2016.7.15 J-PARC加速器概論 第6回

# 力学で理解する結晶物質における格子振動 そのBCS超伝導・熱容量・熱電効果に対する役割 および 中性子散乱による観測

#### 茨城大学フロンティア応用原子科学研究センター 岩佐和晃

Outline

- 力学での連成振動とモード
- 結晶物質における格子振動
- 熱容量:格子振動は熱力学での内部エネルギー
- 熱電効果:熱を伝える格子振動を抑えて電力を得る
- BCS超伝導:格子振動に引き寄せられる電子対
- 格子振動を中性子非弾性散乱で観測する











### 指で押してエネルギーと運動量(進行波の波数ベクトル)を与えた。



固定端の場合 (小形正男「振動・波動」(裳華房))



運動方程式を立てて、 (簡単のため、重力は無視)

$$M\frac{\mathrm{d}^2 x_1}{\mathrm{d}t^2} = -kx_1 - k(x_1 - x_2),$$
  

$$M\frac{\mathrm{d}^2 x_2}{\mathrm{d}t^2} = -k(x_2 - x_1) - k(x_2 - x_3),$$
  

$$M\frac{\mathrm{d}^2 x_3}{\mathrm{d}t^2} = -kx_3 - k(x_3 - x_2),$$

答えを仮定して解いてみる

$$x_n = A_n \cos(\omega t + \phi), \ A_n = A \sin(pn + \theta)$$
$$\omega = \sqrt{\frac{k}{M}2}, \ \sqrt{\frac{k}{M}(2 \pm \sqrt{2})}$$
角振動数
$$p = \frac{m}{N+1}\pi$$
 波数



![](_page_6_Picture_0.jpeg)

固定端の場合 (小形正男「振動・波動」(裳華房))

![](_page_6_Figure_2.jpeg)

## 結晶物質の動的構造

![](_page_7_Figure_1.jpeg)

### 結晶構造での原子間の結合

- 共有結合
- イオン結合(NaCl型結晶構造)
- 金属結合
- ファンデルワールス結合

Etc.

化学結合は原子間のバネ(原子間力)。 すなわち結晶構造は3D連成振動系 (=「ゴム連結電池系」に類似) "格子振動/弾性波/音波/フォノン(phonon)"

## 結晶物質の動的構造

![](_page_8_Figure_1.jpeg)

![](_page_8_Figure_2.jpeg)

![](_page_9_Figure_0.jpeg)

### 水分子 H<sub>2</sub>O の運動

(小形正男「振動・波動」(裳華房))

自由度 = (3個の原子) × (x, y, z 方向への原子変位) = 9、うち、

重心並進運動が3個(速度で表す運動エネルギー)

![](_page_10_Figure_4.jpeg)

振動が3個(振動数で表す運動エネルギー)

変角

水では、+,-の電気分極がある分子はつながっており、 その集団運動もある。・・・電子レンジでの加熱

![](_page_11_Figure_1.jpeg)

性質1:原子振動

● 物質が抱える内部エネルギー

## 熱力学第1法則 dU = d'Q + d'W外部から熱d'Qや仕事(エネル ギー)d'Wが加わると、内部エネル ギーがdUだけ変化する。

定積熱容量 
$$C_V = \frac{d'Q}{dT} = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V$$

熱容量が大きいと、熱が流入しても温度上昇が少なく、低温が長持ちする。

格子振動と熱容量

![](_page_12_Figure_1.jpeg)

![](_page_13_Figure_1.jpeg)

長さ*L* 

断面積 A

性質2:伝播する波動 ● エネルギーが伝播する。 ● 熱伝導を担う。

電気伝導と同様に、断面積が 大きく、長い距離を減衰せずに 格子振動が伝播すれば良い熱 伝導体。

 $H = \frac{\Delta Q}{\Delta t} = \kappa_L A \frac{T_2 - T_1}{L}$ 

放熱板は熱伝導が良い材料で作る・・・アルミニウムや銅 実際には流れる電子も熱を運んでいるから

- ●保温・耐熱材料は構造が不完全の方が良い
   ・・・真空(マイボトル),空気(発泡スチロール)
- 熱電変換素子(ペルチェ効果,ゼーベック効果)は、
   電気は流れても熱は流れない物質で作る
   ・・・伝播しない格子振動

![](_page_14_Figure_3.jpeg)

![](_page_15_Picture_0.jpeg)

T. Takabatake et al., Rev. Mod. Phys. 86, 669 (2014).

### 伝播しない格子振動 = 孤立した原子振動

● 熱電変換素子は、熱は流れない物質で作る

(T. Takabatake et al., Rev. Mod. Phys. 86, 669 (2014).

![](_page_16_Figure_3.jpeg)

![](_page_16_Figure_4.jpeg)

籠の中で孤立した原子は、 周りの原子が振動して 伝播する波をキャッチする (フォノン散乱過程)

1911年に水銀の超伝導 (4.2 K)を発見した Heike Kamerlingh Onnes

![](_page_17_Picture_2.jpeg)

![](_page_17_Figure_3.jpeg)

(A. Cho, Science 332, 190 (2011))

(http://www.aist.go.jp/aist\_j/press\_release/ pr2013/pr20130130/pr20130130.html)

通常は、不純物や欠陥、さらに原子の振動により電子は ランダムに散乱されてしまい電気抵抗が生じる。

![](_page_18_Figure_1.jpeg)

(A. Cho, Science 332, 190 (2011))

The Nobel Prize in Physics 1972 John Bardeen Leon Neil Cooper John Robert Schrieffer (http://www.nobelprize.org/nobel\_prizes/physics/) 性質3:超伝導

- 電気抵抗がなくなる
- 電子がクーパー対で運動

電子に引き寄せられて歪んだ格子 の振動が次の電子を引き寄せる (BCS理論: 超伝導転移温度が約 40Kまでの初期世代超伝導を説明)。

![](_page_18_Picture_8.jpeg)

![](_page_19_Picture_0.jpeg)

![](_page_19_Picture_1.jpeg)

指で押してエネルギーと運動量(進行波の波数ベクトル)を与えた。

中性子で原子を押してエネルギーと運動量を与えればよい!

#### 中性子とは

#### ■中性子とは、

1930~32年 α線衝撃によるBeなどからの透過性の高い放射線放出の観測

Chadwick:中性子であることの証明。

- クオーク模型 udd
- 半減期 =12.5 min.(β崩壊により陽子に変換)
- $m = 1.6749 \times 10^{-27} \text{ kg}$
- •電気的に中性 : 物質を透過しやすい(内部が見える)
- ・粒子性と波動性: de Broglie (ド・ブロイ)の物質波[量子力学の先駆け]

運動エネルギー: 
$$E = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 = \underline{h\omega} = h\nu$$
  
運動量:  $\mathbf{p} = \underline{m\mathbf{v}} = \underline{h\mathbf{k}}$   
波数:  $|\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda, \ \lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$ 

(プランク定数  $h = 2\pi\hbar$ , 1 meV [ミリ電子ボルト] = 1.602 × 10<sup>-22</sup> J)  $\lambda = 1.5406$ Å (Cu K<sub>a1</sub> X-ray) → E = 34.46 meV, v = 2567 m/s

#### •原子核を構成する要素

### ・・・原子核ポテンシャルによる散乱。 フェルミの擬ポテンシャル:中性子の波長よりも小さな原 子核がもたらす点状(デルタ関数状)のポテンシャル $\mathbf{r} = 0$ にある原子核の $V_{ m N}({f r})=rac{2\pi\hbar^2}{m}b\delta({f r})$ ポテンシャル 中性子 •スピン 1/2 の「磁石」 原子 ・・・磁気モーメントによる散乱。 物質内部磁場 中性子の磁気モーメント $\mu_n = -1.913 \mu_N$ $H(\mathbf{r})$ 中性子磁子 $\mu_{\rm N} = 5.051 \times 10^{-27}$ J/T << $\mu_{\rm B}$ 中性子は物質の中の磁場H(r)を感じる。 $V_{\rm M}(\mathbf{r}) = -\boldsymbol{\mu}_{\rm n} \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r})$

### 弾性散乱と非弾性散乱

弾性散乱

![](_page_22_Figure_2.jpeg)

散乱において中性子のエネルギーは保存: ブラッグの式  $2d\sin\theta = \lambda$ 

![](_page_22_Figure_4.jpeg)

# X線散乱と中性子散乱のパイオニア

Electron arrangement inside a crystal is a diffractive grating for X-ray

![](_page_23_Picture_2.jpeg)

![](_page_23_Picture_3.jpeg)

![](_page_23_Picture_4.jpeg)

Max von Laue (Novel Prize in Physics1914)

W. H. Bragg W. L. Bragg (Novel Prize in Physics 1915)

Nuclei and magnetic-moment arrangement are diffractive gratings for neutron

![](_page_23_Picture_8.jpeg)

B. N. Brockhouse C. G. Shull (Novel Prize in Physics 1994)

(http://www.nobelprize.org/nobel\_prizes/physics/)

![](_page_23_Picture_11.jpeg)

世界結晶年2014 International Year of Crystallography 2014 寺田寅彦らによる X線回折 中谷宇吉郎による 雪の結晶

ちなみに去年は国際光年(IYL2015).

### 日本原子力研究開発機構東海研+高エネルギー加速器研究機構 *J-PARC*: Japan Proton Accelerator Research Complex

![](_page_24_Picture_1.jpeg)

### チョッパー型パルス中性子分光器

![](_page_25_Picture_1.jpeg)

### チョッパー型パルス中性子分光器

![](_page_26_Figure_1.jpeg)

#### チョッパー型パルス中性子分光器

#### ・非弾性散乱:チョッパー分光器

![](_page_27_Figure_2.jpeg)

![](_page_28_Figure_0.jpeg)

# 孤立した原子振動の観測

● 熱電変換素子は、熱は流れない物質で作る

(T. Takabatake et al., Rev. Mod. Phys. 86, 669 (2014).

![](_page_29_Figure_3.jpeg)

![](_page_29_Figure_4.jpeg)

籠の中で孤立した原子は伝播する振 動をキャッチする(フォノン散乱過程)。

#### 逆転配置型パルス中性子分光器

#### •非弾性散乱 Inelastic scattering

:逆転配置型分光器 Inverted geometry spectrometer

![](_page_30_Figure_3.jpeg)

### 逆転配置型パルス中性子分光器

(結晶解析ハンドブック(日本結晶学会「結晶解析ハンドブック」編集委員会),共立出版(1999))

![](_page_31_Figure_2.jpeg)

### 逆転配置型パルス中性子分光器

![](_page_32_Figure_1.jpeg)

①中性子源からのパルス中性子のパルス幅を高性能高速ディスクチョッパーで 30 マイクロ秒に整形
 ②整形されたパルス中性子を試料に照射

③試料で散乱した中性子を結晶アナライザーで検出器へ反射

④検出器で検出されたデータを解析

(http://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/20130116140000/)

パルス中性子逆転配置型分光器による分子運動モードの観測

逆転配置結晶解析型分光器 (Inverted geometry crystal-analyzer spectrometer) DNA @ J-PARC (平成25年1月16日 J-PARCセンタープレスリリース)

(http://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/20130116140000/)

γ-ピコリン N-オキシド(N-oxy γ-picolin) (S. Ikeda et al., JPSJ 60, 3340 (1991))

![](_page_33_Figure_4.jpeg)

#### 2016.7.15 J-PARC加速器概論のまとめ

# 力学で理解する結晶物質における格子振動

- 連成振動の力学をミクロにすれば、 結晶物質における格子振動
- 熱容量:格子振動は熱力学での内部エネルギー
- 熱電効果:熱を伝える格子振動の制御が鍵
- BCS超伝導:格子振動で引き寄せられる電子対
- 中性子は、自身のエネルギーと運動量を 物質に与えて格子振動を作ることができ、また 物質からもらって格子振動をなくすこともできる。
- これが非弾性散乱スペクトルとして観測できる。