqrt(C/m)*abs((sin((j*Pi/2/((N+1)*a)*a)/2)));
>C:=1;m:=1;
>plot([p2(2),p2(3),p2(8),p2(10),p2(100)],j=0..5*Pi,p2=0..3);}
```

原子が N 個では，原子が無数にあるので，図 3.14(鎖) とみなすことができる．さらに，式 (3.9) において，原子の数 N を限りなく無限大に，原子と原子の間の距離 a を近づけると，図 3.15(弦) のようにつながる．

3.1.6 分散関係

Phonon 分散曲線を理解するために，分散関係を知ることは重要な事柄である．ここで鎖と弦に関する分散関係を描くと図 3.16 となる．

分散関係の式を導くために，鎖は N 原子分子と見なすので，式 (3.6) と同様に表される．一方，弦においては， N 原子分子の N が無限に増えることを意味する．つまり， N が十分に大きいとして近似を行う．以下は近似の仕方である．

$ka \ll 1$ のとき，波の基本公式の $v = f\lambda$ を用いて， $v = \frac{\omega}{k}$ と表される．この ω に鎖の分散関係である式 (3.6) を代入すると，

$$v = \frac{1}{k} 2\sqrt{\frac{C}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right| \quad (3.10)$$

となる．これに式変形をし，

$$v = \sqrt{\frac{C}{m}} \frac{\left| \sin \frac{ka}{2} \right|}{\frac{ka}{2}} a \quad (3.11)$$

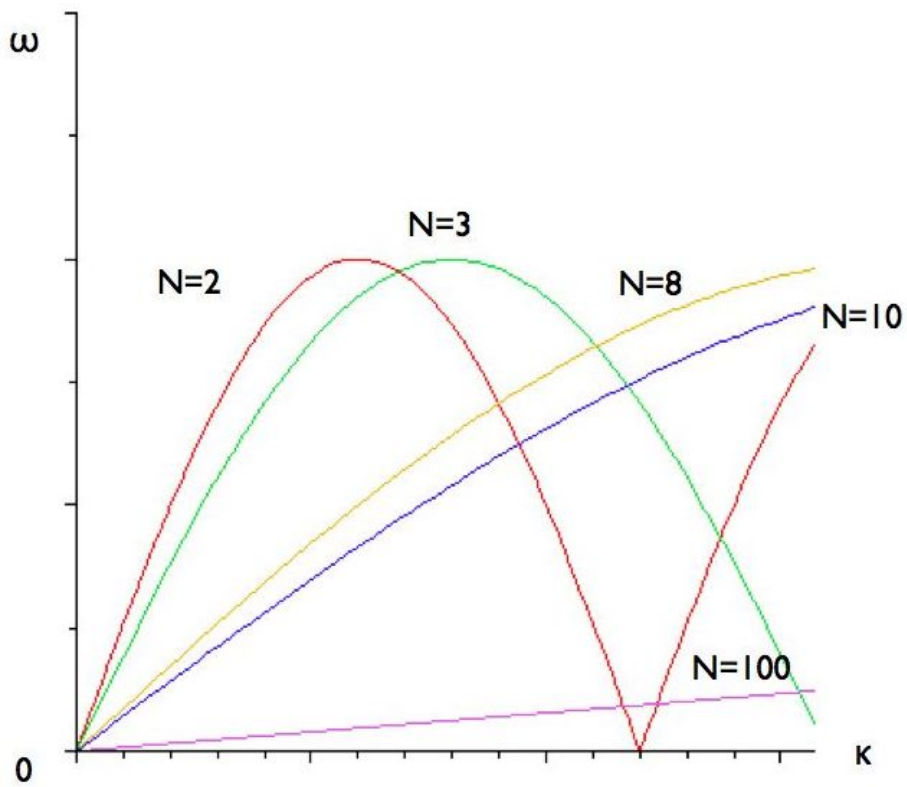


図 3.13: N の数値を変えた際の分散関係 .



図 3.14: 鎖 .

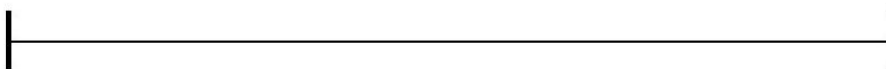


図 3.15: 弦 .

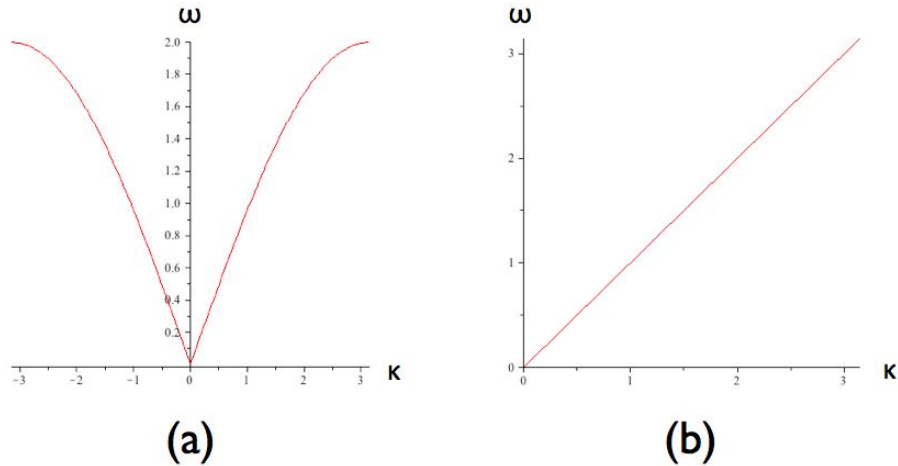


図 3.16: 分散関係 (a) 鎖 (b) 弦

となり，ここで θ を 0 に近づけると， $\frac{\sin \theta}{\theta} = 1$ になるという近似を行うと，

$$v \simeq a \sqrt{\frac{C}{m}} \quad (3.12)$$

という結果になる．つまり， v は一定となるので，

$$\omega = vk \quad (3.13)$$

となる．この結果が，弦の分散関係式となる．以上より，この 2 つを見比べると，グラフの形が異なっていることが分かる．鎖の分散関係のグラフでは，横軸 k を増やすと，形が崩れるようなカーブを描くが，一方で弦の分散関係のグラフは，直線を描き，比例していることが分かる．つまり， ω が k に比例する場合を分散がない， ω が k に比例しない場合を分散があると言える．

一般的に，分散とは，光学において，入射した光がプリズムを出る際に波長によって異なる現象のことを言う．つまり，異なる波数の波が別々に分離されるということである．実際に波数 k の波には，伝搬速度 v が発生する．したがって，弦の場合では， v が一定であるので，すべての波数の波は同じ速度で伝わる．よって比例直線を描く．鎖の場合，はじめは長波長の部分において，式 $k = 1/\lambda$ より，波数が小さくなるので，弦のように直線を表すが，波数が大きくなると，速度は遅くなるので形が崩れる．

3.2 2 原子規則格子

次に，2 種類の原子 AB から成り立っている結晶格子を考える．例えば，NaCl のようなイオン結晶には，単位格子に 2 個の原子が含まれている．ここでは，交

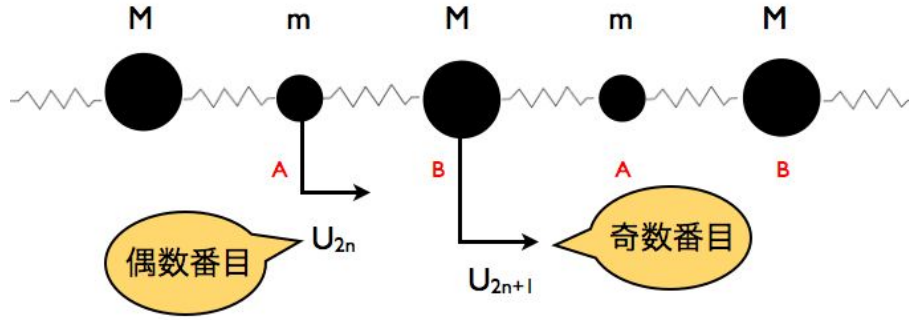


図 3.17: 2 原子規則格子

互に ABAB... と成り立っている一次元結晶格子 (図 3.17) を考える .
隣接原子間の相互作用のみを考え , 原子 A , B の質量をそれぞれ M , m , バネ定数を C , 隣り合う原子の平衡点の間の距離を a とおく . また , 原子 A が偶数番目 $2n$, 原子 B が奇数番目 $2n+1$ にあるとして変位を U_{2n} , U_{2n+1} と取る . 原子 A , B におけるそれぞれの運動方程式を考える .

$$m \frac{d^2 U_{2n+1}}{dt^2} = -C(U_{2n} - U_{2n-1}) + C(U_{2n+1} - U_{2n}) \quad (3.14)$$

$$M \frac{d^2 U_{2n+1}}{dt^2} = -C(U_{2n+1} - U_{2n}) + C(U_{2n+2} - U_{2n+1}) \quad (3.15)$$

この方程式の進行波の解を

$$U_{2n} = \alpha \exp^{i(\omega t - k2na)} \quad (3.16)$$

$$U_{2n+1} = \beta \exp^{i(\omega t - k(2n+1)a)} \quad (3.17)$$

とおくと , $U_{2n-1} = \beta \exp^{i(\omega t - k(2n-1)a)}$, $U_{2n+2} = \alpha \exp^{i(\omega t - k(2n+2)a)}$ と書け ,
 $\frac{d^2 U_{2n}}{dt^2} = -\omega^2 \alpha \exp^{i(\omega t - k2na)}$, $\frac{d^2 U_{2n+1}}{dt^2} = -\omega^2 \beta \exp^{i(\omega t - k(2n+1)a)}$ も書き換えることができる . これらすべてを式 (3.14) , (3.15) にそれぞれ代入すると ,

$$(2k - m\omega^2)\alpha = C\beta(\exp^{ika} + \exp^{-ika}) \quad (3.18)$$

$$(2k - M\omega^2)\beta \exp^{-ika} = C\alpha(1 + \exp^{-i2ka}) \quad (3.19)$$

となる . これら 2 式より , α , β を消去して式を整理すると ,

$$Mm\omega^4 - 2C(M + m)\omega^2 + 4C^2 \sin^2 ka = 0 \quad (3.20)$$

を得る． ω^2 についての 2 次方程式だと考え，式変形すると，

$$\omega^2 = C \left(\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) \pm \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 ka}{Mm}} \right) \quad (3.21)$$

と求まる．

3.2.1 光学的振動と音響的振動

先ほどの ω^2 についての 2 次方程式 (3.21) において， ω について解くと，解が正と負の 2 つ表れるので，+ の方を ω_1 ，- の方を ω_2 とする．

$$\omega_1 = \sqrt{C \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) + C \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 ka}{Mm}}} \quad (3.22)$$

$$\omega_2 = \sqrt{C \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) - C \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 ka}{Mm}}} \quad (3.23)$$

式 (3.22)，(3.23) は ω と k に関する式が成り立っているので，分散関係と言える．それぞれを同じ図 3.18 に示した．ここで，振動する座標を考える．

- $k = \frac{\pi}{2a}$ のところを考える．
 ここは， $\sin ka$ が最大になる点である．この結晶の周期は $2a$ になるので， $k = \frac{\pi}{2a}$ となる．
- $k = \frac{\pi}{2a}$ の点の波数 k における ω_0 ， ω_a を調べる．
 $K = k = \frac{\pi}{2a}$ を ω_1 と ω_2 それぞれ代入すると，
 $\omega_0 = \sqrt{\frac{2C}{M}}$ ， $\omega_a = \sqrt{\frac{2C}{m}}$ となる．
- 縦軸の ω_L の部分を調べる．
 ω_2 の方は，0 であるが， ω_1 は， $k = 0$ を代入すると， $\omega_L = \sqrt{2C \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)}$ となる．

$k = 0$ で $\omega \neq 0$ となる方が光学振動， $k = 0$ で $\omega = 0$ となる方が音響振動である．光学振動は，軽い原子と重い原子は逆の位相を持つので振動は逆向きになる．数値的には分散曲線の端のところにおいて，横軸の $k = \pi/2a$ では， ω の値が違う．これは光学振動と音響振動の振動数が異なっていることを意味し， ω_1 の質量 m と ω_2 の質量 M の差が関係している．したがって，質量によってこの値の差は変わることが分かる．一方で．音響振動では，軽い原子も重い原子も同じ向きに振動す

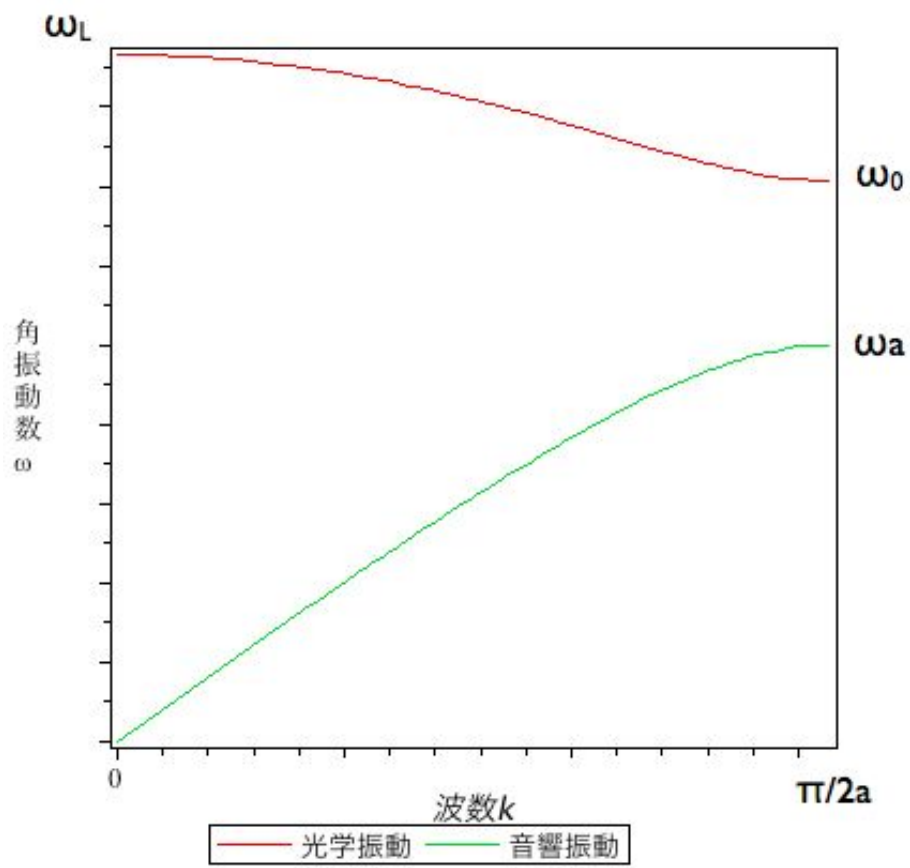


図 3.18: 2 原子種による分散関係 .

る．波数 k が小さいところでは，比例していることがわかる．そのため，音響振動では，1 原子規則格子の鎖の分散曲線と同様，波長の長い波は一定の速度，つまり音速で伝わる事が分かる [2]．

3.2.2 Phonon 分散曲線上での波

2 原子種で分散関係を描けることが分かったが，それぞれの曲線がどういった波を表しているのか容易に理解できがたいので，曲線のある点に注目して波を視覚化する．その計算方法では，frozen phonon method を挙げる．これは，振動する格子をある瞬間で止め，その原子位置から振動数を求める方法である．原子を静止しているとして扱う [5]．

まず，横軸の波数 k を 10 等分し， k の値を決め，式 (3.22) と式 (3.23) に代入し，それぞれ ω を求めると，ある点の座標が決まる．その際 Maple を用いて，以下のよう求めた．

光学振動

```
>with(plots):
>with(plottools):

>num_x:=-Pi/2;
>cut:=Pi/10;
>x:=[];
>y1:=[];
>for i from 0 to 10 by 1 do
    num_y:=0;
    x:=[op(x),num_x];
    y1:=[op(y1),sqrt(3/2+sqrt(9/4-2*sin(num_x)^2))];
    num_x:=num_x+cut;
>end do;
```

音響振動

```
>num_x:=-Pi/2;
>cut:=Pi/10;
>x:=[];
>y2:=[];
>for i from 0 to 10 by 1 do
    num_y:=0;
    x:=[op(x),num_x];
```

```

y2:=[op(y2),(1/2)*sqrt(6-2*sqrt(9-8*sin(num_x)^2))];
num_x:=num_x+cut;
>end do:

```

次に，進行波解の $y = A \sin(\omega t - k2na)$ に代入し，波を描くと図 3.19 と描け，それぞれの点 1, 2, 3, 4, 5, 6(図 3.20) の座標に注目する．

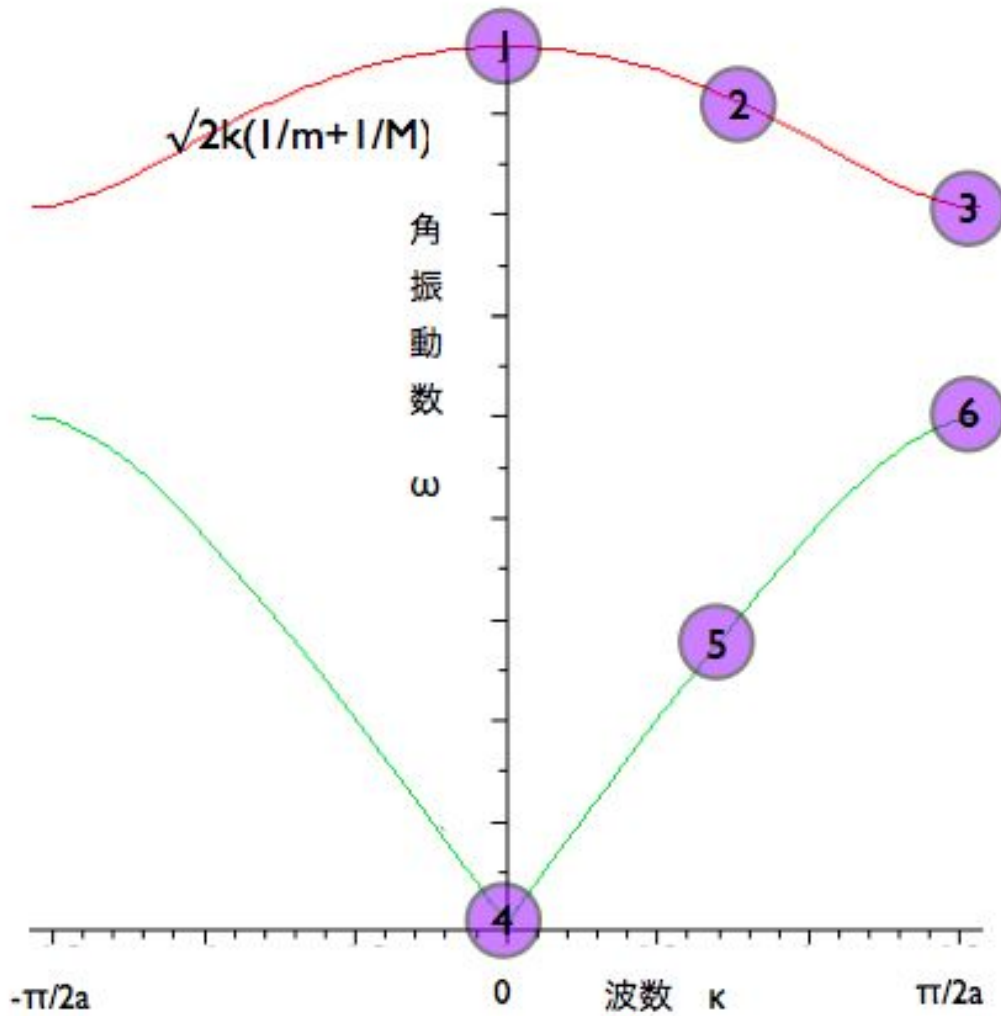
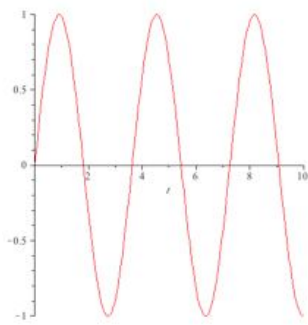
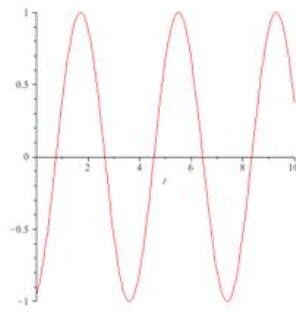


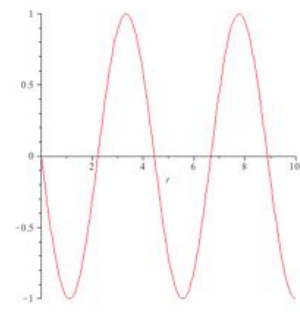
図 3.19: Phonon 分散曲線の波 .



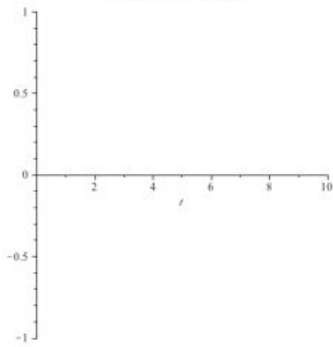
(a)点①の波



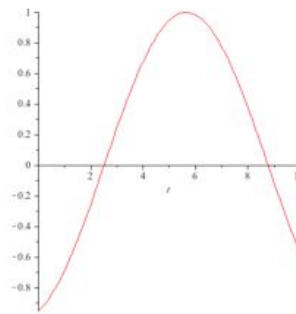
(b)点②の波



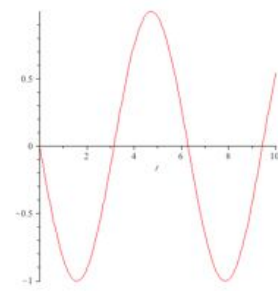
(c)点③の波



(d)点④の波



(e)点⑤の波



(f)点⑥の波

図 3.20: それぞれの座標における波 .

第4章 総括

4.1 結論

図 4.1 は，Maple により視覚化された 1 原子規則格子の鎖と弦における分散関係のグラフである．これら 2 つのグラフを見比べると，相違点が見える．まず，鎖の方は，初めは直線を表すが，ある分岐点からカーブを描くようになる．一方で弦のグラフでは，原点を通っているため比例関係を表した直線を示していることが分かる．分散関係があるとは， N 原子分子の鎖のことをさす．なぜならば，固体中の結晶における格子振動は，各点の座標によって様々な動きをするからである．そのため，格子振動は鎖のようなばねモデルを基準として考えられ，波を描くことになる．さらに波を伝搬する速度 v は，運動方程式からの計算式の変形から角振動数 ω と波数 k の値により，変化することが分かる．しかし，弦では鎖の分散関係である曲線を描かない．これには，固体の振動が関係している．元来，高校物理の波の単元で始めに学習する， $f = v/\lambda$ の式を考える．ただし， f は振動数， v は波の速度， λ は波長を表す．この波長 λ をどんどん小さくしていくと，波を表すことができない．例えば，波長の長さよりも原子間距離の長さが短ければ，原子と原子の間に波が含まれることになるが，それは可視化できない．つまり，波長が極端に短いところでは，近似される．これを長波長極限という．したがって，長波長極限の場所において，波の速度は一定の速さで進むことが分かる．

次の図 4.2，図 4.3 は，初めに提示していた Phonon 分散曲線の図と結果で得られた 2 原子規則格子の音響振動と光学振動の分散関係を視覚化したものである．この 2 つのグラフを見比べると，類似点が見つかる．2 原子規則格子の分散曲線による上の光学振動と下の音響振動をもとに，Phonon 分散曲線でも 2 種類の曲線が描かれている．基本格子 p 個の原子は， $3p$ 個の Phonon の分岐に枝分かれし，そこから $3p$ 個の音響的分岐と $3p-3$ 個の光学的分岐に分かれる．図 4.2 のグラフは，3C-SiC の結晶の Phonon 分散曲線であり，SiC は 2 原子規則格子であるので， $p = 2$ として， 3×2 個の Phonon の分岐から，3 個の音響的分岐， $3 \times 2 - 3$ 個の光学的分岐となる．

また，2 原子規則格子では，音響振動と光学振動の 2 種の曲線が存在するが，音響振動のグラフは，1 原子規則格子の分散関係のグラフと同様である．つまり，結晶の単位胞に原子が 1 個しかない結晶では音響振動しか存在することがない．一方で，単位胞に 2 個の原子が含まれると光学振動が現れることが分かる．

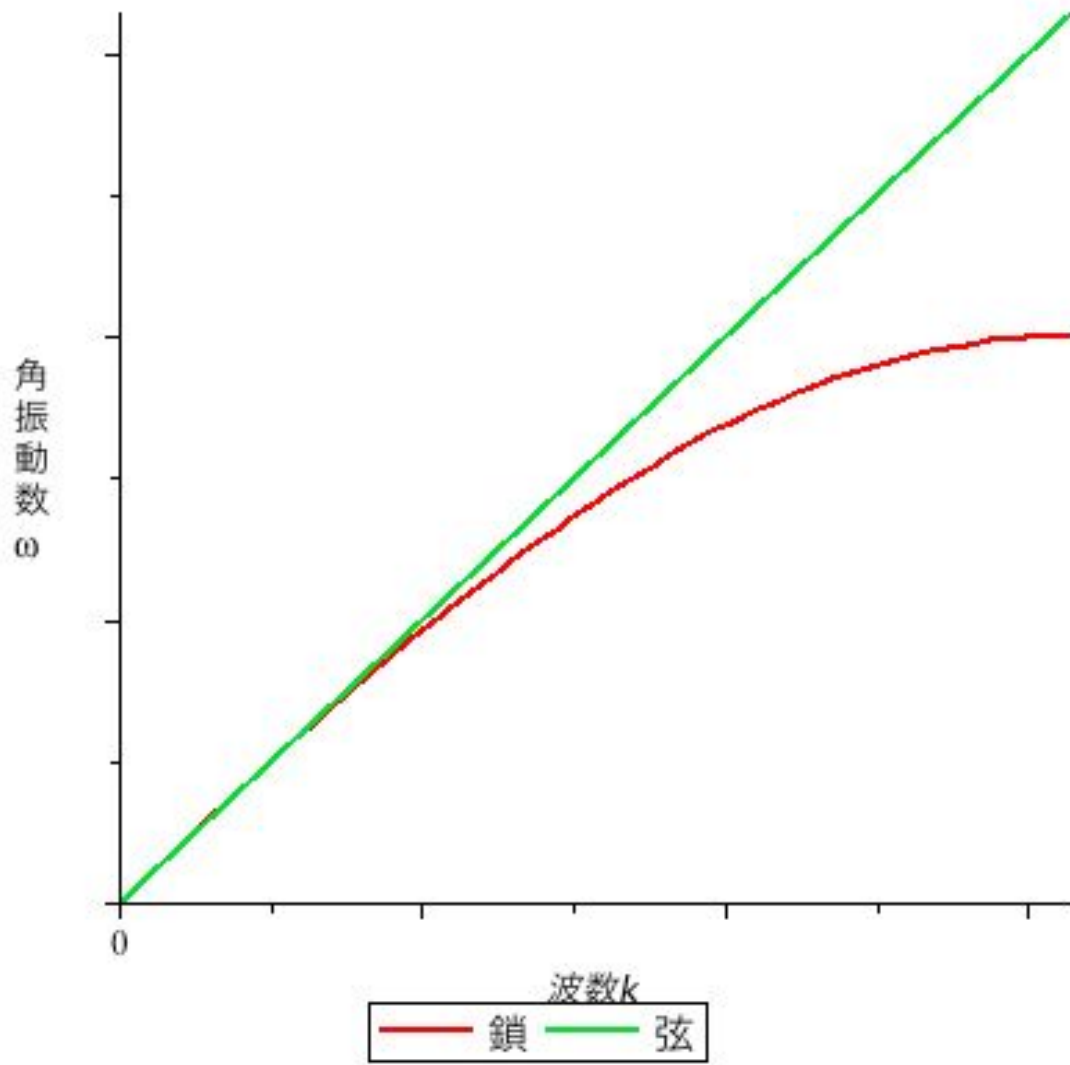


図 4.1: 鎖と弦の分散関係 .

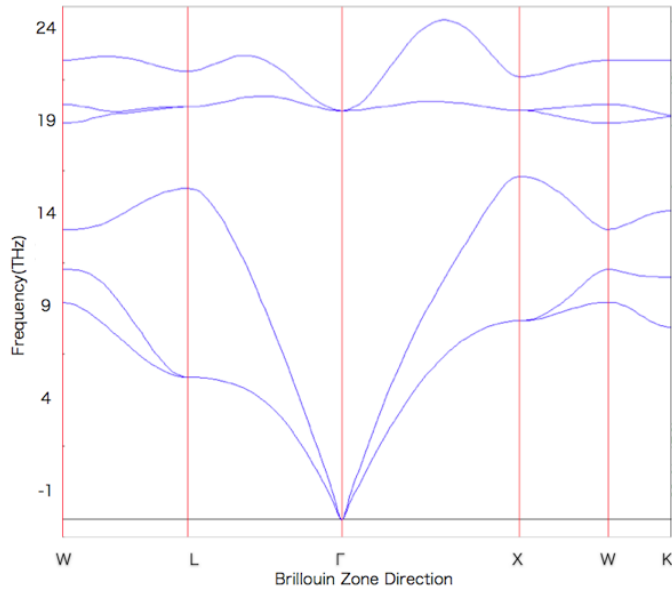


図 4.2: Phonon 分散曲線

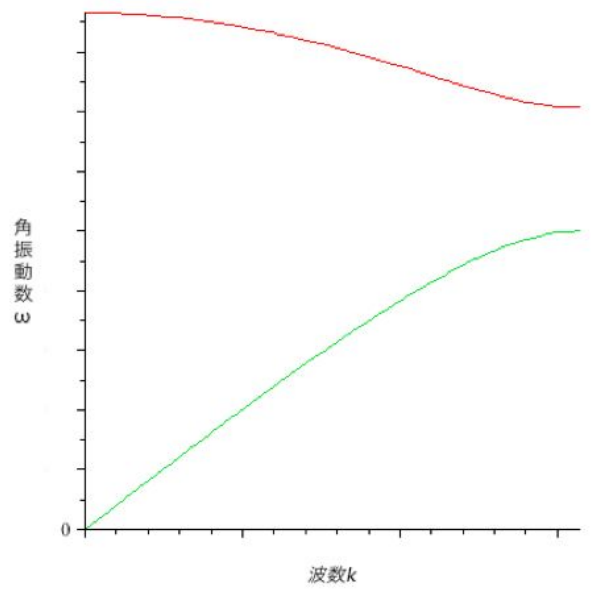


図 4.3: 2 原子規則格子の分散曲線

4.2 考察

はじめて Phonon 分散曲線というものを学習する際に、視覚化された図を見ると、縦軸、横軸、曲線が表しているグラフなどが容易に分からない。しかし、本研究のように、はじめから順を追って学習していき、格子振動をばねモデルとみなすことで高校物理の波や高校数学の微分計算などを基準にし、Maple を用いて視覚化することができる。結果、Phonon 分散曲線がこういった波を表しているのかも可視化し、波のイメージを持つことができる。したがって、西谷研究室で行われている結晶多形の安定性の物性計算などを学習する際に、Phonon 分散曲線の理解が必要になるが、本研究は今後初学者が学習する際の手助けになることを期待する。

謝辞

本研究を遂行するにあたり，終始多大なる有益なご指導，及び丁寧な助言を頂いた西谷滋人教授に深い感謝の意を表します．

また，本研究を進めるにつれ，西谷研究室の皆様にも様々な知識の供給，ご協力を頂き，本研究を大成することができました．最後になりましたが，この場を借りて心から深くお礼申し上げます．

参考文献

- [1] 橋本淳一郎 著, 単位が取れる量子力学ノート, (株式会社講談社,2004)
- [2] 小暮陽三 著, ゼロから学ぶ振動と波動, (株式会社講談社,2005)
- [3] 谷沖由香 著, 「運動する粒子の温度の視覚化」(関西学院大学, 卒業論文,2008)
- [4] 吉岡大二郎 著, 「振動と波動」(東京大学出版会,2005)
- [5] 藤井俊介 著, 「ボンドオーダーポテンシャルによる sp 結合立法金属のフォノン分散」(京都大学, 特別研究報告書,1996)
- [6] 西谷滋人 著, 「固体物理の基礎」(森北出版株式会社,2006)
- [7] Wikipedia <http://ja.wikipedia.org/wiki/>

付録

計算手法

ここでは、2原子分子と3原子分子における変位の解を求める式計算を記す。

< 2原子分子 >

質量 m の原子の平衡位置をそれぞれ $P1$, $P2$, 平衡位置からの変位を $x1$, $x2$, バネ定数を C として運動方程式を立てる。

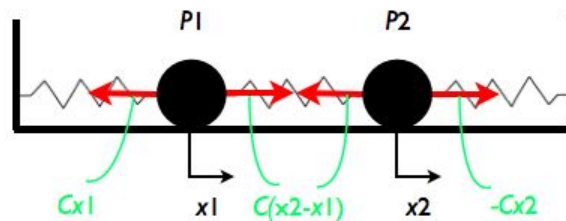


図 4: 2原子分子の振動。

$P1$ の運動方程式

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -Cx1 + C(x2 - x1) \quad (1)$$

$P2$ の運動方程式

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = Cx2 - C(x2 - x1) \quad (2)$$

質点と床の間の摩擦力は無視できるものとし, $x1(t) = a_1 e^{i\omega t}$, $x2(t) = a_2 e^{i\omega t}$ とおき, 式 (1), (2) にそれぞれ代入すると,

$$m(i^2 \omega^2 a_1 e^{i\omega t}) = -2Ca_1 e^{i\omega t} + Ca_2 e^{i\omega t} \quad (3)$$

$$m(i^2\omega^2 a_2 e^{i\omega t}) = C a_1 e^{i\omega t} - 2C a_2 e^{i\omega t} \quad (4)$$

となり, $i^2 = -1$ と, 両辺を $e^{i\omega t}$ で割り, 整理すると,

$$(-m\omega^2 + 2C)a_1 - C a_2 = 0 \quad (5)$$

$$-C a_1 + (2C - m\omega^2)a_2 = 0 \quad (6)$$

を得る. 次に未知数 a_1, a_2 を消去すると,

$$(m\omega^2 - 2C)^2 - C^2 = 0 \quad (7)$$

と式変形できる. これを ω^2 についての2次方程式とみなすと,

$$\omega^2 = \frac{C}{m} \quad (8)$$

$$\omega^2 = \frac{3C}{m} \quad (9)$$

と書け, 変位の式に代入すれば解が求まる.

< 3 原子分子 >

2原子分子と同様に原子がバネでつながれているとして, 調べる. まずは, 質量 m の原子の平衡位置をそれぞれ P_1, P_2, P_3 , 平衡位置からの変位を x_1, x_2, x_3 , それぞれのバネ定数を C として運動方程式を立てる.

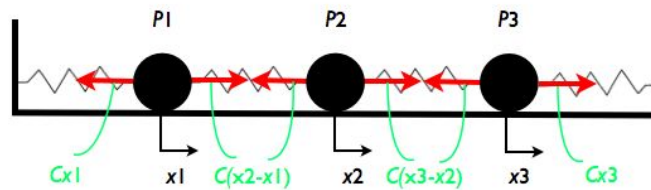


図 5: 3 原子分子の振動.

P_1 の運動方程式

$$m \frac{d^2 x_1}{dt^2} = -C x_1 + C(x_2 - x_1) \quad (10)$$

P2 の運動方程式

$$m \frac{d^2 x_2}{dt^2} = -C(x_2 - x_1) + C(x_3 - x_2) \quad (11)$$

P3 の運動方程式

$$m \frac{d^2 x_3}{dt^2} = -C(x_3 - x_2) - Cx_3 \quad (12)$$

これらの式に $x_j = c_j e^{i\omega t}$ (x_j は変位, c_j は振幅とする.) を代入すると.

$$(-m\omega^2 + 2C)c_1 - Cc_2 = 0 \quad (13)$$

$$(-Cc_1 + (-m\omega^2 + 2C)c_2 - Cc_3 = 0 \quad (14)$$

$$-Cc_2 + (-m\omega^2 + 2C)c_3 = 0 \quad (15)$$

となる. $c_j \neq 0$ とすると, 係数の行列式が 0 になる必要がある.

$$\begin{vmatrix} 2C - m\omega^2 & -C & 0 \\ -C & 2C - m\omega^2 & -C \\ 0 & -C & 2C - m\omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

この行列式は, 線形代数のサラスの法則を用いて計算すると,

$$(2C - m\omega^2)(2C - m\omega^2)(2C - m\omega^2) + (-C)(-C)0 + 0(-C)(-C) - \{0(2C - m\omega^2)0 + (-C)(-C)(2C - m\omega^2) + (2C - m\omega^2)(-C)(-C)\} = 0$$

と計算でき, 式の整理を行うと, $(2C - m\omega^2) \{(2C - m\omega^2)(2C - m\omega^2) - 2C\} = 0$ となる. つまり,

$$(2C - m\omega^2) = 0 \quad (16)$$

$$\text{かつ } (2C - m\omega^2)(2C - m\omega^2) - 2C = 0 \quad (17)$$

と算出できる. 以上より, ω に対する 3 つの解, すなわち 3 つの基準振動数,

$$\omega = \sqrt{\frac{2C}{m}} \quad (18)$$

$$\omega = \sqrt{\frac{2 \pm \sqrt{2}}{m} C} \quad (19)$$

が得られた.