



Introduction to Lattice Dynamics

M. T. Dove(著)

Cambridge University Press 1993年

大阪大学大学院工学研究科マテリアル生産科学専攻

藤井 進

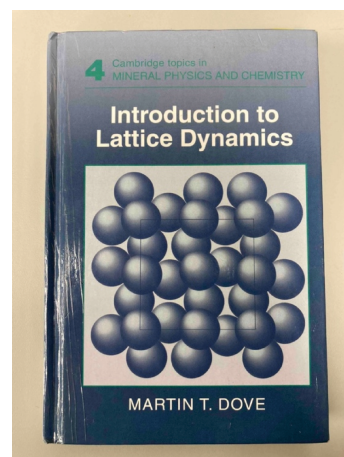


図 教科書の表紙.

この教科書は、筆者が学部4年生の時に指導教員であった大阪大学吉矢准教授(当時)から紹介いただいたものです。私は当時、熱電変換材料におけるフォノン熱伝導というテーマを与えられ、研究を始めたところでした。先輩に教わりながら、分子動力学法という手法で計算を行うと、よく分からないながらも何かしらの結果が出てきます。その結果を解釈するには、熱を伝えるキャリアの一つであるフォノン、つまり格子動力学(Lattice Dynamics)の知識が必須です。学部での固体物性論の授業である程度勉強はしていたものの、熱伝導の仕組みを解釈するほどの本質的な理解は出来ておらず、再学習が必要でした。その時に手に取ったのがこの本になります。英語で書かれているということもあり、実際に読み進めたのは修士1年生以降だったと記憶しています。研究の時はもちろん、博士論文の執筆の際など、長年に渡りお世話になっています。

本書は全12章に加えて、付録が8章ついています。特徴的なのは、学部生などの初学者から研究者まで、幅広くカバーできる内容になっていることです。特に第1章から第9章までは、この教科書の著者である M. T. Dove 先生がケンブリッジ大学で学部生に向けて行った授業が元になっています。金属に限らず、セラミックスなどの実例を多く挙げながら理論を説明してくれるため、研究者にとっても実用的な理解を得ることができます。

以下に、この教科書の内容を簡単に紹介します。第1章から第5章は特に初学者向けで、格子動力学の概念を理解できるよう配慮された構成になっています。第1章はなぜ原子のダイナミクスが重要なのかの説明から始まり、原子間に働く力、結晶中の波など、格子動力学を扱うために必要な事前知識がまとめられています。第2章では最も単純な調和近似という考え方を導入し、金属等の比較的簡単な構造を元に格子動力学の基礎部分が説明されています。第3章ではそれを NaCl などの二元系(イオン結合性、共有結合性など)に拡張します。第4章、第5章では格子振動の大きさやそれが熱力学諸量に与える影響などが、よく知られた近似式とともに議論されています。

第5章までで基礎的な理解が得られるので、第6章以降

ではその一般化や物性との関連を議論して行きます。第6章では、今まで単純な結晶構造で簡易的に考えてきたフォノンにまつわる式を一般化し、複雑な系でも適用可能な形に拡張します。ここで現れる式は今日の著名な計算パッケージなどにも実装されているものであり、私自身も博士課程時代でのプログラム開発の際に非常に参考にしました。第7章や第8章では弾性や熱伝導度、相変態など、フォノンと様々な物性との関連が示されます。調和近似を超えた非調和振動の効果もここで議論されます。

第9章以降は、フォノンに関する研究を実施する方々に実用的に役立つ内容になっています。第9章、第10章では中性子散乱や赤外分光法、ラマン分光法を使って、フォノンを測定する方法についての説明がなされています。この辺りは、実験データを解釈するという意味で、様々な方におすすめできます。第11章はフォノンの量子力学的な立場からの説明がなされます。そして第12章では、分子動力学法という計算手法を使って、格子振動を解析する方法が記されています。付録の章は Ewald 法によるクーロン力の計算など、本章よりマニアックな内容になっていますが、様々な式やその導出が載っており、高度な知識を必要とする方には非常に参考になります。付録の最後には出版当時までに公開されたフォノン分散曲線の文献リストが載っていますが、今日では第一原理格子動力学法によって網羅的に計算されたフォノンデータベースなどもありますので⁽¹⁾、その辺りは時代の進歩を感じるどころです。

以上のように、フォノンや熱物性に関わる研究をしている方々にとっては必読の一冊となっています。特に第1章から第8章あたりは、初学者であった私にとって大いに参考になりましたので、これから研究を始める、あるいは実施している学生に是非読んでいただきたいです。

文 献

- (1) Phonon database at Kyoto university, <http://phonondb.mtl.kyoto-u.ac.jp> (2022年11月22日閲覧).
(2022年11月1日受理)[doi:10.2320/materia.62.61]