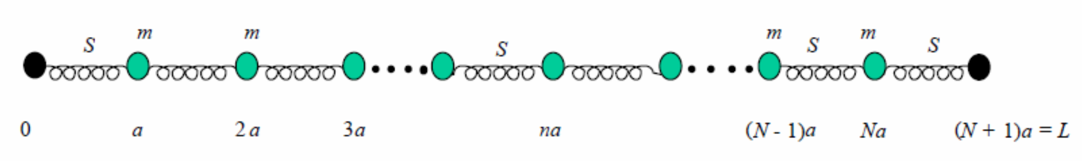
APhO2002(Singapore)

理論第１問　　　　　　　　　　　　線形結晶格子の振動

下図のように，N 個の等しい質量 m の点状粒子が，自然長 a，ばね定数 S で質量の無視できる $N+1$ 個のばねで結ばれ，端は固定された粒子につながれている。この鎖は，１次元結晶における振動モードのモデルとして用いられる。鎖が縦方向の振動をするとき，それは特徴的な振動数をもったモードと呼ばれる単純な振動の重ね合わせと見なすことができる。



(a) n 番目の粒子の平衡位置からの変位を $X_n(\omega)$ として，運動方程式を書き下せ。

(b) 変位 $X_n(\omega)$ を，

$$X_n(\omega) = A \sin nka \cos(\omega t + \alpha), \quad 0 < ka < \pi$$

とおいて，設問(a)の運動方程式を解け。ここで，振動モードの角振動数 ω，波数 k，A，α はすべて定数である。ω の k 依存性，k のとり得る値，および，ω の最大値を求めよ。こうして，鎖の振動は，これら振動モードすべての重ね合わせであることがわかる。ここで，必要なら下記の公式を用いよ。

$$\frac{d}{dx}\sin \alpha x = \alpha \cos \alpha x, \quad \frac{d}{dx}\cos \alpha x = -\alpha \sin \alpha x \quad （\alpha：定数）$$

$$\sin(A+B) = \sin A \cos B + \cos A \sin A, \quad \cos(A+B) = \cos A \cos B - \sin A \sin B$$

プランクによると，角振動数 ω の光子のエネルギーは，プランク定数 h を 2π でわった量 $\hbar\left(=\dfrac{h}{2\pi}\right)$ を用いて，$\hbar\omega$ と表される。アインシュタインは，角振動数 ω の結晶の振動モードもこのエネルギーをもつと仮定して飛躍を成し遂げた。ここで，振動モードは粒子そのものではなく，全鎖にわたり単振動をしている状態を表す。この振動は光子(フォトン)にならってフォノンと呼ばれる。これ以降，この考えにしたがって議論を進めよう。直線的な鎖の結晶において，粒子数は $N \sim 10^{23}$ とする。

(c) 与えられた角振動数 ω(あるいは k)の系には，いろいろな数 0，1，2，… のフォノンがある。このことから角振動数 ω をもつ特定モードの平均エネルギー $\langle E(\omega) \rangle$ の計算方法がわかる。角振動数 ω をもつフォノンが p 個ある確率を $P_p(\omega)$ と表すと，必要とされる平均は，

$$\langle E(\omega)\rangle = \frac{\displaystyle\sum_{p=0}^{\infty} p\hbar\omega P_p(\omega)}{\displaystyle\sum_{p=0}^{\infty} P_p(\omega)}$$

となる。フォノンは離散的であるが，その数が非常に多いため，和は $p=\infty$ まで拡張することができる(P_p は大きな p に対して非常に小さくなる)。さて，確率 P_p はボルツマンの公式

$$P_p(\omega) \propto \exp\left(-\frac{p\hbar\omega}{k_{\mathrm{B}}T}\right)$$

で与えられる。ここで，k_{B} はボルツマン定数で，T は結晶の絶対温度であり一定とする。比例係数は p によらない。このとき，角振動数 ω のフォノンに対する平均エネルギーを計算せよ。ただし，必要ならば，次の公式を用いてよい。

$$\frac{d}{dx}e^{f(x)} = e^{f(x)}\frac{df}{dx}$$

次に，温度 T のときの結晶の全エネルギー E_T を計算しよう。設問(c)では振動モード ω の平均エネルギー $\langle E(\omega)\rangle$ を求めた。E_T を得るには，単位体積あたりの角振動数 ω のモード数だけ $\langle E(\omega)\rangle$ をかけ合わせ，$\omega=0$ から $\omega=\omega_{\max}$ までの全範囲の和をとることが必要である。

(d) 非常に大きな N と，断続的に続く波数 k の間隔よりずっと大きな区間 Δk に対して，Δk の間に見出されるモードの数はいくらか。

(e) (a)と(b)の結果を用いて Δk を $\dfrac{dk}{d\omega}d\omega$ で近似し，和を ω に関する積分に置き換えよう(こうして，k の代わりに変数 ω を用いるのが便利である)。この近似の下に結晶の全角振動数領域にわたるモード数の総和を求めよ。また，E_T はどのように表されるか。ただし，E_T の値を計算しなくてよい。必要ならば，次の積分を用いよ。

$$\int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \frac{\pi}{2}$$

(f) 結晶のモル比熱は，実験的には $C_V = \dfrac{dE_T}{dT}$ と書くことが許される。上で議論してきた結晶に対して，T の非常に大きな値と非常に小さな値での C_V の T 依存性を求めよ(それは温度によらない定数か，線形か，冪依存性をもつか)。非常な高温と非常な低温での傾向を示し，C_V-T の定量的なグラフの概略を描け。

APhO2002(Singapore)

理論第１問　【解答】

線形結晶格子の振動

(a) N 番目の粒子には，右側のばねから弾性力 $S(X_{n+1}-X_n)$ が右向き(正の向き)にはたらき，左側のばねから弾性力 $S(X_n-X_{n-1})$ が左向き(負の向き)にはたらくから，運動方程式は,

$$\underline{m\ddot{X}_n=S(X_{n+1}-X_n)-S(X_n-X_{n-1})} \qquad \cdots①$$

(b) $X_n=A\sin nka\cos(\omega t+\alpha)$ を運動方程式①へ代入して，両辺から振動項 $\cos(\omega t+\alpha)$ を落とすと,

$$-mA\omega^2\sin nka=AS\{\sin(n+1)ka-2\sin nka+\sin(n-1)ka\}$$

ここで,

$$\sin(n+1)ka-\sin nka=2\cos\left(n+\frac{1}{2}\right)ka\sin\frac{1}{2}ka$$

$$\sin nka-\sin(n-1)ka=2\cos\left(n-\frac{1}{2}\right)ka\sin\frac{1}{2}ka$$

$$\cos\left(n+\frac{1}{2}\right)ka-\cos\left(n-\frac{1}{2}\right)ka=-2\sin nka\sin\frac{1}{2}ka$$

を用いて,

$$-mA\omega^2\sin nka=-4AS\sin nka\sin^2\frac{1}{2}ka \quad \therefore \quad \underline{\omega=2\sqrt{\frac{S}{m}}\sin\frac{1}{2}ka} \qquad \cdots②$$

これより ω の最大値は,

$$\omega_{\max}=\omega_0=\underline{2\sqrt{\frac{S}{m}}}$$

また，境界条件 $X_{N+1}=0$ より， $\sin(N+1)ka=0$ 。ここで，系の長さを $L=(N+1)a$ とおくと， k のとり得る値は， $0<k<\dfrac{\pi}{a}$ より,

$$kL=\pi\ ,\quad 2\pi\ ,\quad \cdots,\quad N\pi \quad \therefore \quad \underline{k=\frac{\pi}{L},\frac{2\pi}{L},\dots,\frac{N\pi}{L}}$$

(c) まず，温度 T に関する微分を用いて，$\langle E(\omega)\rangle$ を

$$\langle E(\omega)\rangle=\frac{\sum_{p=0}^{\infty}p\hbar\omega P_p(\omega)}{\sum_{p=0}^{\infty}P_p(\omega)}=\frac{\sum_{p=0}^{\infty}p\hbar\omega e^{-\frac{p\hbar\omega}{k_BT}}}{\sum_{p=0}^{\infty}e^{-\frac{p\hbar\omega}{k_BT}}}=k_{\mathrm{B}}T^2\frac{\partial}{\partial T}\ln\sum_{p=0}^{\infty}e^{-\frac{p\hbar\omega}{k_BT}}$$

と表そう。ここで，ln は底が e の自然対数であり， $\dfrac{\partial}{\partial T}$ は T に関する偏微分(他の変数を

定数としたTに関する微分)を表す。

和$\displaystyle\sum_{p=0}^{\infty} e^{-\frac{p\hbar\omega}{k_{\mathrm{B}}T}}$は幾何級数であり，$\dfrac{1}{1-e^{-\frac{\hbar\omega}{k_{\mathrm{B}}T}}}$となるから，

$$\langle E(\omega)\rangle = \frac{\hbar\omega e^{-\frac{\hbar\omega}{k_{\mathrm{B}}T}}}{1-e^{-\frac{\hbar\omega}{k_{\mathrm{B}}T}}} = \underline{\frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_{\mathrm{B}}T}}-1}}$$

（別解）

$\langle E(\omega)\rangle$の計算は，上のような微分計算をしなくても求めることができる。

$x=\dfrac{\hbar\omega}{k_{\mathrm{B}}T}$とおいて，$\langle E(\omega)\rangle$の分母の級数は$\dfrac{1}{1-e^{-x}}$であり，分子の級数は，

$$S=\hbar\omega\left(e^{-x}+2e^{-2x}+3e^{-3x}+\cdots\right)$$

であるから，

$$e^{-x}S=\hbar\omega(e^{-2x}+2e^{-3x}+\cdots)$$

より，

$$(1-e^{-x})S=\hbar\omega e^{-x}(1+e^{-x}+e^{-2x}+\cdots)=\frac{\hbar\omega e^{-x}}{1-e^{-x}}$$

$$\therefore\quad S=\frac{\hbar\omega e^{-x}}{(1-e^{-x})^2}$$

これより，

$$\langle E(\omega)\rangle = \frac{\dfrac{\hbar\omega e^{-x}}{(1-e^{-x})^2}}{\dfrac{1}{1-e^{-x}}} = \frac{\hbar\omega e^{-x}}{1-e^{-x}} = \frac{\hbar\omega}{e^{x}-1}$$

と得られる。

(d) 設問(b)より，kの間隔は$\dfrac{\pi}{L}$であるから，波数区間Δkにおけるモードの数は，

$$\frac{\Delta k}{\pi/L}=\underline{\frac{L}{\pi}\Delta k}$$

ただし，$\Delta k >> \dfrac{\pi}{L}$とする。

(e) ②式より，

$$\frac{d\omega}{dk}=\frac{1}{2}a\omega_0\cos\frac{1}{2}ka=\frac{1}{2}a\sqrt{\omega_0^2-\omega^2}$$

と書けるから，区間$d\omega$中のモード数dnは，

$$dn = \frac{L}{\pi}\Delta k = \frac{L}{\pi}\frac{dk}{d\omega}d\omega = \frac{L}{\pi}\left(\frac{d\omega}{dk}\right)^{-1}d\omega$$

$$= \frac{L}{\pi}\frac{2}{a}\frac{1}{\sqrt{\omega_0^2-\omega^2}}d\omega = \frac{2(N+1)}{\pi}\frac{1}{\sqrt{\omega_0^2-\omega^2}}d\omega$$

したがって，全角振動数領域にわたるモード数の総和は，与えられた積分を用いて，

$$\int dn = \int_0^{\omega_0}\frac{2(N+1)}{\pi}\frac{d\omega}{\sqrt{\omega_0^2-\omega^2}} = \frac{2(N+1)}{\pi}\int_0^1\frac{d\left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)}{\sqrt{1-\left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2}} = \underline{N+1} \approx \underline{N}$$

この結果は，波数kのとり得る数がNであったことから当然である。
結晶の全エネルギーE_Tは，

$$E_T = \frac{2N}{\pi}\int_0^{\omega_0}\langle E(\omega)\rangle\frac{d\omega}{\sqrt{\omega_0^2-\omega^2}} = \underline{\frac{2N}{\pi}\int_0^{\omega_0}\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_{\mathrm{B}}T}-1}\frac{d\omega}{\sqrt{\omega_0^2-\omega^2}}} \qquad \cdots③$$

(f) ③式の積分において，$x=\dfrac{\hbar\omega}{k_{\mathrm{B}}T}$とおき，$\hbar\omega = k_{\mathrm{B}}T\cdot x$，$\omega=\dfrac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar}x$，$d\omega=\dfrac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar}dx$と書き換えると，$x_0=\dfrac{\hbar\omega_0}{k_{\mathrm{B}}T}$とおいて，

$$E_T = \frac{2N}{\pi\hbar\omega_0}(k_{\mathrm{B}}T)^2\int_0^{x_0}\frac{x}{e^x-1}\frac{dx}{\sqrt{1-\left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar\omega_0}x\right)^2}} \qquad \cdots④$$

ここで，$T\to 0$のとき，$x_0\to\infty$より，④式の積分は，

$$\int_0^{x_0}\frac{x}{e^x-1}\frac{dx}{\sqrt{1-\left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar\omega_0}x\right)^2}} \approx \int_0^{\infty}\frac{x}{e^x-1}dx = \frac{\pi^2}{6} = \text{一定値}$$

よって，$E_T \propto T^2$となり，

$$C_V = \frac{dE_T}{dT}\underline{\propto T}$$

である。

一方，$T\to\infty$のとき，$e^{\frac{\hbar\omega}{k_{\mathrm{B}}T}}-1\to\dfrac{\hbar\omega}{k_{\mathrm{B}}T}$となるから，③式は，

$$E_T = \frac{2N}{\pi}k_{\mathrm{B}}T\int_0^{\omega_0}\frac{d\omega}{\sqrt{\omega_0^2-\omega^2}} = Nk_{\mathrm{B}}T$$

これより，$C_V = Nk_{\mathrm{B}} = \underline{一定}$となる。これは，３次元結晶でのデュロン・プティの法則を表している。

こうして，下記の$C_V - T$概略図を得る。