课程信息

- **第三次作业（截止时间3月17日）：**
- **章节测试二三章合并**

  1. 阅读黄昆《固体物理》第三章3-1至3-4,3-8,3-10,3-11小结，胡老师讲义3-1,2-2，并解释以下重要概念：晶格振动、**格波**、色散关系、光学波、声学波、玻恩-卡门边界条件、态密度、热导率、爱因斯坦模型、德拜模型

- 2. 总结一下，声子与光子的共同特点与区别。

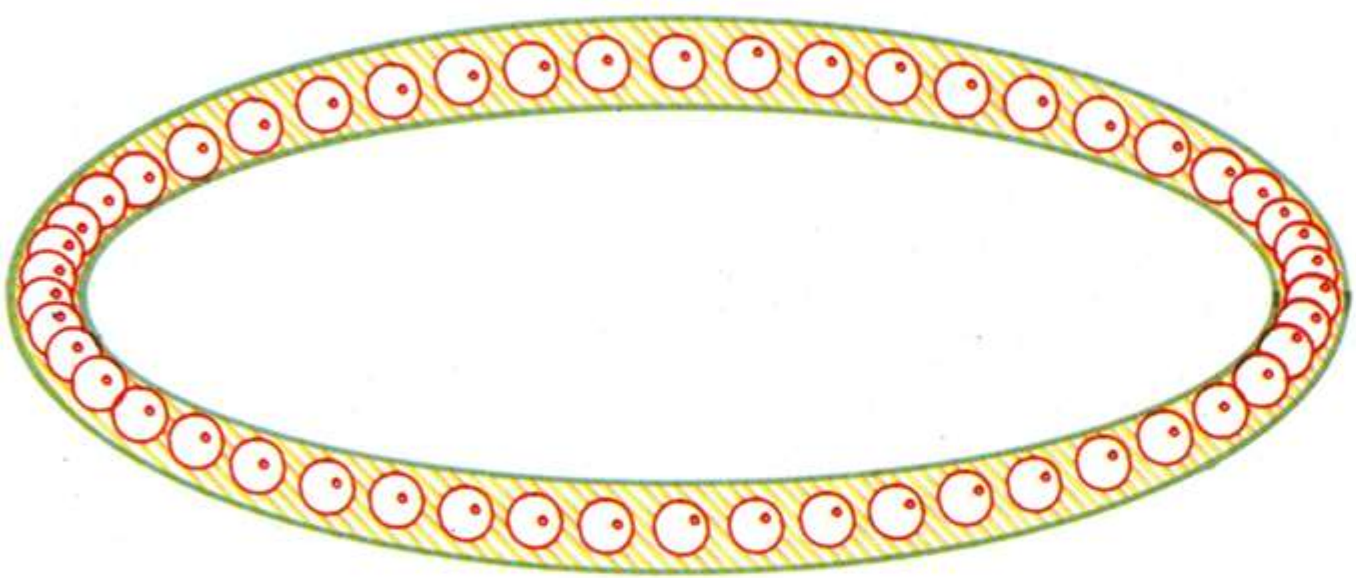
  3. 在研究晶格振动时，为什么要将晶格振动量子化，从而引入声子的概念？

- 4. （2020年期末考试题）小明将1万个直径为1cm，重量为100g的小铁球用长度为10cm，弹性系数为1000N/m的弹簧连成一个圆环。1）估算此圆环中能够传播的机械波的最大频率及最短波长，并与晶体中的格波做比较。2）此系统中是否存在声子？为什么？

玻恩一卡门（Born-Karman）周期性边界条件

—— 一维单原子晶格看作无限长，所有原子是等价的，每个原子的

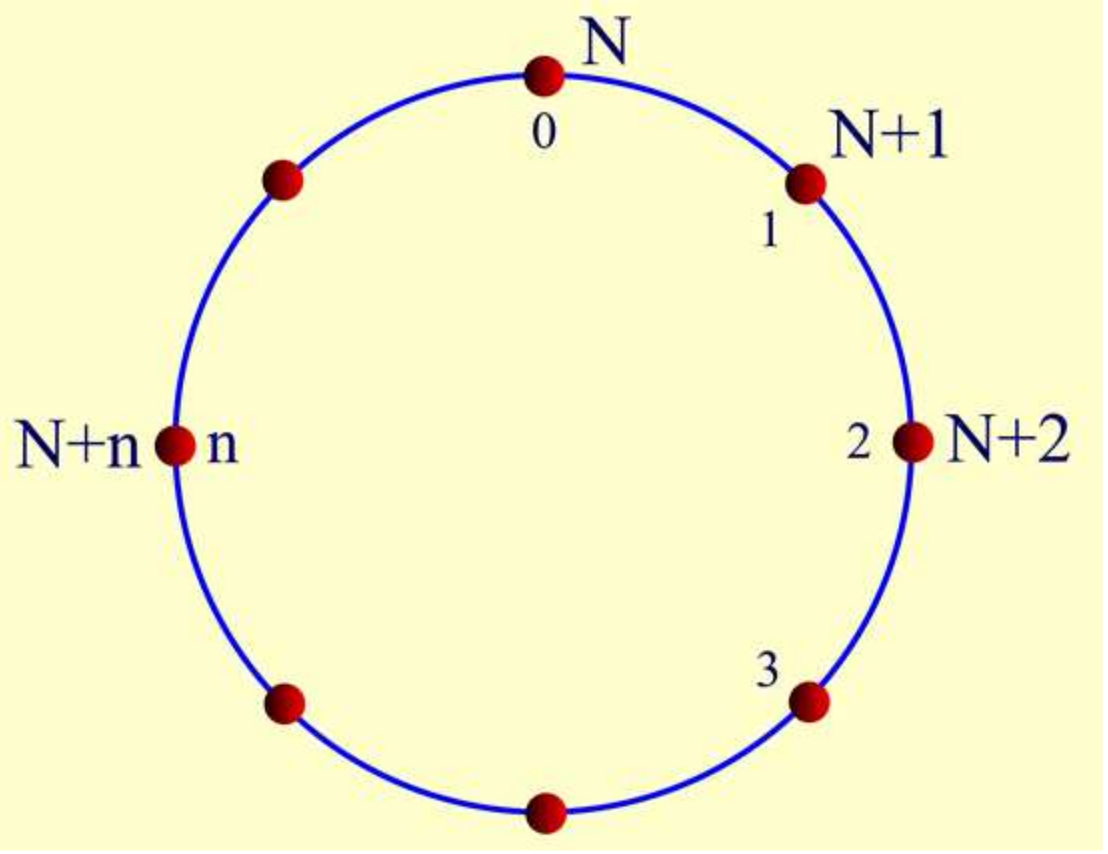
—— 实际的晶体为有限，形成的链不是无穷长，链两头的原子不能用中间原子的运动方程来描述



⌧ N个原子头尾相接形成一个环链，保持了所有原子等价的特点

⌧ N很大，原子运动近似为直线运动

⌧ 处理问题时要考虑到环链的循环性

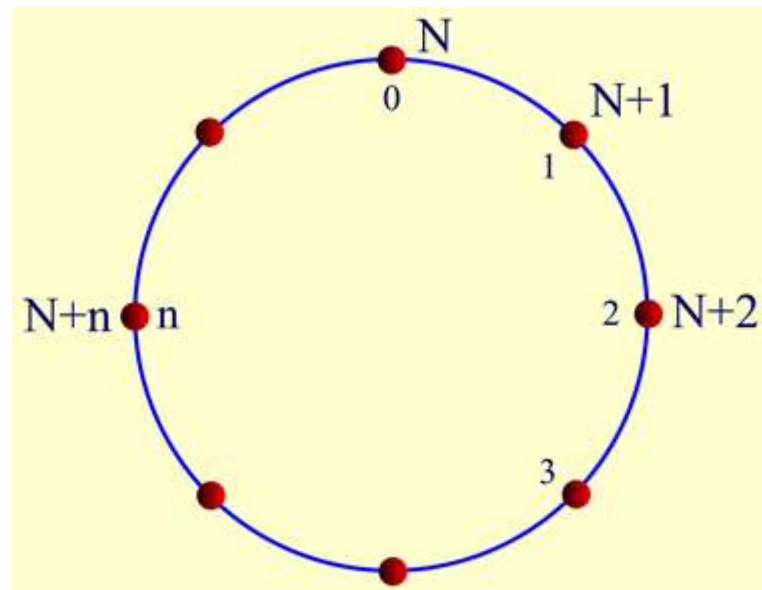


设第n个原子的位移 μ_n

再增加N个原子之后，第N+n个原子的位移 μ_{N+n}

则有 $\mu_{N+n} = \mu_n \quad Ae^{i[\omega t-(N+n)aq]} = Ae^{i[\omega t-naq]}$

要求 $e^{-iNaq} = 1 \quad Naq = 2\pi h$



$$q = \frac{2\pi}{Na} \times h$$ —— h为整数

波矢的取值范围 $-\frac{\pi}{a} < q \le \frac{\pi}{a}$

$$h = -\frac{N}{2}+1,\ -\frac{N}{2}+2,\ -\frac{N}{2}+3,\ \cdots 0, \cdots \frac{N}{2}-2,\ \frac{N}{2}-1,\ \frac{N}{2}$$

$$-\frac{N}{2} < h \le \frac{N}{2}$$ 波矢 $$q = \frac{2\pi}{Na} \times h$$

***h* — *N*个整数值，波矢*q* —— 取*N*个不同的分立值**

—— 第一布里渊区包含N个状态

每个波矢在第一布里渊区占的线度 $q = \dfrac{2\pi}{Na}$

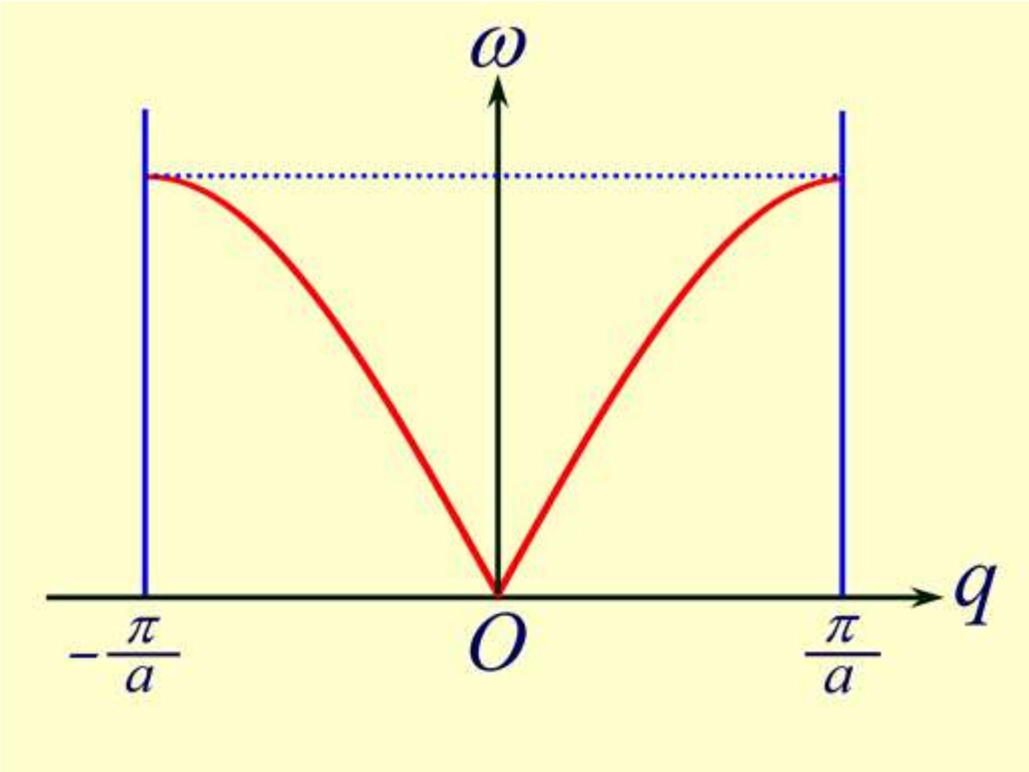
第一布里渊区的线度 $\dfrac{2\pi}{a}$

第一布里渊区状态数 $$\frac{2\pi / a}{2\pi / Na} = N$$

格波的色散关系

$$\omega^2 = \frac{4\beta}{m}\sin^2\left(\frac{aq}{2}\right)$$

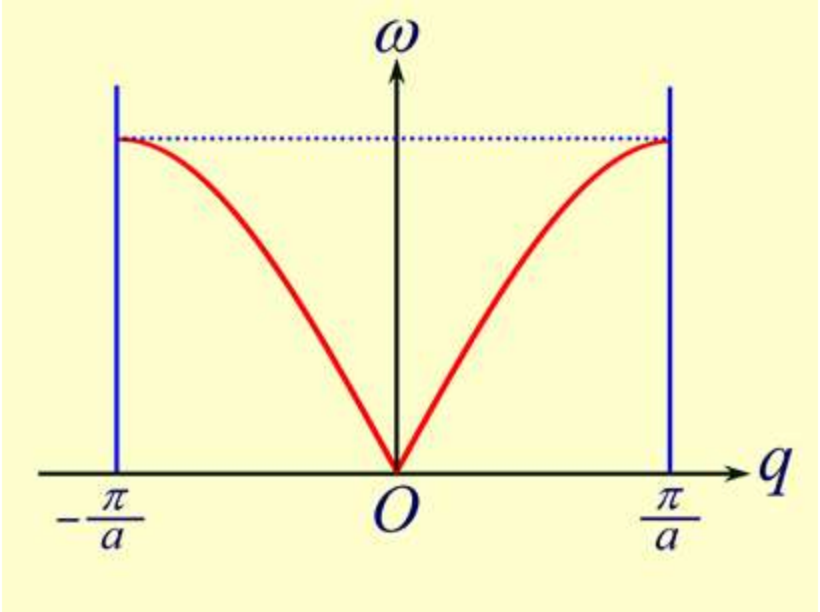
$$\omega = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}\left|\sin\left(\frac{aq}{2}\right)\right|$$



☒ 频率是波数的偶函数

☒ 色散关系曲线具有周期性

色散关系 $\omega = 2\sqrt{\dfrac{\beta}{m}}\left|\sin(\dfrac{aq}{2})\right|$ —— q空间的周期 $\dfrac{2\pi}{a}$



频率极小值 $\omega_{\min} = 0$

频率极大值 $\omega_{\max} = 2\sqrt{\beta / m}$

$$0 \le q \le \frac{\pi}{a} \qquad 0 \le \omega \le 2\sqrt{\beta / m}$$

只有频率在 $0 \le \omega \le 2\sqrt{\beta / m}$ 之间的格波才能在晶体中传播，

其它频率的格波被强烈衰减

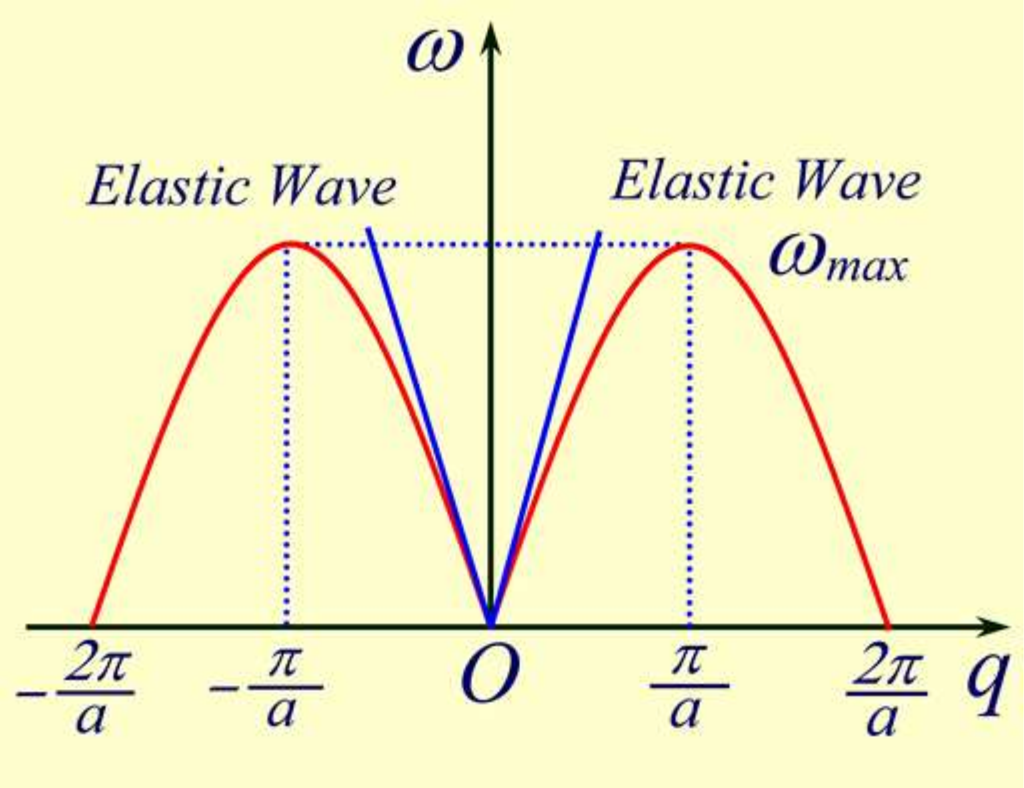
格波 —— 长波极限情况 $(q \to 0,\ \lambda >> a)$

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}\left|\sin(\frac{aq}{2})\right|$$

当 $q \to 0$

$$\sin(\frac{qa}{2}) \approx \frac{qa}{2}$$

$$\omega = a\sqrt{\beta / m}\,|q|$$



$$\omega = V_{Elastic}\,q$$ —— 一维单原子格波的色散关系与连续介质中弹性波的色散关系一致

相邻原子之间的作用力 $f = \beta\delta$ $f = \beta a(\frac{\delta}{a})$

长波极限情况 $\omega = a\sqrt{\beta / m}\,|q|$ $c = a\sqrt{\beta / m}$

格波传播速度 $c = \sqrt{\frac{\beta a}{m / a}} = \sqrt{\frac{K}{\rho}}$ $K = \beta a$

$c = \omega / q$

—— 伸长模量

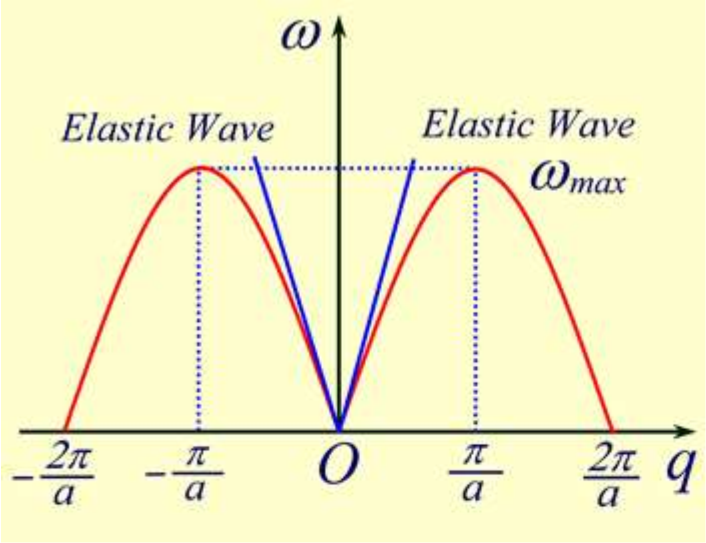
连续介质弹性波相速度 $V_{Elastic} = \sqrt{K / \rho}$

K, ρ —— 连续介质的弹性模量和介质密度

—— 长波极限下，一维单原子晶格格波可以看作是弹性波

—— 晶格可以看成是连续介质

格波 —— 短波极限情况 $(q \to \dfrac{\pi}{a})$



$$\omega = 2\sqrt{\beta / m}\left|\sin(\frac{aq}{2})\right|$$

$$\omega_{\max} = 2\sqrt{\beta / m}$$

长波极限下 $(q \to 0)$，相邻两个原子之间的位相差

$$q(n+1)a - qna = qa \Rightarrow 0$$

—— 一个波长内包含许多原子，晶格看作是连续介质

短波极限下 $q \Rightarrow \dfrac{\pi}{a}$ $\qquad \lambda = \dfrac{2\pi}{q} = 2a$

—— 相邻两个原子振动的位相相反

长波极限下 $q \Rightarrow 0$

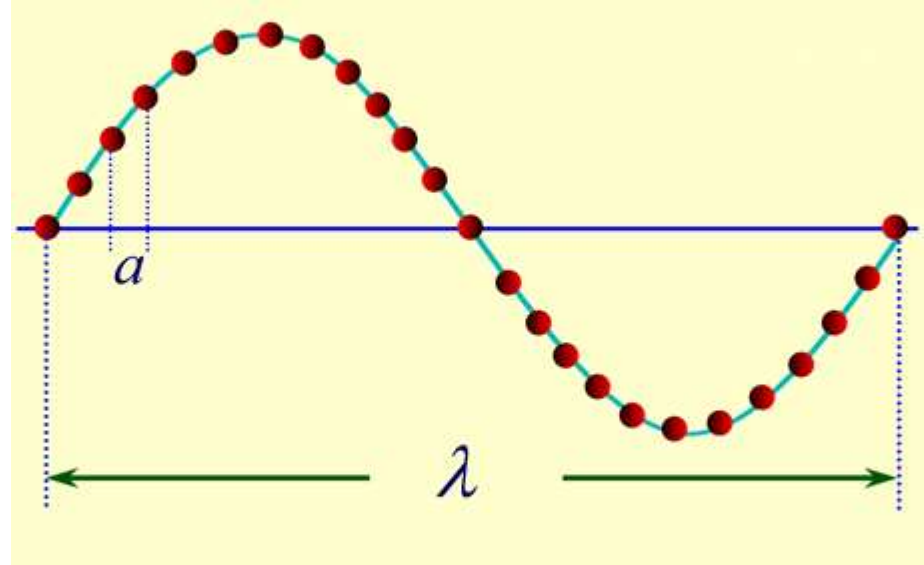
相邻两个原子振动位相差

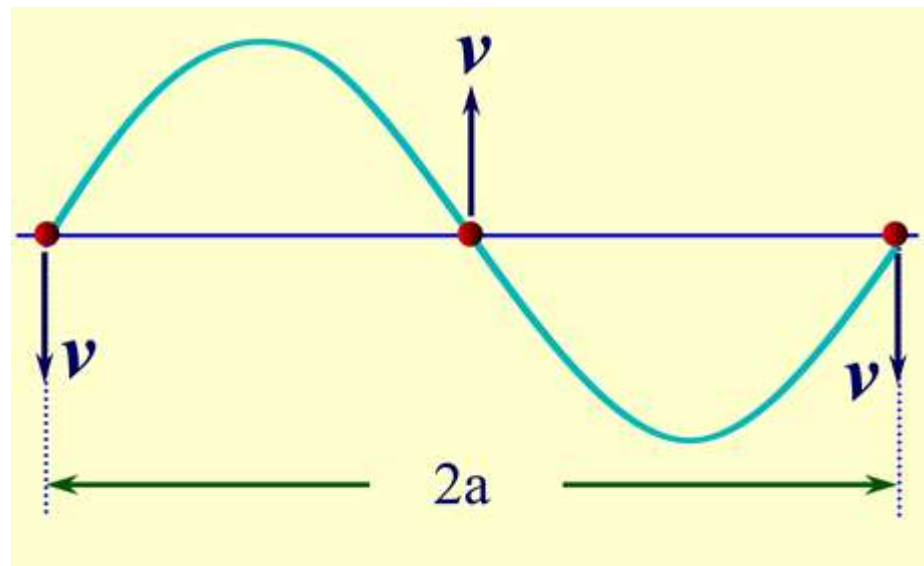
$$q(n+1)a - qna = qa \Rightarrow 0$$

$$\lambda = \frac{2\pi}{q} \to \infty$$

短波极限下 $q \Rightarrow \frac{\pi}{a}$

$$\lambda = \frac{2\pi}{q} = 2a$$





晶格振动 —— 声子体系

—— 声子是一种元激发，可与电子或光子发生作用

—— 声子具有能量和动量，看作是准粒子

—— 晶格振动的问题 ⇒ 声子系统问题的研究

—— 每个振动模式在简谐近似条件下都是独立的

§ 3.3 一维双原子链 声学波和光学波

一维复式格子的情形 —— 一维无限长链

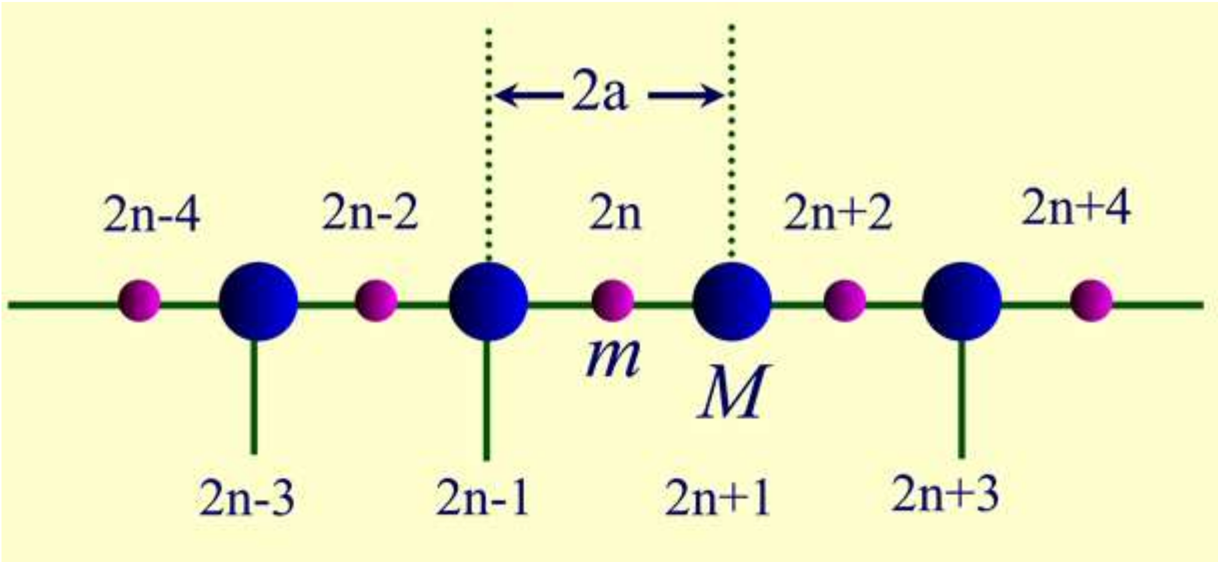
—— 两种原子m和M (M > m) 构成一维复式格子

—— M原子位于2n-1， 2n+1， 2n+3 ……

—— m原子位于2n， 2n+2， 2n+4 ……

—— 同种原子间的距离2a为晶格常数

—— 系统有N个原胞



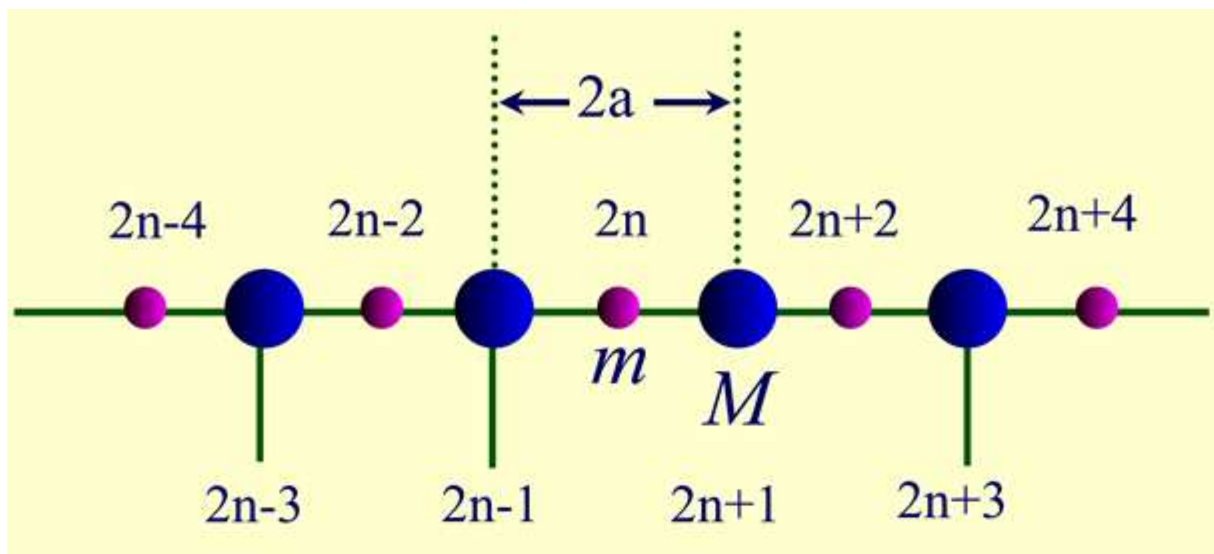
第2n+1个M原子的方程 $M\ddot{\mu}_{2n+1}=-\beta(2\mu_{2n+1}-\mu_{2n+2}-\mu_{2n})$

第2n个m原子的方程 $m\ddot{\mu}_{2n}=-\beta(2\mu_{2n}-\mu_{2n+1}-\mu_{2n-1})$

—— N个原胞，有2N个独立的方程

方程解的形式 $\mu_{2n}=Ae^{i[\omega t-(2na)q]}$ *and* $\mu_{2n+1}=Be^{i[\omega t-(2n+1)aq]}$

—— 两种原子振动的振幅A和B一般来说是不同的



第2n+1个M原子 $M\ddot{\mu}_{2n+1} = -\beta(2\mu_{2n+1} - \mu_{2n+2} - \mu_{2n})$

第2n个m原子 $m\ddot{\mu}_{2n} = -\beta(2\mu_{2n} - \mu_{2n+1} - \mu_{2n-1})$

方程的解 $\mu_{2n} = Ae^{i[\omega t-(2na)q]}$

$$\mu_{2n+1} = Be^{i[\omega t-(2n+1)aq]}$$

$$\left.\begin{aligned} &+(2\beta - m\omega^2)A - (2\beta\cos aq)B = 0 \\ &-(2\beta\cos aq)A + (2\beta - M\omega^2)B = 0 \end{aligned}\right\}$$

—— *A*、*B*有非零的解，系数行列式为零

$$\begin{vmatrix} 2\beta - m\omega^2 & -2\beta\cos aq \\ -2\beta\cos aq & 2\beta - M\omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

$$\omega^2 = \beta\frac{(m+M)}{mM}\{1 \pm [1 - \frac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2 aq]^{\frac{1}{2}}\}$$

——一维复式晶格中存在两种独立的格波

$$\omega_-^2 = \beta\frac{(m+M)}{mM}\{1 - [1 - \frac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2 aq]^{\frac{1}{2}}\}$$

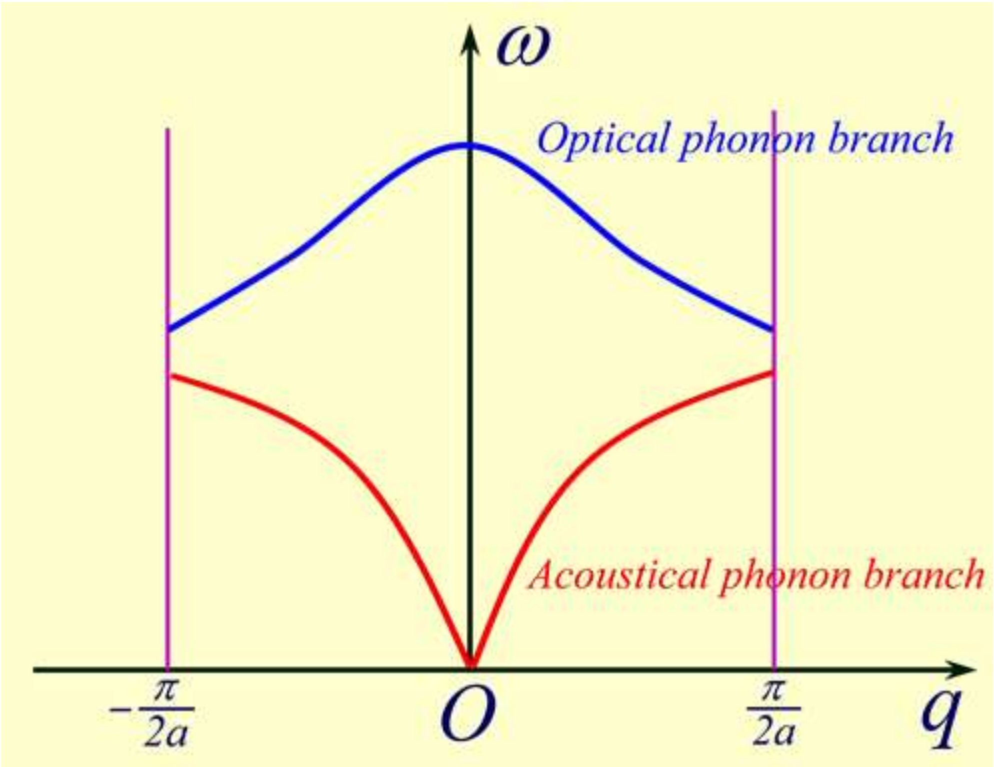
$$\omega_+^2 = \beta\frac{(m+M)}{mM}\{1 + [1 - \frac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2 aq]^{\frac{1}{2}}\}$$

$$\omega_{-}^{2}=\beta\frac{(m+M)}{mM}\{1-[1-\frac{4mM}{(m+M)^{2}}\sin^{2}aq]^{\frac{1}{2}}\}$$ —— 声学波

$$\omega_{+}^{2}=\beta\frac{(m+M)}{mM}\{1+[1-\frac{4mM}{(m+M)^{2}}\sin^{2}aq]^{\frac{1}{2}}\}$$ —— 光学波

—— **ω与q**之间存在着两种不同的色散关系

—— 一维复式格子存在两种独立的格波



两种格波的振幅

$$\omega_{\pm}^{2}=\beta\frac{(m+M)}{mM}\{1\pm[1-\frac{4mM}{(m+M)^{2}}\sin^{2}aq]^{\frac{1}{2}}\}$$

$$(2\beta-m\omega^{2})A-(2\beta\cos aq)B=0$$

$$-(2\beta\cos aq)A+(2\beta-M\omega^{2})B=0$$

$$(\frac{B}{A})_{+}=-\frac{m\omega_{+}^{2}-2\beta}{2\beta\cos aq}$$ —— 光学波

$$(\frac{B}{A})_{-}=-\frac{m\omega_{-}^{2}-2\beta}{2\beta\cos aq}$$ —— 声学波

q的取值

M和m原子振动方程

$$\mu_{2n} = Ae^{i[\omega t-(2na)q]}$$

$$\mu_{2n+1} = Be^{i[\omega t-(2n+1)aq]}$$

相邻原胞之间位相差 $2aq$ $\qquad -\pi < 2aq \le \pi$

波矢**q**的值 $\qquad -\frac{\pi}{2a} < q \le \frac{\pi}{2a}$ —— 第一布里渊区

布里渊区大小 π / a

采用周期性边界条件 $\qquad \mu_{N+n} = \mu_n \qquad N(2aq) = 2\pi h$

$$q = \frac{h}{2aN} 2\pi$$

***q*的取值** $q = \frac{h}{2aN} 2\pi$ —— **h为整数**

每个波矢在第一布里渊区占的线度 $q = \frac{\pi}{Na}$

第一布里渊区允许的*q*值的数目 $\frac{\pi}{a} / \frac{\pi}{Na} = N$

—— 晶体中的原胞数目

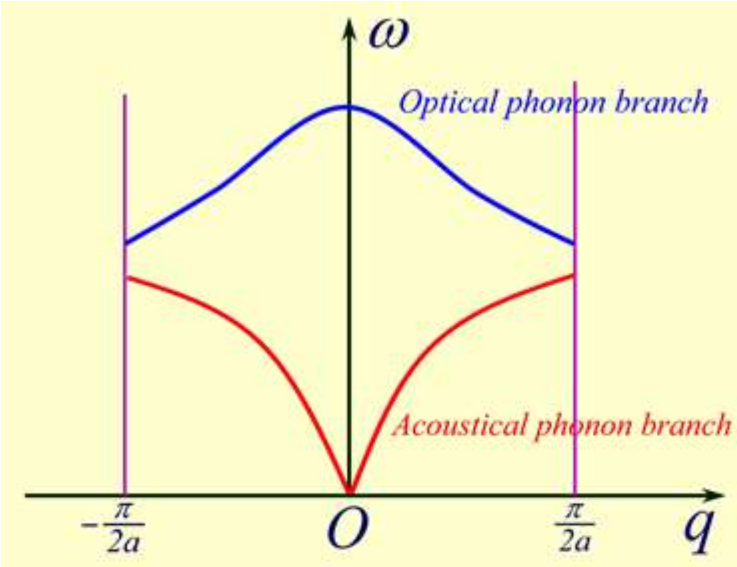
—— 对应一个*q*有两支格波：一支声学波和一支光学波

—— 总的格波数目为2N： 原子的数目: 2N

色散关系的特点

短波极限 $q \to \pm \frac{\pi}{2a}$

两种格波的频率



$$(\omega_-)_{\max} = (\frac{\beta}{mM})^{\frac{1}{2}}\{(m+M)-(M-m)\}^{\frac{1}{2}} = (\frac{2\beta}{M})^{\frac{1}{2}}$$

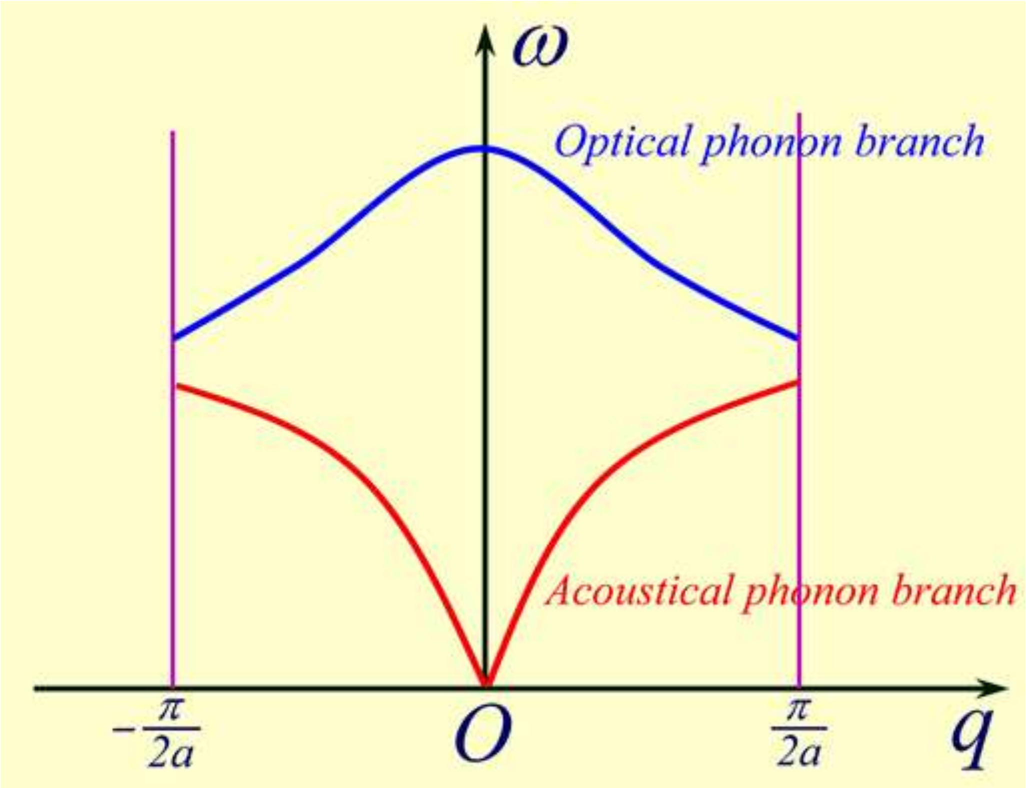
$$(\omega_+)_{\min} = (\frac{\beta}{mM})^{\frac{1}{2}}\{(m+M)+(M-m)\}^{\frac{1}{2}} = (\frac{2\beta}{m})^{\frac{1}{2}}$$

因为 **M>m** $(\omega_+)_{\min} > (\omega_-)_{\max}$

$(\omega_+)_{\min} > \omega > (\omega_-)_{\max}$——不存在格波

频率间隙

$(\omega_+)_{\min} \sim (\omega_-)_{\max}$

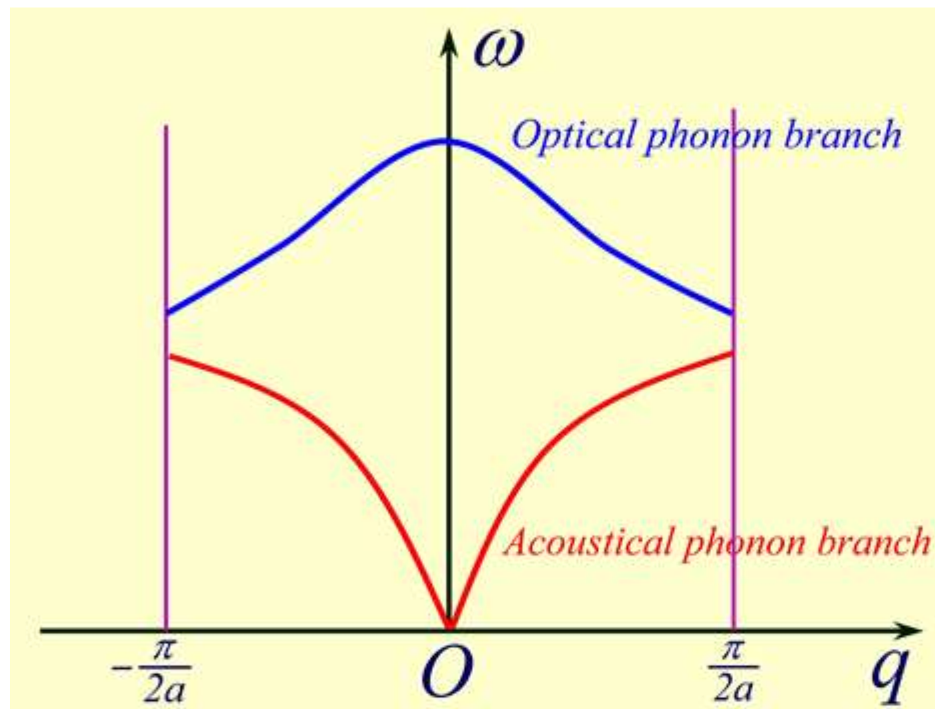


长波极限 $q \to 0$

声学波 $\omega_-^2 = \beta \dfrac{(m+M)}{mM}\{1-[1-\dfrac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2 aq]^{\frac{1}{2}}\}$

$\dfrac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2(aq) << 1$ 应用 $\sqrt{1-x} = 1 - x/2$

$$\omega_- = \sqrt{\frac{2\beta}{m+M}}\left|\sin(qa)\right|$$



—— 声学波的色散关系与一维布拉伐格子形式相同

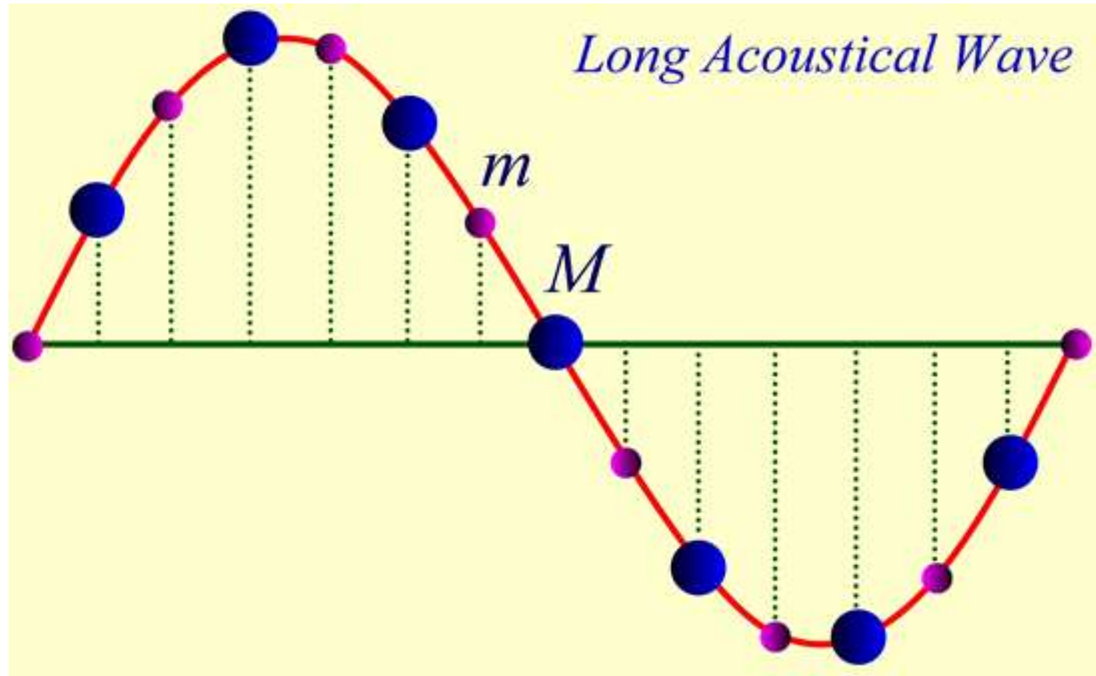
长声学波中相邻原子的振动

$$\omega_{-} \approx (a\sqrt{\frac{2\beta}{m+M}})q$$

$$q = 0, \quad \omega_{-} = 0$$

$$(\frac{B}{A})_{-} = -\frac{m\omega_{-}^{2} - 2\beta}{2\beta\cos aq}$$

$$(\frac{B}{A})_{-} = 1$$



—— 原胞中的两个原子振动的振幅相同，振动方向一致

—— 代表原胞质心的振动

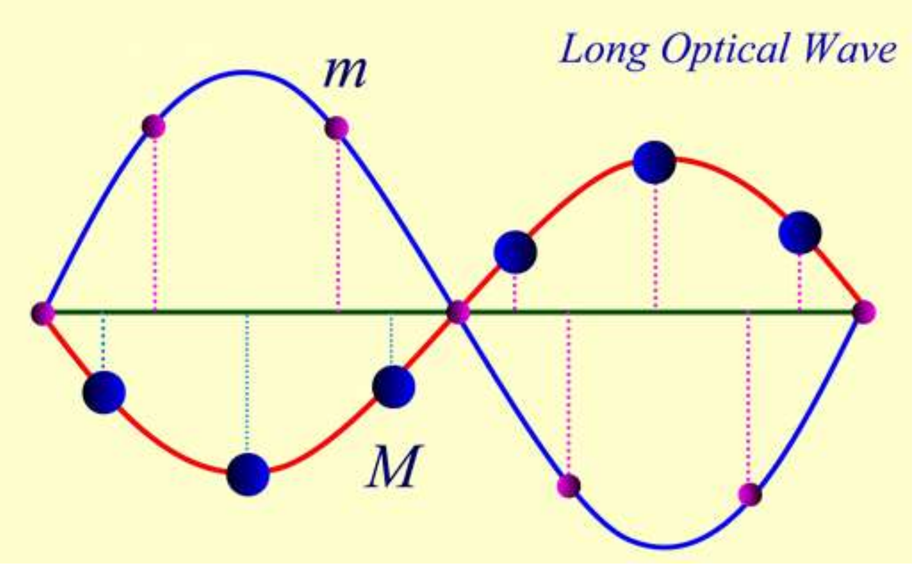
长波极限 $q \to 0$

光学波 $\omega_+^2 = \beta \dfrac{(m+M)}{mM}\{1+[1-\dfrac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2 aq]^{\frac{1}{2}}\}$

$$\frac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2(aq) << 1$$

$$\omega_+ \approx \sqrt{\frac{2\beta}{\mu}}, \quad \mu = \frac{mM}{m+M}$$

$$\left(\frac{B}{A}\right)_+ = -\frac{m}{M} \qquad \left(\frac{B}{A}\right)_+ = -\frac{m\omega_+^2 - 2\beta}{2\beta\cos aq}$$



—— 长光学波同种原子振动位相一致，相邻原子振动相反

—— 原胞质心保持不变的振动，原胞中原子之间相对运动

一维晶格振动

格波：晶体中的原子都在它的平衡位置附近不断地作微振动，由于原子间的相互关联，以及晶体的周期性，这种原子振动在晶体中形成格波。

振动很微弱时，势能展式中只保留到$(\delta r)^2$项, 3次方以上的高次项均忽略掉的近似为简谐近似(忽略掉作用力中非线性项的近似)。

$$f_{nk} = -\left(\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}r^2}\right)_{r_0} x_{nk} = -\beta_{nk} x_{nk}$$

$$\beta_{nk} = \left(\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}r^2}\right)_{r_0}$$

弹性恢复力系数

在简谐近似下，格波可以分解成许多简谐平面波的线性叠加。

模型

运动方程

试探解

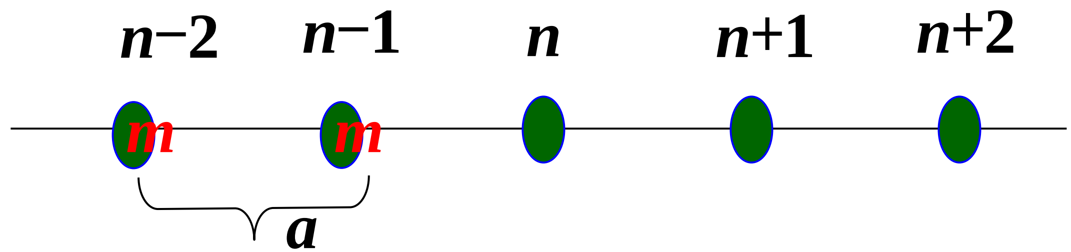
色散关系

波矢q范围

B--K条件

波矢q取值

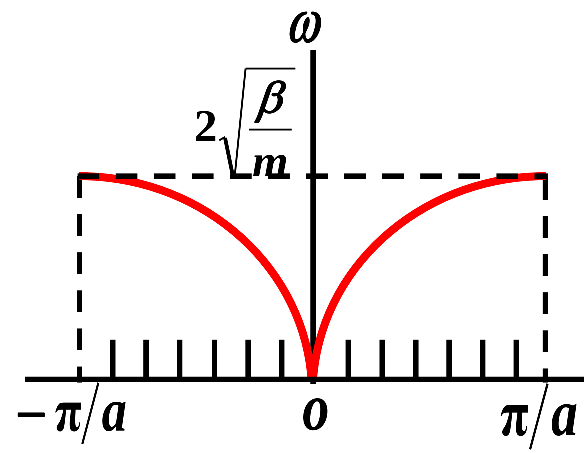
一维无限长单原子链，m，a，β



$$m\ddot{x}_n = -\beta(x_n - x_{n-1}) - \beta(x_n - x_{n+1})$$

$$x_n = Ae^{-i(\omega t - naq)}$$

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}\left|\sin\frac{aq}{2}\right|$$



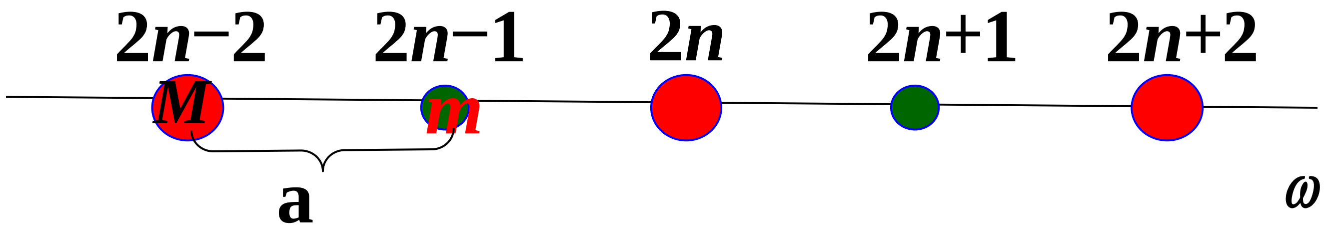
$$-\frac{\pi}{a} < q \le \frac{\pi}{a}$$

玻恩-卡曼周期性边界条件:

$$x_n = x_{n+N}$$

晶格振动波矢的数目=晶体的原胞数

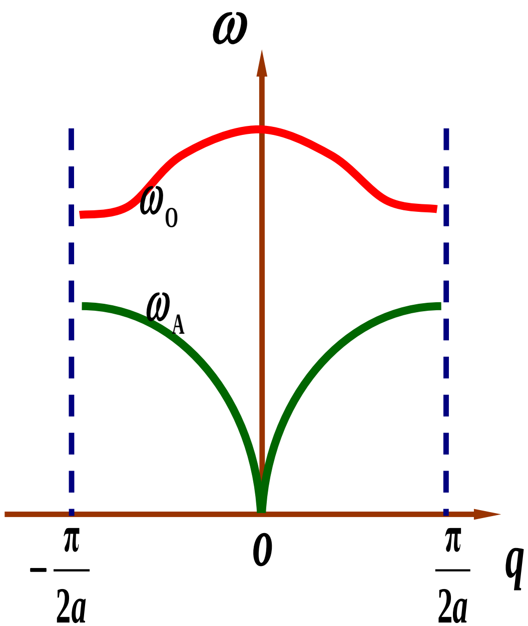
一维双原子链振动



$$\begin{cases} M\ddot{x}_{2n} = \beta\left(x_{2n+1} + x_{2n-1} - 2x_{2n}\right) \\ m\ddot{x}_{2n+1} = \beta\left(x_{2n+2} + x_{2n} - 2x_{2n+1}\right) \end{cases}$$

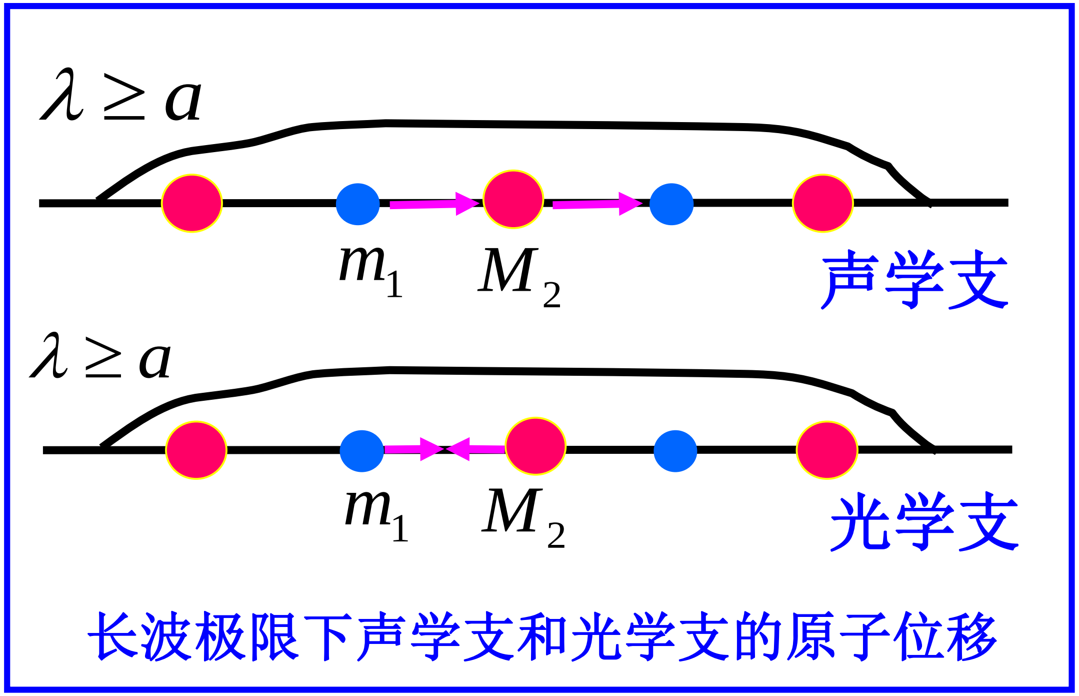
$$x_{2n+1} = Ae^{-i[\omega t-(2n+1)aq]}$$

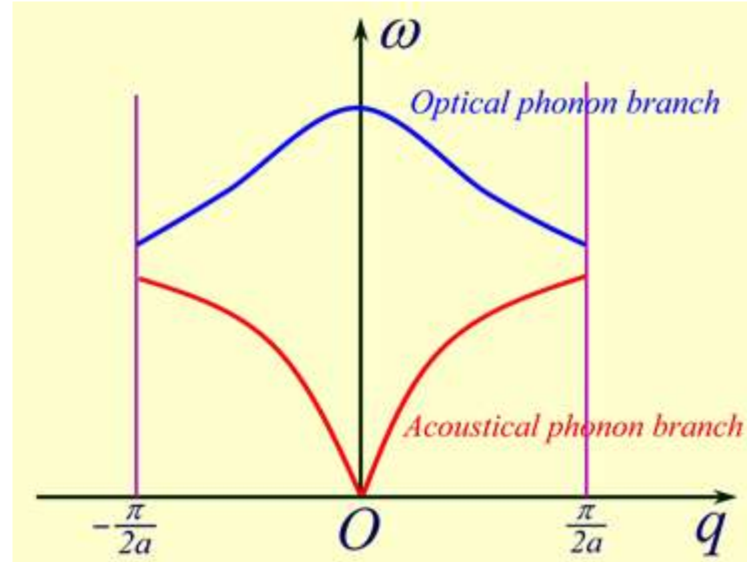
$$x_{2n} = Be^{-i(\omega t-2naq)}$$



$$\boxed{\omega^2 = \frac{\beta}{mM}\{(m+M)\pm\sqrt{m^2+M^2+2mM\cos 2aq}\}}$$

$$-\frac{\pi}{2a} < q \le \frac{\pi}{2a} \qquad x_{2n} = x_{2(n+N)},$$





<u>长光学波代表同一原胞中两个原子振动方向相反</u>，原胞中不同原子作相对振动，质量大的振幅小，质量小的振幅大— <u>质心保持不变的振动</u>！

长光学波代表原胞中两个原子的相对振动！

第三章 晶格振动与晶体的热学性质

- 3.4：三维晶格的振动
- 3.5：晶体热容的量子理论
- 3.6：热膨胀（不作要求）
- 3.7：晶格的热传导（不作要求）
- 3.8：离子晶体的长光学波 （不作要求）

§ 3.4 三维晶格的振动

三维复式格子 —— 一个原胞中有**n**个原子

原子的质量 $m_1, m_2, m_3, \cdots m_n$

晶体的原胞数目 $N = N_1 N_2 N_3$

第l个原胞的位置 $\vec{R}(l) = l_1\vec{a}_1 + l_2\vec{a}_2 + l_3\vec{a}_3$

原胞中各原子的位置 $\vec{R}\begin{pmatrix} l \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{R}\begin{pmatrix} l \\ 2 \end{pmatrix}, \quad \vec{R}\begin{pmatrix} l \\ 3 \end{pmatrix}, \quad \cdots \quad \vec{R}\begin{pmatrix} l \\ n \end{pmatrix}$

各原子偏离格点的位移 $\vec{\mu}\binom{l}{1}, \ \vec{\mu}\binom{l}{2}, \ \vec{\mu}\binom{l}{3}, \ \cdots \ \vec{\mu}\binom{l}{n}$

第**k**个原子运动方程 $m_k \ddot{\mu}_\alpha \begin{pmatrix} l \\ k \end{pmatrix} = -2\beta\mu_\alpha \begin{pmatrix} l \\ k \end{pmatrix} + \cdots$

$\alpha = 1,\ 2,\ 3$

—— 原子在三个方向上的位移分量

—— 一个原胞中有**3n**个类似的方程

方程右边是原子位移的线性齐次函数，其方程的解

$$\vec{\mu}\begin{pmatrix} l \\ k \end{pmatrix} = \vec{A}_k e^{i[\omega t - \vec{R}\begin{pmatrix} l \\ k \end{pmatrix}\cdot\vec{q}]}$$

将方程解代回**3n**个运动方程

—— **3n**个线性齐次方程 $m_k \omega^2 A_{k\alpha} = \sum_{k'\beta} C_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} \vec{q} \\ k, k' \end{pmatrix} A_{k'\beta}$

$$A_{1x}, A_{1y}, A_{1z};\ A_{2x}, A_{2y}, A_{2z}; \cdots\ A_{nx}, A_{ny}, A_{nz};$$

$$\alpha = 1,\ 2, 3;\ \beta = 1,\ 2,\ 3;\ k' = 1,\ 2,\ \cdots\ n,\ \neq k$$

—— 系数行列式为零条件，得到**3n**个 $\omega_j\ (j = 1, 2, 3, \cdots 3n)$

长波极限 $q \to 0$ **3**个 $\omega_j \propto q$

—— $\vec{A}_1, \vec{A}_2, \vec{A}_3, \cdots \vec{A}_n$ 趋于一致

—— 三个频率对应的格波描述不同原胞之间的相对运动

—— **3支声学波**

—— 3n－3支长波极限的格波描述一个原胞中各原子间的相对运动

—— 3n－3支光学波

结论：晶体中一个原胞中有n个原子组成，有3支声学波和3n－3支光学波

三维晶格中的波矢

波矢 $\vec{q} = x_1\vec{b}_1 + x_2\vec{b}_2 + x_3\vec{b}_3$ x_1, x_2, x_3 —— 3个系数

$\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ —— 波矢空间的3个基矢

—— 倒格子基矢

采用波恩一卡曼边界条件

$$\mu_x\begin{pmatrix} l \\ k \end{pmatrix} = A_{kx}e^{i[\omega t - R_x\begin{pmatrix} l \\ k \end{pmatrix}\cdot x_1 b_1]} = A_{kx}e^{i[\omega t - (N_1 a_1 + R_x\begin{pmatrix} l \\ k \end{pmatrix})\cdot x_1 b_1]}$$

$$\mu_y\begin{pmatrix} l \\ k \end{pmatrix} = A_{ky}e^{i[\omega t - R_y\begin{pmatrix} l \\ k \end{pmatrix}\cdot x_2 b_2]} = A_{ky}e^{i[\omega t - (N_2 a_2 + R_y\begin{pmatrix} l \\ k \end{pmatrix})\cdot x_2 b_2]}$$

$$\mu_z\begin{pmatrix} l \\ k \end{pmatrix} = A_{kz}e^{i[\omega t - R_z\begin{pmatrix} l \\ k \end{pmatrix}\cdot x_3 b_3]} = A_{kz}e^{i[\omega t - (N_3 a_3 + R_z\begin{pmatrix} l \\ k \end{pmatrix})\cdot x_3 b_3]}$$

$$N_1 a_1 x_1 b_1 = 2\pi h_1,\ \ N_2 a_2 x_2 b_2 = 2\pi h_2,\ \ N_3 a_3 x_3 b_3 = 2\pi h_3$$

$$x_1 = \frac{2\pi}{N_1 a_1 b_1} \Rightarrow x_1 = \frac{h_1}{N_1}$$

$$x_2 = \frac{2\pi}{N_2 a_2 b_2} \Rightarrow x_2 = \frac{h_2}{N_2}$$

$$x_3 = \frac{2\pi}{N_3 a_3 b_3} \Rightarrow x_3 = \frac{h_3}{N_3}$$

波矢

$$\vec{q} = \frac{h_1}{N_1}\vec{b}_1 + \frac{h_2}{N_2}\vec{b}_2 + \frac{h_3}{N_3}\vec{b}_3$$

波矢空间一个点占据的体积

$$V^* = \frac{\vec{b}_1}{N_1} \cdot \left(\frac{\vec{b}_2}{N_2} \times \frac{\vec{b}_3}{N_3}\right) = \frac{v_0{}^*}{N}$$

—— 倒格子原胞体积

状态密度 $\frac{N}{v_0{}^*} = \frac{N}{\vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3)} = \frac{N v_0}{(2\pi)^3} = \frac{V}{(2\pi)^3}$

波矢的取值_ $h_1h_2h_3$

—— 原子振动波函数

$$\vec{\mu}\begin{pmatrix} l \\ k \end{pmatrix} = \vec{A}_k e^{i[\omega t - \vec{R}\binom{l}{k}\cdot\vec{q}]}$$

$$e^{-i\vec{R}(l)\cdot\vec{q}}$$ —— 不同原胞之间位相联系

波矢改变一个倒格矢

$$\vec{G}_n = n_1\vec{b}_1 + n_2\vec{b}_2 + n_3\vec{b}_3$$

$$\vec{q} \Rightarrow \vec{q} + \vec{G}_n \qquad \vec{R}(l)\cdot\vec{G}_n = 2\pi(l_1 n_1 + l_2 n_2 + l_3 n_3)$$

$$e^{-i\vec{R}(l)\cdot(\vec{G}_n+\vec{q})} = e^{-i\vec{R}(l)\cdot\vec{q}}$$

—— 原子振动状态一样

k的取值限制在一个倒格子原胞中 —— 第一布里渊区

$$-\frac{b_1}{2} < q_x \le \frac{b_1}{2} \qquad q_x = \frac{h_1}{N_1} b_1 \qquad -\frac{N_1}{2} < h_1 \le \frac{N_1}{2}$$

$$-\frac{b_2}{2} < q_y \le \frac{b_2}{2} \qquad q_y = \frac{h_2}{N_2} b_2 \qquad -\frac{N_2}{2} < h_2 \le \frac{N_2}{2}$$

$$-\frac{b_3}{2} < q_z \le \frac{b_3}{2} \qquad q_z = \frac{h_3}{N_3} b_3 \qquad -\frac{N_3}{2} < h_3 \le \frac{N_3}{2}$$

$$\vec{q} = \frac{h_1}{N_1}\vec{b}_1 + \frac{h_2}{N_2}\vec{b}_2 + \frac{h_3}{N_3}\vec{b}_3$$ —— $N = N_1 N_2 N_3$个取值

对应于一个波矢**q** **3支声学波**和**3n－3支光学波**

总的格波数目 $$N\cdot(3+3n-3)=3nN$$

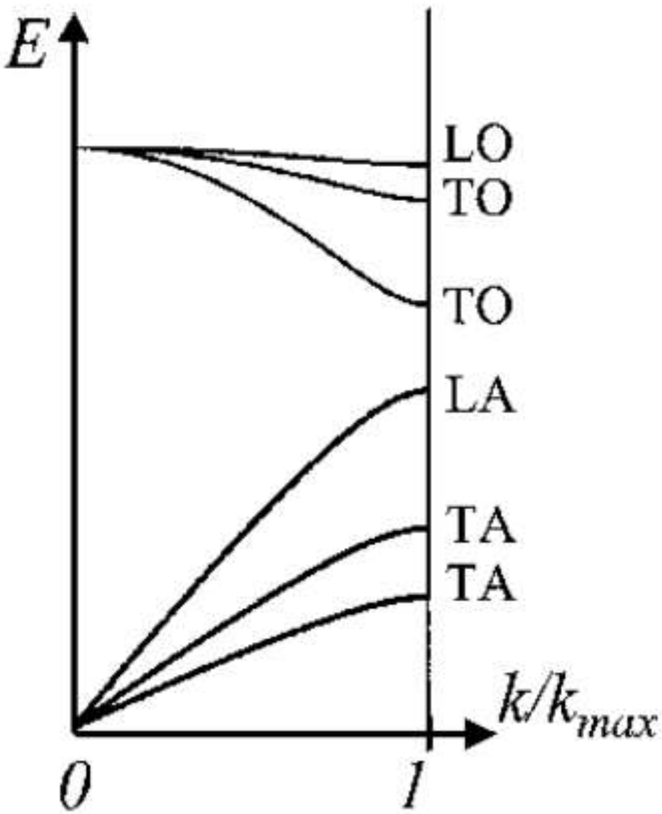
—— 晶体中原子的坐标数目

晶格振动总的能量 $$E=\sum_{i=1}^{3nN}[n_i(q)+\frac{1}{2}]\hbar\omega_i(q)$$

$\hbar\omega_i(q)$ —— 晶格振动能量量子

—— 声子：***Phonon***

典型的三维色散谱



横向声学(TA), 纵向声学 (LA), 横向光学 (TO) 和纵向光学 (LO)支。注意到纵向支的能量高于横向支。

双原子晶格的三维色散谱**(*s*=2)**

声子的概念

由于晶格振动引起的行波，并不对应于任何一个原子，而是整个晶格的性质。我们必须把晶体的集体激发当作一个整体来讨论格波。每一种振动称为一个振动模，由波矢 q 和频率 $\omega(q)$ 描述。

在量子力学图像下，格波与其他对象（如电子、电磁波或光子）发生相互作用。因此，把格波当成一种准粒子，会方便我们的讨论，即声子，它具有动量和（量子化的）能量:

$$\begin{cases} p = \hbar q \\ E = \omega(q) \end{cases}$$

声子：晶格振动的量子力学描述

晶格振动的能量是量子化。类比于电磁波的光子（ **photon** ），这种能量量子称为声子（**phonon**），晶体中的弹性波由声子构成。

具有角频率ω的弹性模，能量是

$$E=(n+1/2)\hbar\omega$$

这里声子模被激发到量子数n，即这个振动模有n个声子占据；$\frac{1}{2}\hbar w$是声子的零点能，是一种量子力学效应。