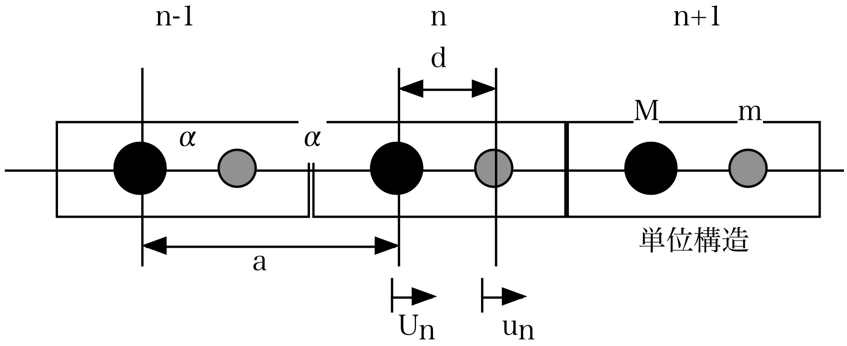
２種類の原子が鎖状に並んだ場合の格子振動

山田　明

問題のモデル化：

- ２種類の原子は、質量 M と m の質点と考える。
- 原子間の力は、バネと同等と考える。バネ定数は、αとする。
- 格子定数は a とする。単位構造内の原子間の距離は、d とする。
- n 番目の大きい原子の変位を Un、小さい原子の変位を un とする。



ニュートンの運動方程式：

$$M\frac{d^2}{dt^2}U_n = \alpha(u_n - U_n) - \alpha(U_n - u_{n-1})$$
$$m\frac{d^2}{dt^2}u_n = \alpha(U_{n+1} - u_n) - \alpha(u_n - U_n)$$

<u>解法：</u>

１次元の場合と同じ。全ての原子が同じ振動数で振動数する解（**固有振動の解**）を探す。波の変位を、

$$U_n = A_M \exp\{j(kx - \omega t)\}, x = na$$
$$u_n = A_m \exp\{j(kx - \omega t)\}, x = na + d$$

と仮定する。これで、前回と同様に、**k-ωの関係を求める。**（ある波長と、それに対する振動数との関係。）運動方程式に代入すると、

$$-M\omega^2 A_M \exp(jkna) = \alpha(A_m \exp\{j(kna + kd)\} + A_m \exp\{j(kna - ka + kd)\} - 2A_M \exp(jkna))$$
$$-m\omega^2 A_m \exp\{j(kna + kd)\} = \alpha(A_M \exp\{j(kna + ka)\} + A_M \exp(jkna) - 2A_m \exp\{j(kna + kd)\})$$

整理すると、

$$-M\omega^2 A_M = \alpha(A_m \exp(jkd) + A_m \exp\{j(-ka + kd)\} - 2A_M)$$
$$-m\omega^2 A_m = \alpha(A_M \exp\{j(ka - kd)\} + A_M \exp(-jkd) - 2A_m)$$

見やすいように行列の形で整理すると、

$$\begin{pmatrix} 2\alpha - M\omega^2 & -\alpha\{\exp(jkd)(1+\exp(-jka))\} \\ -\alpha\{\exp(-jkd)(1+\exp(jka))\} & 2\alpha - m\omega^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A_M \\ A_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

2x2 行列の部分を H と書くと、

$$H = \begin{pmatrix} 2\alpha - M\omega^2 & -\alpha\{\exp(jkd)(1+\exp(-jka))\} \\ -\alpha\{\exp(-jkd)(1+\exp(jka))\} & 2\alpha - m\omega^2 \end{pmatrix}$$

$$H\begin{pmatrix} A_M \\ A_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

したがって、H が逆行列を持つと、

$$H^{-1}H\begin{pmatrix} A_M \\ A_m \end{pmatrix} = H^{-1}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} A_M \\ A_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

大きい質点と小さい質点のどちらの振幅も 0 となってしまう。これは、意味のある解ではない。したがって、H が逆行列を持っては困る。**H が逆行列を持たない条件は、det(H)=0 である。**これより、

$$(2\alpha - M\omega^2)(2\alpha - m\omega^2) - \alpha^2\{1+\exp(-jka)\}\{1+\exp(jka)\} = 0$$

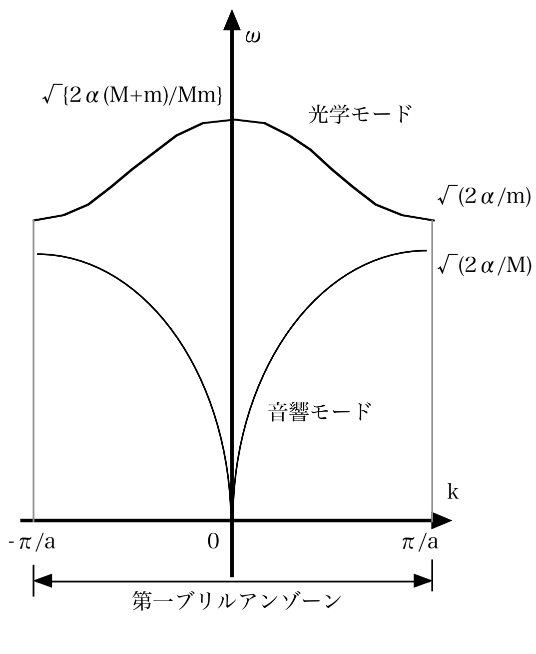
$$(2\alpha - M\omega^2)(2\alpha - m\omega^2) - 2\alpha^2\{1+\cos(ka)\} = 0$$

$$Mm\omega^4 - 2\alpha(M+m)\omega^2 + 2\alpha^2\{1-\cos(ka)\} = 0$$

ωについて解くと、

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{\alpha(M+m)}{Mm}\left\{1 \pm \sqrt{1 - \frac{4Mm}{(M+m)^2}\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)}\right\}$$

グラフにすると、



となる。