四川师范大学本科毕业论文

考虑次近邻相互作用下的一维原子链的教学与设计

学生姓名	宋心如
院系名称	物理与电子工程学院
专业名称	物理学
班　级	2020 级 3 班
学　号	2020070325
指导教师	程才
完成时间	2024 年 5 月 10 日

四川师范大学学位论文原创性声明

本人声明：所呈交学位论文 考虑次近邻相互作用下的一维原子链的教学与设计 ，是本人在指导老师 程才 指导下，独立进行研究工作所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本论文不含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的作品或成果。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本声明的法律结果由本人承担。

本人承诺：已提交的学位论文电子版与论文纸本的内容一致。如因不符而引起的学术声誉上的损失由本人自负。

学位论文作者： 宋心如 签字日期： 2024 年 5 月 10 日

四川师范大学学位论文版权使用授权书

本人同意所撰写学位论文的使用授权遵照学校的管理规定：

学校作为申请学位的条件之一，学位论文著作权拥有者须授权所在大学拥有学位论文的部分使用权，即：1）已获学位的学生必须按学校规定提交印刷版和电子版学位论文，可以将学位论文的全部或部分内容编入有关数据库供检索；2）为教学、科研和学术交流目的，学校可以将公开的学位论文或解密后的学位论文作为资料在图书馆、资料室等场所或在有关网络上供阅读、浏览。

学位论文作者签名：宋心如 指导老师签名： 程才

签字日期： 2024 年 5 月 10 日 签字日期：2024 年 5 月 10 日

考虑次近邻相互作用下的一维原子链的教学与设计

物理学专业

学生姓名：宋心如 指导教师：程才

摘要：在固体物理中，晶格的格点代表着原子的平衡位置，晶格振动指原子在格点附近的微小振动。晶格振动是研究固体宏观性质和微观过程的重要基础，对晶体的热学性质、电学性质、光学性质、磁性等很多物理性质的研究都具有重要作用。

本文将在黄昆先生的固体物理学教材的基础上，总结一维单原子链和一维双原子链的色散关系，并且分析考虑最近邻和次近邻相互作用下的一维原子链格波的求解以及其色散关系。最后，本文将提出一维原子链的教学方案，帮助学生更好地理解和学习固体物理中有关一维原子链振动的问题。

关键词：固体物理学；一维原子链；次近邻；教学设计

Teaching Design of One Dimensional Atomic Chain Considering Next Neighbor Interaction

Specialty: Physics

Undergraduate: Xinru Song **Supervisor:**Cai Cheng

ABSTRACT： In solid-state physics, lattice points represent the equilibrium positions of atoms, and lattice vibrations refer to the tiny oscillations of atoms near lattice points. Lattice vibrations serve as the fundamental basis for studying both macroscopic properties and microscopic processes of solids, playing a crucial role in investigating various physical properties of crystals such as thermal, electrical, optical, and magnetic properties.

This article will summarize the dispersion relations of one-dimensional single-atom chains and one-dimensional double-atom chains, and analyze the solution of one-dimensional atomic chain lattice waves considering nearest and next-nearest neighbor interactions, as well as their dispersion relations. Finally, a teaching plan for one-dimensional atomic chains will be proposed to assist students in better understanding and learning the vibration of one-dimensional atomic chains in solid-state physics.

Keywords： Solid-state physics; One-dimensional single-atom chain; next-nearest neighbor; Lattice vibration; instructional design；

目　录

考虑次近邻相互作用下的一维原子链的教学与设计

1 引言

固体物理中，晶格振动是研究固体微观状态和宏观性质的重要切入点，对晶体的热学性质、电学性质、光学性质、磁性等很多物理性质的研究有着很重要的作用。

固体物理作为本科物理学专业的必修课之一，课程的内容随着研究的不断深入而日渐丰富，涉及的领域也越来越多，初学者接触时常常会感到复杂和难以理解。固体物理学习的入门知识就是晶格振动。同时一维原子链作为经典晶格振动理论的基本模型，它能够既简单又形象的反映出晶体中原子的振动特点，便于扩展到二维三维晶格振动的分析与研究，从而能够进一步阐述晶体的宏观物理性质。在教学过程中，一维原子链也正是由于它比较简洁直观的特性，可以让学生们较为适应的接触和理解晶格振动，所以一维原子链的晶格振动的学习，对学生们进入学习固体物理的状态有着非凡的意义。

在固体物理的教材[1]中，一维单原子链和一维双原子链的求解大多数采用经典力学的简谐近似和最近邻近似，从而得到格波解和色散关系。关于晶格振动的色散关系，杨兴强等[2][3]对一维晶格的振动以及色散关系进行了研究，王端阳[4]和孙美慧等[5][6][8]分别对一维双原子链和三原子链的格波解和色散关系进行了研究。董佳豪和张立新[7]讨论了一般情况下，原胞由多种原子组成的一维原子链，它们的晶格振动情况。

为了拓展一维原子链的讲解，本文将会增加考虑次近邻相互作用下的一维单原子链和一维双原子链的振动情况。很多人[9]对考虑次近邻相互作用的原子链进行了研究。此前王登龙、颜晓红和唐翌[10]和人曾在论文中讨论了考虑次近邻相互作用下一维单原子链的格波以及它的色散关系，并且绘制了考虑次近邻相互作用的色散关系图像。陈志远和童国平[11][12][13]等论文中分析了不同近邻下一维双原子链的色散关系。

结合上述论文，本文将会总结一维原子链的振动状况，并且增加考虑次近邻相互作用时它们的色散关系的求解。最后制定一维原子链的教学方案，帮助固体物理的学习和理解。

2 一维单原子链

2.1 一维单原子链的格波

2.1.1 格波

如（图 2.1.1），图上格点，表示是一维原子链中的第$n-2$至$n+2$这五个原子的平衡位置，由于所有原子都在不停的振动，图下表示的是原子链上某一时刻原子所在的位置。处于平衡位置时，相邻两个原子之间的距离为 a（即原包体积为 a），当原子处于非平衡位置时，偏移原来所处平衡位置的位移表示为μ_{n-2}，，μ_{n-1}，μ_n，μ_{n+1}，μ_{n+2}，…

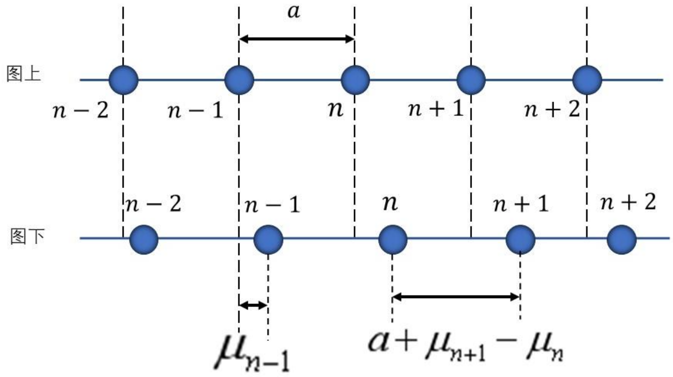


图 2.1.1 一维单原子链的平衡位置（上）和实际位置（下）

常采用简谐近似处理晶格问题。在某个Q_j，这个简正坐标下，晶格中的所有原子以相同的频率振动，振动方程表示为：

$$\mu_i=\frac{a_{ij}}{\sqrt{m_i}}Asin(\omega_j t+\delta) \tag{2.1.1}$$

作为一个简正振动，表示的是整个晶体所有原子在这个简正坐标Q_j，都参与的振动，这是一个振动模。这个振动模具有波的形式，也被称为格波。

2.1.2 一维单原子链格波的求解

假设只有最近邻原子间存在相互作用，每个原子的质量为m，相邻两个原子相互作用的势能可以表示为：

$$\nu(a+\delta)=\nu(a)+(\frac{d\nu}{dr})_a\delta+\frac{1}{2}(\frac{d^2\nu}{dr^2})_a\delta^2+High\ \ items$$

由平衡条件$(\frac{d\nu}{dr})_a=0$，去掉高阶项，相互作用势可表示为：

$$\nu(a+\delta)=\nu(a)+\frac{1}{2}(\frac{d^2\nu}{dr^2})_a\delta^2 \tag{2.1.2}$$

再由相邻原子间的作用力$F=-\frac{d\nu}{d\delta}\approx-\beta\delta$ ，

其中$\beta = \left(\frac{d^2v}{dr^2}\right)_a$，为恢复力常数。

如图（2.1.2）所示，一维单原子链第 n 个原子，它受到左右两个近邻原子对它的作用力， 根据牛顿定律，可以表示为：

$$m\frac{d^2\mu_n}{dt^2} = \beta(\mu_{n+1} - \mu_n) - \beta(\mu_n - \mu_{n-1}) = \beta(\mu_{n+1} + \mu_{n-1} - 2\mu_n) \tag{2.1.3}$$

在这个 n 个相同原子组成的一维原子链中，就有 n 个解, 再由(2.1.1)的简谐近似，μ_n的通解表示为：

$$\mu_n = Ae^{i(\omega t - naq)} \tag{2.1.4}$$

2.2 一维单原子链的色散关系

2.2.1 色散关系的求解

结合 (2.1.4) $\mu_n = Ae^{i(\omega t - naq)}$则有：

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

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

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

带入(2.1.3) $m\frac{d^2\mu_n}{dt^2} = \beta(\mu_{n+1} + \mu_{n-1} - 2\mu_n)$得

$$-m\omega^2 = \beta\left(e^{iaq} + e^{-iaq} - 2\right) \tag{2.2.1}$$

又由$cos\, aq = \frac{e^{iaq}+e^{-iaq}}{2}$，得色散关系:

$$\omega^2 = \frac{4\beta}{m} sin^2\left(\frac{aq}{2}\right) \tag{2.2.2}$$

格波的色散关系，为振动频率和波矢之间的关系，由 (2.2.2)公式可得：

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}\left|sin\left(\frac{aq}{2}\right)\right| \tag{2.2.3}$$

一维单原子链色散关系示意图如下：

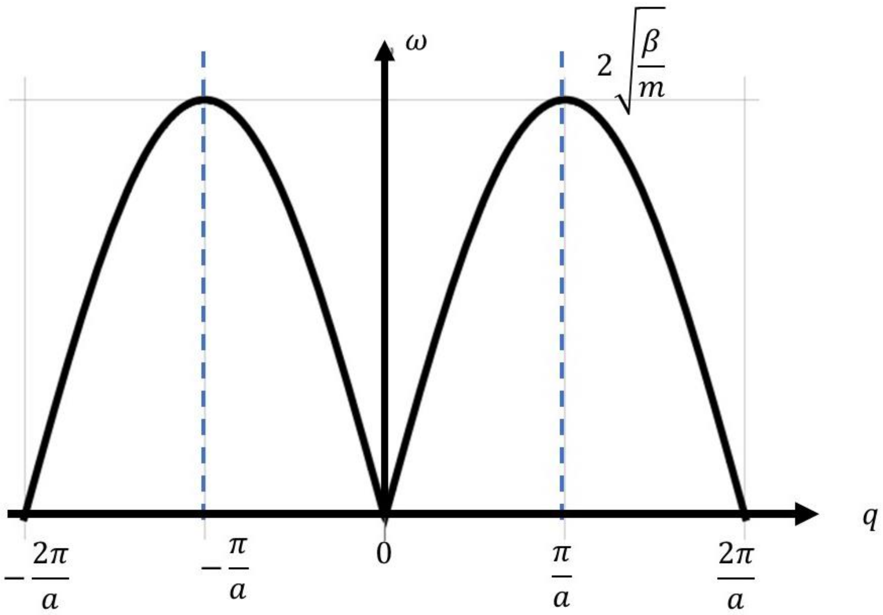


图 2.2.1 一维单原子链色散关系图（$a = 1, \beta = 1, m = 1$）

2.2.2 色散关系的意义

当$q \to 0$ 时，频率取极小值$\omega_{min} = 0$，由$q = \frac{2\pi}{\lambda}$, 此时波长最长$\lambda = \frac{2\pi}{q} \to \infty$，称为长波极限，此时晶格可以被看做是连续介质。

当$q \to \frac{\pi}{a}$ 时，频率取极大值$\omega_{max} = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}$，此时波长最短$\lambda = \frac{2\pi}{q} = 2a$，称为短波极限，此时相邻原子的振动相位相反。

频率在$0 \leq \omega \leq 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}$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。

2.3 格波的意义

在连续介质中，机械波表示为：

$$y = Ae^{i(\omega t - qx)} = Ae^{i\left(\omega t - 2\pi\frac{x}{\lambda}\right)}$$

而一维单原子链的格波表示为：

$$\mu_n = Ae^{i(\omega t - naq)} = Ae^{i\left[\omega t - 2\pi\frac{na}{(2\pi/q)}\right]} \tag{2.3.1}$$

晶体中的格波波长为$\lambda = \frac{2\pi}{q}$，格波波矢为$\vec{q} = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{n}$。

可以看到，连续介质波和格波的形式非常相似。所以格波常被看成是简谐平面波。一个格波即所有原子都以频率为ω振动，但是格波只取na 格点所在位置，格波的相速度$v_p = \frac{\omega}{q}$。

2.4 波矢的取值和布里渊区

格波$\mu_n = Ae^{i(\omega t-naq)}$，相邻原子相位差为$aq$，如果$aq$为$2\pi$的整数倍，那么相邻两个原子的振动情况是一样的，所以aq不是2π的整数倍。

假设相邻两个原子的波矢$q_1 = \frac{\pi}{2a}$，那么相邻两个原子的相位差为$aq_1 = \frac{\pi}{2}$；若相邻两个原子的波矢为$q_2 = \frac{5\pi}{2a}$，相邻两个原子的相位差为$aq_2 = 2\pi + \frac{\pi}{2}$，表示格波的效果是完全一样的。

综上，规定相邻原子的相位aq差取值为：

$$-\pi < aq < \pi$$

即波矢q的取值:

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

q的取值范围称为第一布里渊区，大小为$\frac{2\pi}{a}$。

2.5 玻恩一卡门（Born-Karman）周期性边界条件

上述求解，假设的是一维的单个原子链为无限长，所有的原子都有着相同的振动形式。但是实际上，原子链的长度并不是无限的。由于边界条件，两端的格波不能用中间的来表示。

假设一个原子链由N个原子首尾相连形成环形，如图（2.5.1），每个原子具有相同的性质。如果N非常大，那么相邻的两个原子几乎就在一条直线上，因此原子可以看做是近乎线性的运动着，此时晶体的原子的振动方程不受边界条件的影响，这就是玻恩一卡门的周期性边界条件，很多地方都采用了此边界条件[14]。

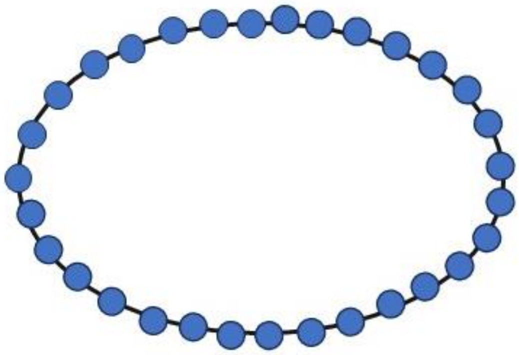


图 2.5.1 N 个原子首尾相连结构图

这个一维单原子链围成的环的长度就可以表示为Na，考虑到链条的循环性，相

位增加一圈，即增加Naq,格波的运动方程是一样的，得满足下列条件：

设第 n 个原子的位移μ_n，第$N+n$个原子的位移μ_{N+n}，则有

$$Ae^{i(\omega t-(\mathrm{N+n})aq)}=Ae^{i(\omega t-naq)}\Rightarrow e^{-iNaq}=1\Rightarrow$$

$$Naq=2\pi h\Rightarrow q=\frac{2\pi}{Na}\times h(\text{h 为整数}) \tag{2.5.1}$$

由于波矢的取值:$-\frac{\pi}{a}<q\leq\frac{\pi}{a}$，得$-\frac{N}{2}<h\leq\frac{N}{2}$（h 为整数），

由N个原胞组成的链，q可以取N个不同的值，每一个q都对应着一个格波，N也是一维单原子链的自由度数，由此可以得到全部的振动模。

3 一维双原子链

3.1 一维双原子链的格波的色散关系

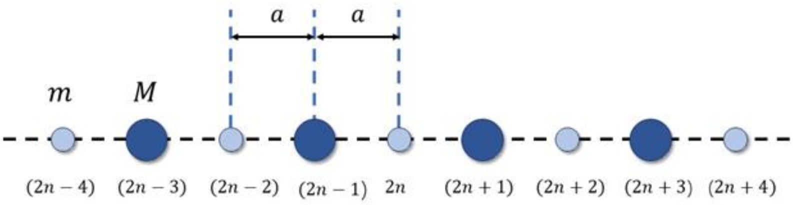


图 3. 1. 1 一维双原子链的结构示意图

如图（3.1.1）所示，一维双原子链由两种原子 m 和 M(M > m)构成，M 原子位置在 2n-1、2n+1、2n+3 ……，m 原子位置在 2n、2n+2、2n+4 ……

结合牛顿定律，可得到第 2n+1 的 M 原子所受力的方程为：

$$M\ddot{\mu}_{2n+1}=-\beta(2\mu_{2n+1}-\mu_{2n+2}-\mu_{2n}) \tag{3.1.1}$$

在第 2n 的 m 原子的方程为：

$$m\ddot{\mu}_{2n}=-\beta(2\mu_{2n}-\mu_{2n+1}-\mu_{2n-1}) \tag{3.1.2}$$

结合简谐振动的通解，两种原子的格波解可以表示为：

$$\mu_{2n}=Ae^{i(\omega t-2naq)}\text{和}\mu_{2n+1}=Be^{i(\omega t-(2n+1)aq)} \tag{3.1.3}$$

代入(3.1.1) (3.1.2)中得

$$(2\beta-m\omega^2)A-(2\beta\cos aq)B=0 \tag{3.1.4}$$

$$(2\beta\cos aq)A-(2\beta-M\omega^2)B=0 \tag{3.1.5}$$

式(3.1.4) 和(3.1.5)组成的二元一次方程组，要使此方程有非零解，则系数行列式为零:

$$\begin{vmatrix}(2\beta-m\omega^2) & -(2\beta\cos aq)\\ 2\beta\cos aq & -(2\beta-M\omega^2)\end{vmatrix}=0 \tag{3.1.6}$$

化简可以得到频率随波矢的关系即色散关系为:

$$\omega^2 \begin{cases} \omega_+^2 \\ \omega_-^2 \end{cases} = \beta \frac{(m+M)}{mM} \left\{ 1 \pm \left[1 - \frac{4mM}{(m+M)^2} sin^2\, aq \right]^{1/2} \right\} \tag{3.1.7}$$

他们的色散关系示意图为：

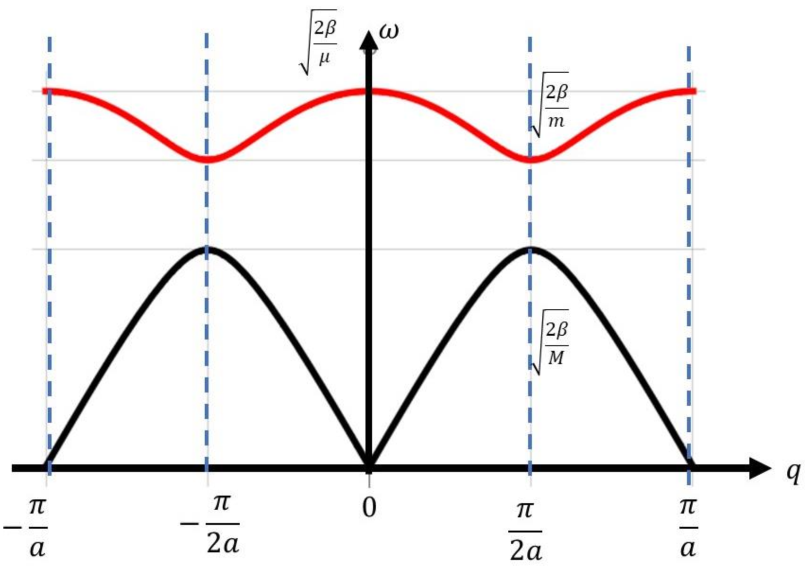


图 3. 1. 1 一维双原子链色散关系（$a = 1, \beta = 1, m = 1, M = 2$）

3.2 波矢的取值和布里渊区

相邻原胞相位差为$2aq$，由相位差的取值范围$-\pi < 2aq < \pi$可得：

1. 波矢q的取值范围为：$-\frac{\pi}{2a} < q \le \frac{\pi}{2a}$

2. 第一布里渊区大小：$\frac{\pi}{a}$

3. 由周期性的边界条件$\mu_{N+n} = \mu_n$，可得q的取值范围为：

$$q = \frac{\pi h}{Na}(\text{h 为整数})$$

4. 由于波恩卡门边界条件，第一布里渊区允许的q值的数目：

$$\frac{\pi}{a} \Big/ \frac{\pi}{Na} = N \tag{3.2.1}$$

3.3 色散关系的意义

一维复式晶格中，存在两个相互独立的格波：

$$\omega_-^2 = \beta \frac{(m+M)}{mM} \left\{ 1 - \left[1 - \frac{4mM}{(m+M)^2} sin^2\, aq \right]^{1/2} \right\} \text{（声学波）} \tag{3.3.1}$$

$$\omega_+^2=\beta\frac{(m+M)}{mM}\left\{1+\left[1-\frac{4mM}{(m+M)^2}sin^2 aq\right]^{1/2}\right\}（光学波）\tag{3.3.2}$$

将$\omega_\pm^2=\beta\frac{(m+M)}{mM}\left\{1\pm\left[1-\frac{4mM}{(m+M)^2}sin^2 aq\right]^{1/2}\right\}$代入（3.1.4）（3.1.5)得到：

$$\left(\frac{B}{A}\right)_+=-\frac{m\omega_+^2-2\beta}{2\beta\cos aq}<0（光学波）\tag{3.3.3}$$

$$\left(\frac{B}{A}\right)_-=-\frac{m\omega_-^2-2\beta}{2\beta\cos aq}>0（声学波）\tag{3.3.4}$$

3.3.1 短波极限

在短波极限，即波矢$q\to\pm\frac{\pi}{2a}$，两种格波的频率分别为：

$$(\omega_-)_{max}=\left(\frac{\beta}{mM}\right)^{1/2}\{(m+M)-(M-m)\}^{1/2}=\left(\frac{2\beta}{M}\right)^{1/2}\tag{3.3.5}$$

$$(\omega_+)_{min}=\left(\frac{\beta}{mM}\right)^{1/2}\{(m+M)+(M-m)\}^{1/2}=\left(\frac{2\beta}{m}\right)^{1/2}\tag{3.3.6}$$

因为 M > m，所以$(\omega_+)_{min}>\omega>(\omega_-)_{max}$（不存频率在此范围的格波)；

频率间隙：$(\omega_+)_{min}\sim(\omega_-)_{max}$；

一维双原子晶格叫做带通滤波器。

3.3.2 长波极限

在长波极限，波矢$q\to 0$，两种格波的频率特点如下：

3.3.2.1 声学波

声学波频率关系为：

$$\omega_-^2=\beta\frac{(m+M)}{mM}\left\{1-\left[1-\frac{4mM}{(m+M)^2}sin^2 aq\right]^{1/2}\right\}\tag{3.3.7}$$

$$\frac{4mM}{(m+M)^2}sin^2 aq\ll 1\tag{3.3.8}$$

$$\omega_-=\sqrt{\frac{2\beta}{m+M}}|sin(aq)|\tag{3.3.9}$$

$$\omega_-\approx a\sqrt{\frac{2\beta}{m+M}}q\approx 0\tag{3.3.10}$$

长声学波中相邻原子的振动：

将 q=0，ω_-=0 代入（3.3.4）$\left(\frac{B}{A}\right)_-=-\frac{m\omega_-^2-2\beta}{2\beta\cos aq}$得$\left(\frac{B}{A}\right)_-=1$。

A和B是相邻原子的振幅，上式表示这两个原子振动的方向和大小都相同，可看为连续介质表示此时原胞质心的振动。

3.3.2.2 光学波

光学波频率关系为：

$$\omega_+^2=\beta\frac{(m+M)}{mM}\left\{1+\left[1-\frac{4mM}{(m+M)^2}sin^2 aq\right]^{1/2}\right\}\tag{3.3.11}$$

$$\frac{4mM}{(m+M)^2}sin^2 aq \gg 1 \tag{3.3.12}$$

$$\omega_+ \approx \sqrt{\frac{2\beta}{\mu}}，\ \mu = \frac{mM}{m+M} \tag{3.3.13}$$

代入（3.3.3）$\left(\frac{B}{A}\right)_+ = -\frac{m\omega_+^2-2\beta}{2\beta\cos aq}$得：

$$\left(\frac{B}{A}\right)_+ = -\frac{m}{M} \tag{3.3.14}$$

可以看出，原胞质心位置不变，同种原子振动相位一致，相邻原子振动方向相反。

在长波极限下，当m和β的值有：

$$(\omega_+)_0 \approx \sqrt{\frac{2\beta}{\mu}} = 10^{13}\sim10^{\ 14}/_s$$

用远红外光波激发离子晶体时，光波和晶体中长光学波发生共振吸收。由光波的频率$\omega = c_0q$ ，光波波矢远低于一般格波的波矢，只有$q \approx 0$的长光学波声子能够和远红外的光波产生共振吸收，这种光学波声子称为电磁声子。

4 考虑次近邻相互作用下的一维单原子链

4.1 色散关系

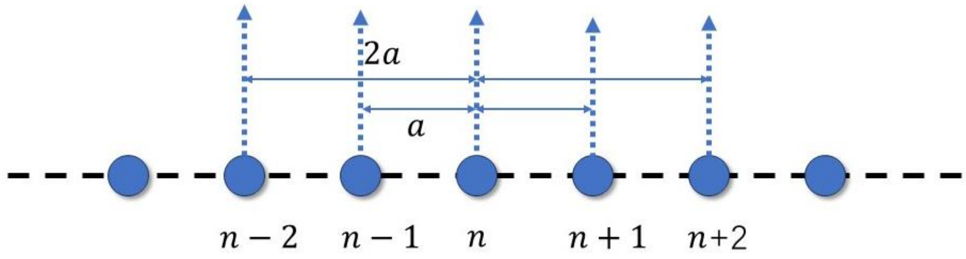


图 4. 1. 1 一维单原子链示意图

如图（4. 1. 1），每个原子的质量为 m，考虑次近邻相互作用，即第 n 个原子受到前后各两个，共四个原子的相互作用力。

此前王登龙、颜晓红和唐翌[10]在论文中讨论过考虑次近邻相互作用的一维单原子链，采用非谐相互作用的模型，利用多重尺度法和准不连续近似描述波动方程，然后解出运动方程。

本文只考虑上述论文中的一阶近似方程，由牛顿定律，得到第 n 个原子的运动方程为：

$$m\frac{d^2\mu_n}{dt^2}-\beta_1(\mu_{n+1}+\mu_{n-1}-2\mu_n)-\beta_2(\mu_{n+2}+\mu_{n-2}-2\mu_n)=0 \tag{4.1.1}$$

其中β_1为最近邻原子对该原子的恢复力常数，β_2为次近邻原子对该原子的恢复力常数。采用简谐近似，格波的一个通解为$\mu_n=Ae^{i(\omega t-naq)}$，则有：

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

代入（4.1.1），可得：

$$-m\omega^2=\beta_1\left(e^{iaq}+e^{-iaq}-2\right)+\beta_2\left(e^{2iaq}+e^{-2iaq}-2\right) \tag{4.1.2}$$

化简可得：

$$\omega^2=\frac{4\beta_1}{m}sin^2\left(\frac{aq}{2}\right)+\frac{4\beta_2}{m}sin^2(aq) \tag{4.1.3}$$

假设次近邻的恢复力常数和最近邻的大小一样，即$\beta_1 = \beta_2 = 1$，则有：

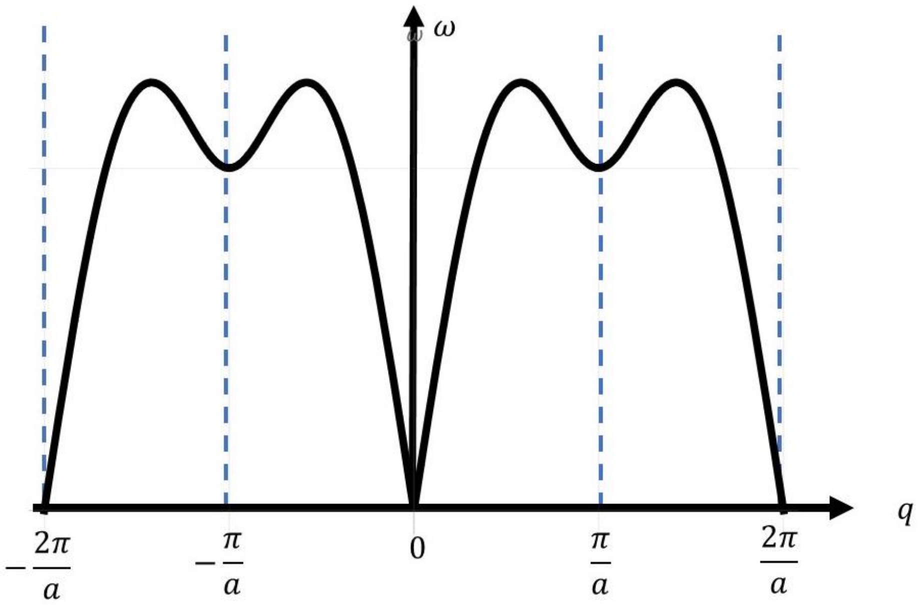


图 4.1.2 考虑次近邻相互作用的一维单原子链色散关系（$a = 1, \beta_1 = 1, \beta_2 = 1, m = 1$）

当最近邻和次近邻恢复力常数不相等时，假设$\beta_1 = 1.2, \beta_2 = 1$，色散关系的图像如下：

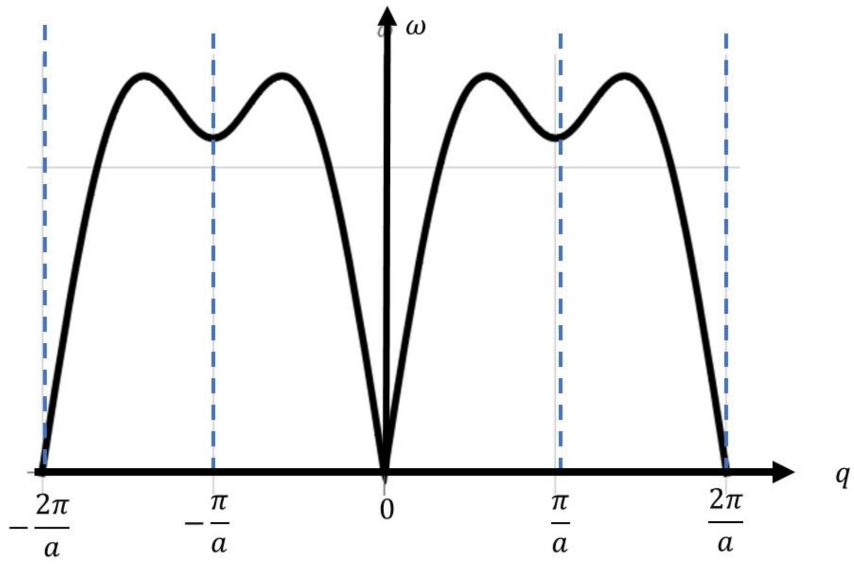


图 4.1.3 考虑次近邻相互作用的一维单原子链色散关系（$a = 1, \beta_1 = 1.2, \beta_2 = 1, m = 1$）

可以看到当最近邻的恢复力常数大于次近邻时，在第一布里渊区边界，频率ω随波数q变化的起伏更小。再假设当次近邻的恢复力常数大于最近邻$\beta_1 = 1, \beta_2 = 1.2$，色散关系如下：

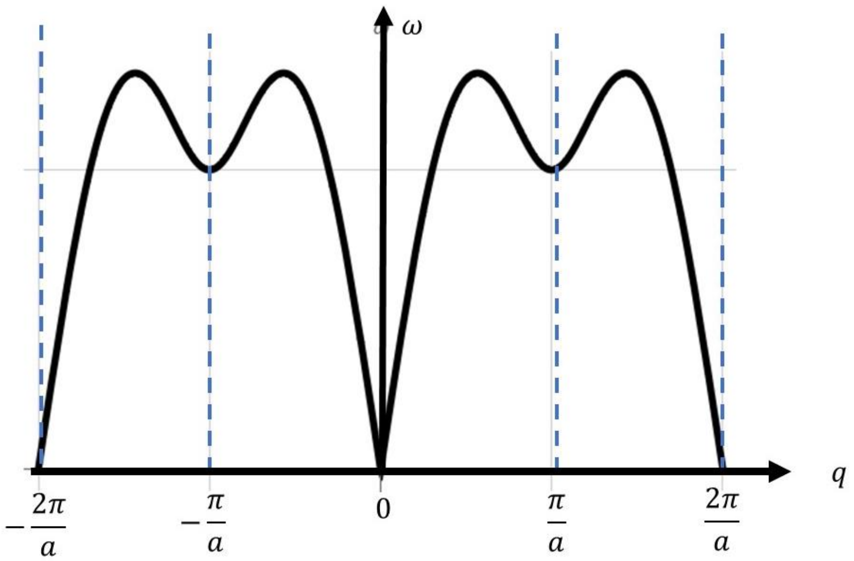


图 4.1.4 考虑次近邻相互作用的一维单原子链色散关系（$a = 1, \beta_1 = 1, \beta_2 = 1.2, m = 1$）

可以看到当次近邻的恢复力常数大于最近邻时，在第一布里渊区边界，频率ω随波数q变化的起伏更大。

如果最近邻的恢复力常数远大于次近邻的恢复力常数，那么在第一布里渊区边界，次近邻影响频率ω随波数q变化几乎看不出，此时和只考虑最近邻相互作用时的色散关系一致。

4.2 波矢的取值和布里渊区

相邻原胞相位差为aq，由相位差的取值范围$-\pi < aq < \pi$可得：

1）波矢q的取值范围为：$-\frac{\pi}{a} < q \le \frac{\pi}{a}$

2）第一布里渊区大小：$\frac{2\pi}{a}$。和不考虑次近邻相互作用时的一维单原子链的布里渊区大小一样。

5 考虑次近邻相互作用的一维双原子链

5.1色散关系

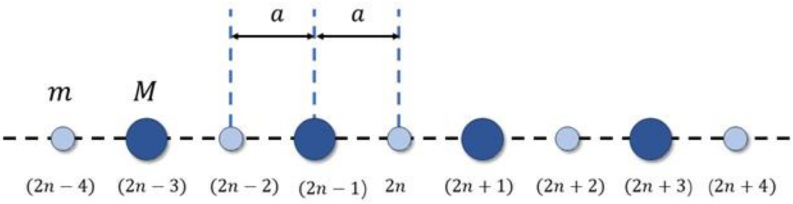


图 5.1.1 一维双原子链示意图

如图（5.1.1）所示，一维双原子链由$2N$个正负离子组成，两种原子质量分别是 m 和 M(M > m)，相邻两个原子之间的距离为a，M原子位置在$2n-1$、$2n+1$ ……，m 原子位置在$2n$、$2n+2$ ……

假设正负两个离子电荷量为$\pm e$，简谐近似下，两个离子之间的库伦作用力常数为$\beta=\left(\frac{d^2U}{dr^2}\right)_{r=a}$，可得最近邻库伦作用力常数为$\beta_1=-\frac{2e^2}{a^3}$, 次近邻的库伦作用力常数为$\beta_2=-\frac{\beta_1}{8}$。在陈志远和童国平[12]的论文中，假设第一近邻原子间作用力常数为$\beta_1^*=\alpha+\beta$, α为短程力常数，约化单位取为 1，还假设除了最近邻外，其他原子不考虑短程力作用。

结合牛顿定律，可得在第 2n-1 的 M 原子所受力的方程为：

$$M\ddot{\mu}_{2n-1}=(\alpha+\beta)(\mu_{2n-2}+\mu_{2n}-2\mu_{2n-1})-\frac{\beta}{8}(\mu_{2n+1}+\mu_{2n-3}-2\mu_{2n-1}) \quad (5.1.1)$$

在第 2n 的 m 原子的方程为：

$$m\ddot{\mu}_{2n}=(\alpha+\beta)(\mu_{2n+1}+\mu_{2n-1}-2\mu_{2n})-\frac{\beta}{8}(\mu_{2n+2}+\mu_{2n-2}-2\mu_{2n-2}) \quad (5.1.2)$$

结合简谐振动的通解，两种原子的格波解可以表示为：

$$\mu_{2n}=Ae^{i(\omega t-2naq)}和\mu_{2n-1}=Be^{i(\omega t-(2n-1)aq)} \quad (5.1.3)$$

代入(5.1.1) (5.1.2)中得：

$$(2\alpha\,cos\,aq+2\beta\,cos\,aq)A+\left[M\omega^2+(-2\alpha)+\left(-\frac{1}{4}\cos 2aq-\frac{7}{4}\right)\beta\right]B=0 \quad (5.1.4)$$

$$\left[m\omega^2+(-2\alpha)+\left(-\frac{1}{4}\cos 2aq-\frac{7}{4}\right)\beta\right]A+(2\alpha\,cos\,aq+2\beta\,cos\,aq)B=0 \quad (5.1.5)$$

A 和 B 为未知数，且令:

$$C=-2\alpha+\left(-\frac{1}{4}\cos 2aq-\frac{7}{4}\right)\beta$$
$$D=2\alpha\,cos\,aq+2\beta\,cos\,aq$$

行列式可写为：

$$\begin{vmatrix} D & (M\omega^2+C) \\ (m\omega^2+C) & D \end{vmatrix}=0 \tag{5.1.6}$$

可得：

$$mM\omega^4+C(m+M)\omega^2+C^2-D^2=0 \tag{5.1.7}$$

解得考虑次近邻相互作用的一维双原子链的色散关系为：

$$\omega^2\begin{cases}\omega_+^2\\ \omega_-^2\end{cases}=\frac{1}{2mM}\left\{-C(m+M)\pm\left[C^2(m+M)^2-4mM(C^2-D^2)\right]^{1/2}\right\}$$

假设$\alpha=1;\beta=-0.2;M=1;m=0.5;a=1$色散关系的图像：

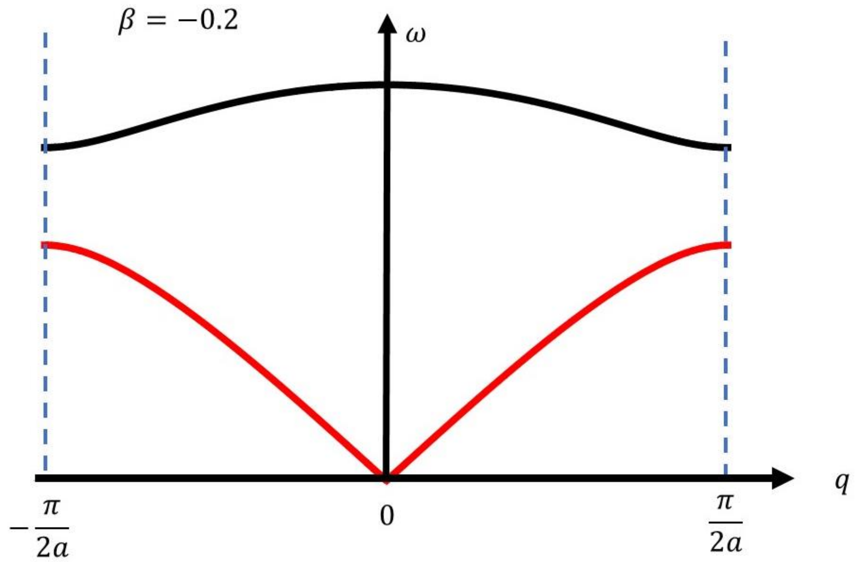


图 5.1.2 考虑次近邻相互作用的一维双原子链色散关系（$a=1,\alpha=1,\beta=-0.2,M=1,m=0.5$）

可以看得色散关系和只考虑最近邻相互作用的色散关系类似，再假设$\alpha=1;\beta=-0.75;M=1;m=0.5;a=1$，此时的色散关系如下：

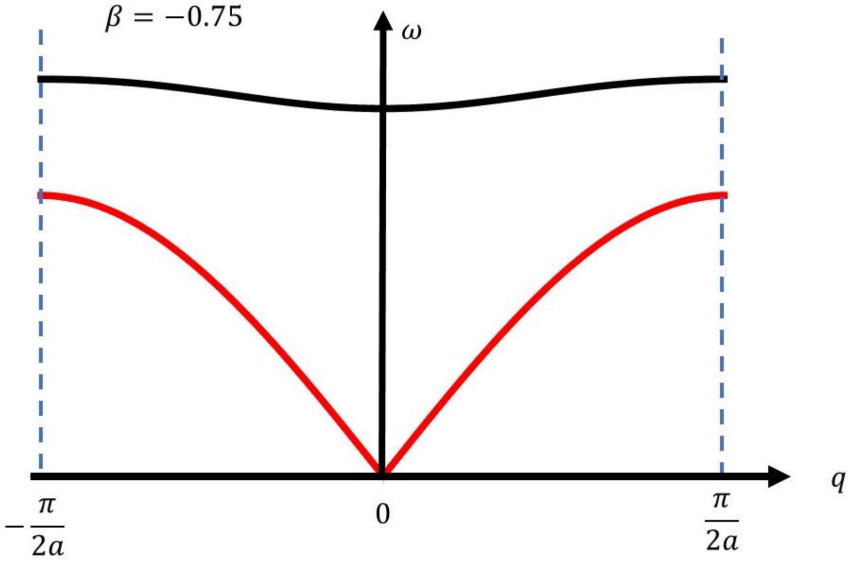


图 5.1.3 考虑次近邻相互作用的一维双原子链色散关系（$a = 1, \alpha = 1, \beta = -0.75, M = 1, m = 0.5$）

可以看到当β的绝对值变大时，色散关系图像出现明显的弯折，此时可以表明，次近邻相互作用的效果更为显著。

6 教学设计

6.1 教材分析

教材选自《固体物理学》黄昆版第三章晶格振动和晶体的热学性质，本节课的内容是第三章前半部，关于晶格振动的知识，此前在第一、二章已经介绍过晶体的结构和晶体的结合原理。从第三章开始，就要讨论晶体中原子的运动情况，这与之前第一、二章的知识的关联性不强，内容稍有割裂，不易学生理解。

而且本节运用分析力学的方法探讨晶格的振动，推导过程较为抽象和复杂，更需要老师费心讲解。

教材从简单的一维单原子链出发，探讨原子的运动情况，并推导出色散关系，以及介绍色散关系的意义，接着又扩展到探究一维双原子链的振动状况，同时激发学生的学习兴趣。

本文将在教材的基础上，引入考虑次近邻相互作用的一维原子链的运动情况。由浅入深的带领学生们学会推导一维原子链的色散关系，从而形象生动地理解晶格振动的有关知识。

6.2 教学目标

1. 理解一维原子链的模型以及概念；掌握求解色散关系的方法；知道色散关系的物理意义以及会分析色散关系的图像的意义。

2. 学生同老师推导一维原子链的色散关系，了解相关问题的解决思路。

3. 明白如何描述晶格振动；通过扩展考虑次近邻相互作用，会主动思考类似的解决办法。

6.3 教学重点和难点

6.3.1 教学重点

（1）分析一维原子链中原子的受力情况来求解运动方程；

（2）利用运动方程求色散关系；

（3）波矢取值以及布里渊区，周期性边界条件。

6.3.2 教学难点

一维原子链色散关系的推导以及图像的理解。

6.4 学情分析

6.4.1 学生基础

学生已经具有分析力学基础、会运用简谐平面波方程等。

6.4.2 学习障碍

大学生听课积极性比高中时会低一些。同时本次课难度较大，尤其是一维原子链色散关系的推导，需要老师细致讲解。

6.5 教学方法和手段

6.5.1讲授法

采用引导式的教学模式，注重师生、学生之间的互动以及思维的碰撞，引导他们主动思考，通过恰当的练习题帮助学生消化理解知识。

6.5.2多媒体教学辅助法

通过多媒体开展课堂教学，Mathematica 程序辅助。

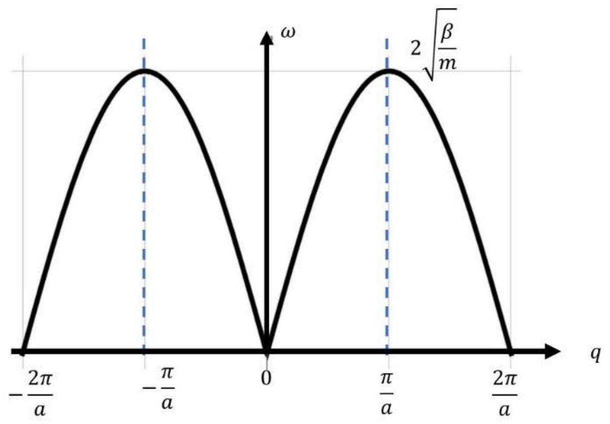
6.5.3小组讨论法

积极引导学生思考讨论，创设生动形象的课堂环境，调动学生的学习欲望，鼓励学生去探究思考，引导学生勇于将自己的看法表达出来。

6.6 教学过程

教学内容	教师活动	学生活动	设计意图
课程引入	晶格振动是研究固体宏观性质和微观过程的重要基础，对晶体的热学性质、电学性质、光学性质、磁性等很多物理性质的研究有着很重要的作用。 在教学过程中，我们可以从最简单的一维单原子链出发，找到晶格振动方程并求解出色散关系。并且提问，哪些因素会影响色散关系。 紧接着再探究一维双原子链和考虑次近邻相互作用的一维单原子链的运动状态，并且求出它们的色散关系，理解长波和短波极限的情况下，固体会表现出来的宏观性质，联系现实经验，深刻理解知识。	听老师的讲解，明白什么是晶格振动以及它的意义；还有就是从最简单的一维单原子链出发，拓展到一维双原子链、考虑次近邻相互作用的一维原子链的基本特性。	叙述引入，吸引学生注意力，让学生对这节课有一个大致的了解，明白学习方向。
一维单原子链	假设一维单个原子链中，每一个原子的质量为m，原子之间的间距为 a，第$n-1$ 、n、$n+1$ 这三个原子从平衡位置分别移动μ_{n-1}、μ_n、	学习一维单原子链色散关系的推导过	让学生熟悉整个

的色散关系	μ_{n+1}，则第 n 个原子与第 n+1 个原子之间的距离为 $a+\mu_{n+1}-\mu_n$ 当原子处于平衡位置时，两原子间的相互作用势能为$\nu(a)$，当它们发生相对位移$\delta=\mu_{n+1}-\mu_n$时，它们之间的相互作用势能表示为： $$\nu(a+\delta)=\nu(a)+\left(\frac{dv}{dr}\right)_a\delta+\frac{1}{2}\left(\frac{d^2v}{dr^2}\right)_a\delta^2 + High\ \ items$$ 其中$\nu(a)$为常数，平衡条件时$\left(\frac{dv}{dr}\right)_a=0$，则 $$\nu(a+\delta)=\nu(a)+\frac{1}{2}\left(\frac{d^2v}{dr^2}\right)_a\delta^2+High\ \ items$$ 除去高阶项，相邻原子间的作用力为$f=-\frac{dv}{d\delta}\approx-\beta\delta$，$\beta=\left(\frac{d^2v}{dr^2}\right)_a$为恢复力常数； 只考虑相邻原子的作用，第$n$个原子受到的作用力为： $$\beta(\mu_{n+1}-\mu_n)-\beta(\mu_n-\mu_{n-1}) = \beta(\mu_{n+1}-\mu_{n-1}-2\mu_n)$$ 第 n个原子的运动方程为： $$m\frac{d^2\mu_n}{dt^2}=\beta(\mu_{n+1}+\mu_{n-1}-2\mu_n)$$ 其中 n=1, 2, 3⋯, N 将$\mu_n=Ae^{i(\omega t-naq)}$、$\mu_{n-1}=Ae^{i[\omega t-(n-1)aq]}$、$\mu_{n+1}=Ae^{i[\omega t-(n+1)aq]}$带入$m\frac{d^2\mu_n}{dt^2}=\beta(\mu_{n+1}-\mu_{n-1}-2\mu_n)$得 $$-m\omega^2=\beta\left(e^{iaq}+e^{-iaq}-2\right)$$ 又由$\cos aq=\frac{e^{iaq}+e^{-iaq}}{2}$，得色散关系 $$\omega^2=\frac{4\beta}{m}sin^2\left(\frac{aq}{2}\right)$$ $$\omega=2\sqrt{\frac{\beta}{m}}\left\|sin\left(\frac{aq}{2}\right)\right\|$$ 色散关系的示意图为：	程，能够自行推导。	推导流程。



波格相速度$v_p = \frac{\omega}{q}$

1）格波特点：

长波极限，$q \to 0$，$sin\left(\frac{aq}{2}\right) \approx \frac{aq}{2}$，则，$\omega = a\sqrt{\frac{\beta}{m}}|q|$。

此时波格的色散关系和在连续介质中弹性波的性质相同。

短波极限，$q \to \frac{\pi}{a}$，则，$\omega = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}$。

此时波格的色散关系和在连续介质中弹性波的性质不相同。

2）相位特点：

长波极限，$q \to 0$，

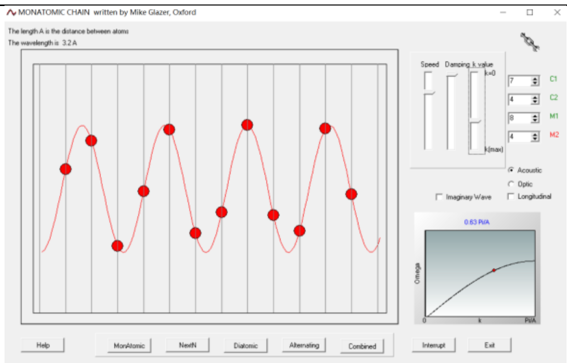
相邻两个原子振动相位差$qa \to 0, \lambda = \frac{2\pi}{q} \to \infty$,

晶格可看作是连续介质。

短波极限，$q \to \frac{\pi}{a}$,

$\lambda = \frac{2\pi}{q} = 2a$，相邻原子的振动相位相反。

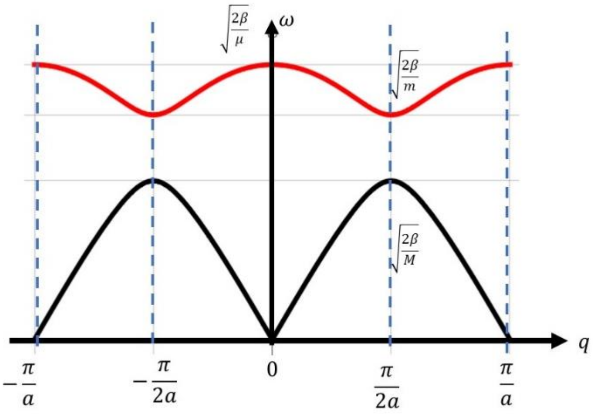
用软件展示不同频率时，原子链的振动状况。

			
周期性边界条件	由于边界条件，原子链两端和中间的波动方程不同。现假设 N 个原子首尾相连，构成一个环形，具有相同的性质。N 非常大，因此原子在近乎线性的方式运动。设第 n个原子的位移μ_n，第$N+n$个原子的位移μ_{N+n}，则有 $$Ae^{i(\omega t-（N+n）aq)}=Ae^{i(\omega t-naq)}\Rightarrow e^{-iNaq}=1$$ $$\Rightarrow Naq=2\pi h\Rightarrow q=\frac{2\pi}{Na}\times h(\text{h 为整数})$$	跟随老师，学习周期性边界条件的推导过程。	探究周期性边界条件。
一维双原子链的色散关系	两种原子 m 和 M(M ＞ m)构成一维复式网络，M 原子位置在 2n-1、2n+1、2n+3 ……，m 原子位置在 2n、2n+2、2n+4 ……。该体系有 N 个原胞，2N 个原子。 第 2n+1 个 M 原子的方程为： $$M\ddot{\mu}_{2n+1}=-\beta(2\mu_{2n+1}-\mu_{2n+2}-\mu_{2n}),$$ 第 2n 个 m 原子的方程： $$m\ddot{\mu}_{2n}=-\beta(2\mu_{2n}-\mu_{2n+1}-\mu_{2n-1}),$$ 方程解的形式为： $\mu_{2n}=Ae^{i(\omega t-2naq)}$和$\mu_{2n+1}=Ae^{i(\omega t-（2n+1）aq)}$， 代入到上面两式中得： $$(2\beta-m\omega^2)A-(2\beta\cos aq)B=0$$ $$(2\beta\cos aq)A-(2\beta-M\omega^2)B=0$$ 以 A,B 为未知数组成方程组，要有非零解，则需要系数行列式为零: $$\begin{vmatrix}(2\beta-m\omega^2) & -(2\beta\cos aq)\\ 2\beta\cos aq & -(2\beta-M\omega^2)\end{vmatrix}=0$$	学生通过类比一维单原子链，推论出一维双原子链的基本性质。	思考讨论一维双原子链色散关系，理解长波极限和短波极限，明白原子的运动状态。

求解可得：

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

色散关系示意图为：



所以一维复式晶格中存在两种独立的格波：

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

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

代入到运动方程可以得到：

$$\left(\frac{B}{A}\right)_+ = -\frac{m\omega_+^2 - 2\beta}{2\beta \cos aq} < 0 \text{（光学波）}$$

$$\left(\frac{B}{A}\right)_- = -\frac{m\omega_-^2 - 2\beta}{2\beta \cos aq} > 0 \text{（声学波）}$$

相邻原胞相位差为$2aq$，由相位差的取值范围$-\pi < 2aq < \pi$可得：

1）波矢q的取值范围为：$-\frac{\pi}{2a} < q \leq \frac{\pi}{2a}$

2）第一布里渊区大小：$\frac{\pi}{a}$

3）由周期性的边界条件$\mu_{N+n} = \mu_n$，可得q的取值范围为：

$$q = \frac{\pi h}{Na} \text{(h 为整数)}$$

	4）第一布里渊区允许的q值的数目： $$\frac{\pi}{a}\Big/\frac{\pi}{Na}=N$$ 在短波极限，即波矢$q\to\pm\frac{\pi}{2a}$，两种格波的频率分别为： $$(\omega_-)_{max}=\left(\frac{\beta}{mM}\right)^{1/2}\{(m+M)-(M-m)\}^{1/2}=\left(\frac{2\beta}{M}\right)^{1/2}$$ $$(\omega_+)_{min}=\left(\frac{\beta}{mM}\right)^{1/2}\{(m+M)+(M-m)\}^{1/2}=\left(\frac{2\beta}{m}\right)^{1/2}$$ 因为 M > m，所以$(\omega_+)_{min}>\omega>(\omega_-)_{max}$（不存频率在此范围的格波）； 频率间隙：$(\omega_+)_{min}\sim(\omega_-)_{max}$； 频率在上述范围内的，不可以通过该晶体，所以一维双原子晶格叫做带通滤波器。 在长波极限，波矢$q\to 0$，两种格波的频率特点如下： 声学波频率关系为： $$\omega_-^2=\beta\frac{(m+M)}{mM}\left\{1-\left[1-\frac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2 aq\right]^{1/2}\right\}$$ $$\frac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2 aq\ll 1$$ $$\omega_-=\sqrt{\frac{2\beta}{m+M}}\lvert\sin(aq)\rvert$$ $$\omega_-\approx a\sqrt{\frac{2\beta}{m+M}}q$$ 长声学波中相邻原子的振动： 将 q=0，ω_- =0 代入$\left(\frac{B}{A}\right)_-=-\frac{m\omega^2-2\beta}{2\beta\cos aq}$得$\left(\frac{B}{A}\right)_-=1$。 表示的是原胞中的两个原子振动的振幅相同的，振动方向也一致的，表示原胞质心的振动。		

<table>
<tr>
<td></td>
<td>
光学波频率关系为：

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

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

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

代入（3.2.3）$\left(\frac{B}{A}\right)_+=-\frac{m\omega_+^2-2\beta}{2\beta\cos aq}$得：

$$\left(\frac{B}{A}\right)_+=-\frac{m}{M}$$

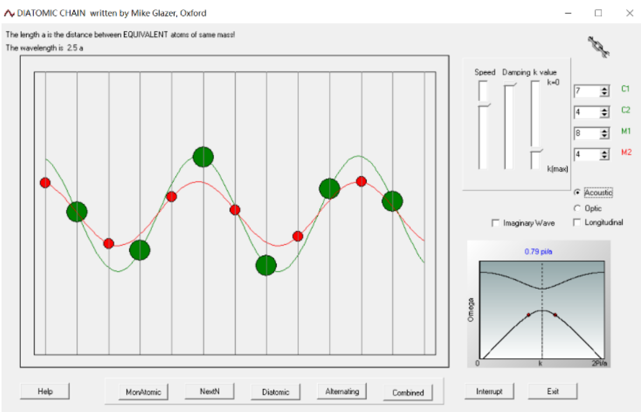
表示此时同种原子振动相位一致，原胞质心保持不变，原胞中两个原子之间相对运动。

在长波极限下，对于典型的 m 和β的值有：

$$(\omega_+)_0\approx\sqrt{\frac{2\beta}{\mu}}=10^{13}\sim10^{\,14}/_{s}$$

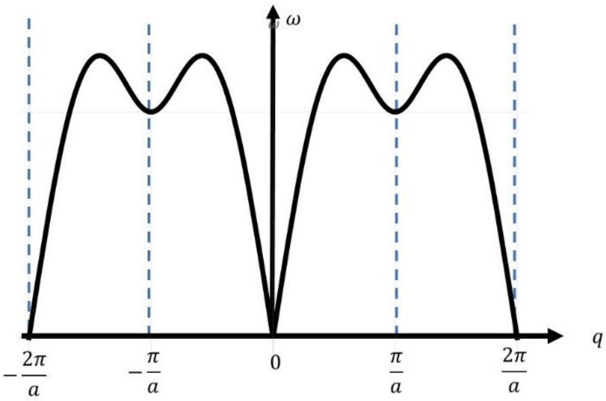
用远红外光波激发离子晶体时，可以引起晶体中长光学波发生共振吸收。这个光学波声子称为电磁声子。光波的频率：$\omega=c_0q$ 。

并用演示软件展示，双原子链在不同波数时的振动状况。

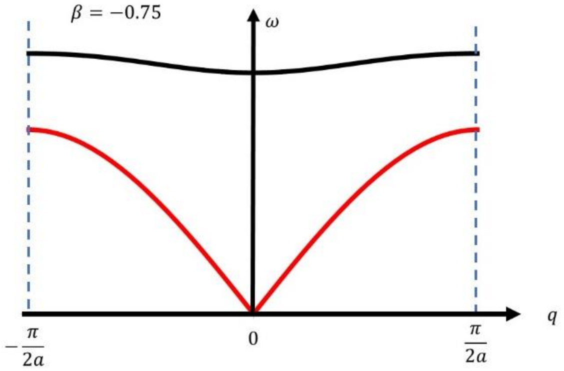


</td>
<td></td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>考虑次近邻相互作用下的一维单</td>
<td>
考虑次近邻相互作用，每个原子的质量为 m，一维单原子链中的第 n 个原子受到前后个两个原子的相互作用。

由牛顿定律，第 n 个原子的运动方程为：
</td>
<td>学生通过类比一维单原子链，推出考虑次近邻相互作用的一维单原子链的基本性质</td>
<td>拓展考虑次近邻相互作用下的一维单原子链的色</td>
</tr>
</table>

原子链	$$m\frac{d^2\mu_n}{dt^2}=\beta_1(\mu_{n+1}+\mu_{n-1}-2\mu_n)+\beta_2(\mu_{n+2}+\mu_{n-2}-2\mu_n)$$ 其中β_1为最近邻原子对该原子的恢复力常数，β_2为次近邻原子对该原子的恢复力常数。采用简谐近似，格波的一个通解为$\mu_n=Ae^{i(\omega t-naq)}$，则有： $$\mu_{n-2}=Ae^{i[\omega t-(n-2)aq]}$$ $$\mu_{n-1}=Ae^{i[\omega t-(n-1)aq]}$$ $$\mu_n=Ae^{i(\omega t-naq)}$$ $$\mu_{n+1}=Ae^{i[\omega t-(n+1)aq]}$$ $$\mu_{n+2}=Ae^{i[\omega t-(n+2)aq]}$$ 代入运动方程，可以得到： $$-m\omega^2=\beta_1\left(e^{iaq}+e^{-iaq}-2\right)+\beta_2\left(e^{2iaq}+e^{-2iaq}-2\right)$$ 化简可得色散关系为： $$\omega^2=\frac{4\beta_1}{m}sin^2\left(\frac{aq}{2}\right)+\frac{4\beta_2}{m}sin^2(aq)$$ 色散关系的图像为： 		散关系。
考虑次近邻相互作用下的一维双原子链	一维双原子链由 2N 个正负离子组成，两种原子质量分别是 m 和 M(M > m)，相邻两个原子之间的距离为a，M 原子位置在 2n+1、2n+3 ……，m 原子位置在 2n、2n+2 …… 假设正负两个离子电荷量为$\pm e$，简谐近似下，两个离子之间的库伦作用力常数为$\beta=\left(\frac{d^2U}{dr^2}\right)_{r=a}$，可得最近邻库伦作用力常数为$\beta_1=-\frac{2e^2}{a^3}$,次近邻的库伦作用力常数为$\beta_2=-\frac{\beta}{8}$。假设	跟随老师的讲解，拓展考虑次近邻相互作用时，一维双原子链色散关系的求解。	拓展考虑次近邻相互作用时的一维双原子的色散关系，丰富学

	第一近邻原子间作用力常数为$\beta_1^* = \alpha + \beta$，$\alpha$为短程力常数，约化单位取为 1，还假设除了最近邻外，其他原子不考虑短程力作用。 结合牛顿定律，可得在第 2n-1 的 M 原子所受力的方程为： $M\ddot{\mu}_{2n-1} = (\alpha+\beta)(\mu_{2n-2} + \mu_{2n} - 2\mu_{2n-1}) - \frac{\beta}{8}(\mu_{2n+1} + \mu_{2n-3} - 2\mu_{2n-1})$ 在第 2n 的 m 原子的方程为： $m\ddot{\mu}_{2n} = (\alpha+\beta)(\mu_{2n+1} + \mu_{2n-1} - 2\mu_{2n}) - \frac{\beta}{8}(\mu_{2n+2} + \mu_{2n-2} - 2\mu_{2n-2})$ 结合简谐振动的通解，两种原子的格波解可以表示为： $\mu_{2n} = Ae^{i(\omega t - 2naq)}$ $\mu_{2n-1} = Be^{i(\omega t - (2n-1)aq)}$ 代入运动方程中得： $(2\alpha\, cos\, aq + 2\beta\, cos\, aq)A + \left[M\omega^2 + (-2\alpha) + \left(-\frac{1}{4}\cos 2aq - \frac{7}{4}\right)\beta\right]B = 0$ $\left[m\omega^2 + (-2\alpha) + \left(-\frac{1}{4}\cos 2aq - \frac{7}{4}\right)\beta\right]A + (2\alpha\, cos\, aq + 2\beta\, cos\, aq)B = 0$ 以 A, B 为未知数组成的二元一次方程组，且令： $C = -2\alpha + \left(-\frac{1}{4}\cos 2aq - \frac{7}{4}\right)\beta$ $D = 2\alpha\, cos\, aq + 2\beta\, cos\, aq$ 行列式可写为： $\begin{vmatrix} D & (M\omega^2 + C) \\ (m\omega^2 + C) & D \end{vmatrix} = 0$ 可得： $mM\omega^4 + C(m+M)\omega^2 + C^2 - D^2 = 0$ 解得考虑次近邻相互作用的的一维双原子链的色散关系为： $\omega^2 \begin{cases} \omega_+^2 \\ \omega_-^2 \end{cases} = \frac{1}{2mM}\{-C(m+M) \pm [C^2(m+M)^2 - 4mM(C^2 - D^2)]^{1/2}\}$		生们关于格波求解的视野。

	色散关系的图像为： 		

6.7 板书设计

一维单原子链

振动方程

$$\mu_i = \frac{a_{ij}}{\sqrt{m_i}} A sin(\omega_j t + \delta)$$

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

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

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

运动方程

$$m\frac{\mathrm{d}^2\mu_n}{\mathrm{d}t^2} = \beta(\mu_{n+1} + \mu_{n-1} - 2\mu_n)$$

$$-m\omega^2 = \beta(\mathrm{e}^{\mathrm{i}aq} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}aq} - 2)$$

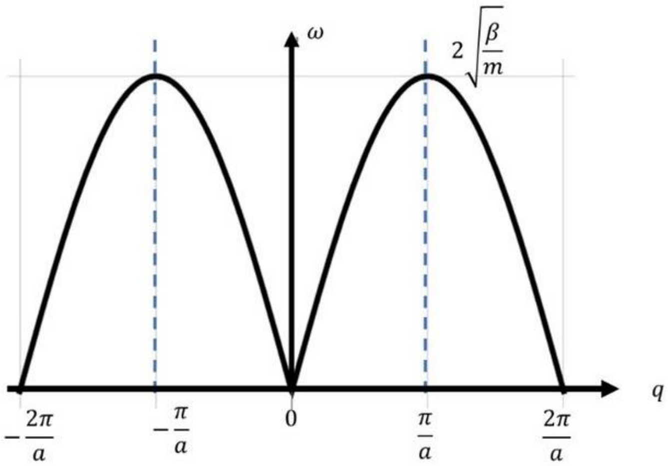
$$cos\, aq = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}aq} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}aq}}{2}$$

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

一维单原子链

色散关系

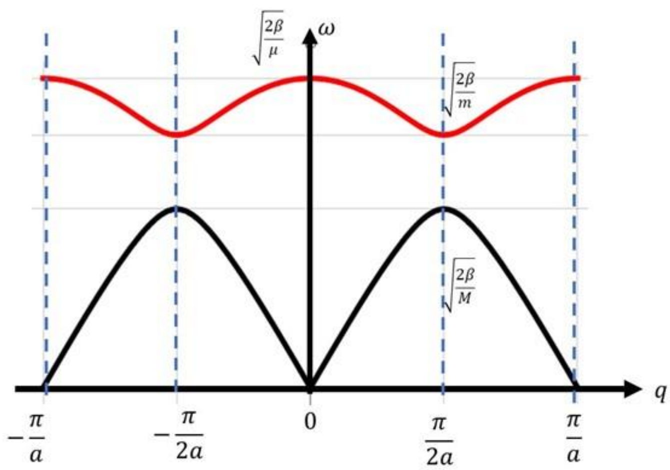
$$\omega^2 = \frac{4\beta}{m} sin^2\left(\frac{aq}{2}\right)$$



一维双原子链

色散关系

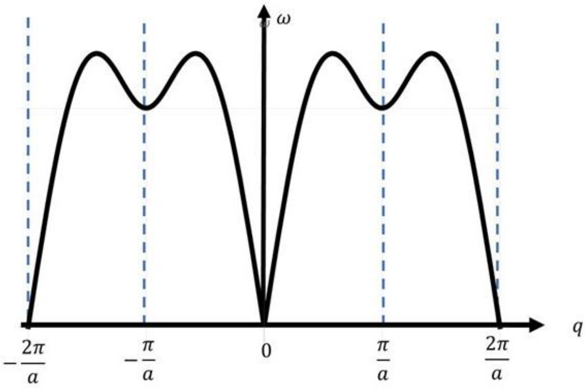
$$\omega^2 \begin{cases} \omega_+^2 \\ \omega_-^2 \end{cases} = \beta \frac{(m+M)}{mM}\left\{1 \pm \left[1 - \frac{4mM}{(m+M)^2} sin^2 aq\right]^{1/2}\right\}$$



考虑次近邻相互作用一维单原子链

色散关系

$$\omega^2 = \frac{4\beta_1}{m} sin^2\left(\frac{aq}{2}\right) + \frac{4\beta_2}{m} sin^2(aq)$$



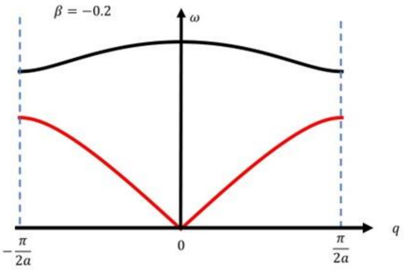
考虑次近邻相互作用下的一维双原子链

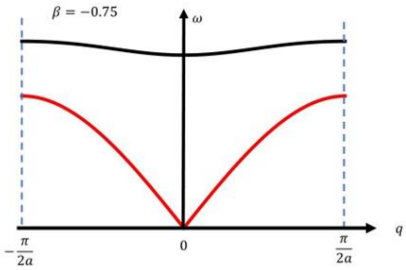
色散关系

$$C = -2\alpha + \left(-\frac{1}{4}\cos 2aq - \frac{7}{4}\right)\beta$$

$$D = 2\alpha\cos aq + 2\beta\cos aq$$

$$\omega^2 \begin{cases} \omega_+^2 \\ \omega_-^2 \end{cases} = \frac{1}{2mM}\{-C(m+M) \pm [C^2(m+M)^2 - 4mM(C^2 - D^2)]^{1/2}\}$$





7 结论

在教材中，黄昆先生介绍了一维单原子链加上一维双原子链的振动情况，推导出来色散关系以分析它们的物理意义。教材中只考虑最近邻相互作用，可以较为容易的让学生们接受和理解晶格振动的知识，以及简化色散关系的推导。

假若学生掌握了课本上的知识后，又扩展考虑次近邻相互作用时晶格振动的情况，并且推导色散关系，可以让学生们有思考的方向和将解决问题的思路付诸练习的机会，这对于知识的理解和掌握大有益处。

同时，教材中只考虑最近邻相互作用，是为了方便求解和便于学生们理解晶格振动而采取的一种近似方式，这与实际情况有所差别。本文引入次近邻相互作用的影响，让所得结果更趋近与真实情况，让学生们打开思路，不受思维定式的束缚，让想法更丰富和发散，可以刺激学生们创新思维的发展。但是本节课的主要内容依然是只考虑最近邻相互作用的状况，便于让学生们分清主次。

参考文献

[1] 黄昆.固体物理学:重排本[M].北京大学出版社,2014.

[2] 杨兴强,宋金璠.固体物理学中的一维晶格问题[J].南阳师范学院学报, 2005, 4(6):3.DOI:CNKI:SUN:NYSF.0.2005-06-011.

[3] 吕岿,毛杰健,童国平.具有在位势的一维单原子链中杂质引起的局域模[J]. 2014.

[4] 王端阳,胡建民,王月媛,等.一维双原子链色散关系的非线性拟合分析[J].哈尔滨师范大学自然科学学报, 2016, 32(4):3.DOI:10.3969/j.issn.1000-5617.2016.04.018.

[5] 孙美慧,王月媛,胡建民,等.一维三原子链的格波解及其色散关系[J].大学物理, 2019, 38(7):5.DOI:10.16854/j.cnki.1000-0712.180585.

[6] 潘学琴,刘炳灿,田强.在位势对于一维双原子链晶格振动长声学波的影响[J].大学物理, 2009(5):3.DOI:10.3969/j.issn.1000-0712.2009.05.004.

[7] 董佳豪,张立新.一般情况下一维j原子链的求解及色散关系讨论[J].物理与工程, 2023, 33(1):35-42.

[8] 赵远,胡建民,王月媛,等.原子质量对一维三原子链色散关系的影响[J].大学物理, 2021, 40(4):5.DOI:10.16854/j.cnki.1000-0712.200407.

[9] Totsuka K .Magnetization plateau in the S=12 Heinsenberg spin chain with next-nearest-neighbor and alternating nearest-neighbor interactions[J].Phys.rev.b, 1998, 57(6):3454-3465.DOI:http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.57.3454.

[10] WANG DENGLONG,YAN XIAOHONG,TANG YI,等.SOLITARY WAVE IN ONE-DIMENSIONAL MONOATOMIC CHAIN UNDER THE CONSIDERATION OF THE SECOND-NEIGHBORS INTERACTION 考虑次近邻相互作用下一维单原子链中的孤立波[J].物理学报, 2000(9):1736-1740.DOI:10.1007/BF02983184.

[11] 陈志远,戴国田.不同近邻作用下一维双原子链晶格振动色散关系[J].三峡大学学报(自然科学版),2010,32(03):100-104.

[12] 吕岿,童国平.多近邻作用下具有在位势的一维双原子链晶格振动的色散关系[J].上饶师范学院学报, 2014, 34(6):5.DOI:10.3969/j.issn.1004-2237.2014.06.008.

[13] 徐文兰,陆卫.多近邻作用双原子链和一维铁电体晶格振动[J].红外与毫米波学报, 2000, 19(5):693-696.DOI:10.3321/j.issn:1001-9014.2000.05.016.

[14] Cowley E R .A Born-von Karman force constant model for aluminum[J].Canadian Journal of Physics, 1974, 52(17).DOI:10.1139/p74-225.

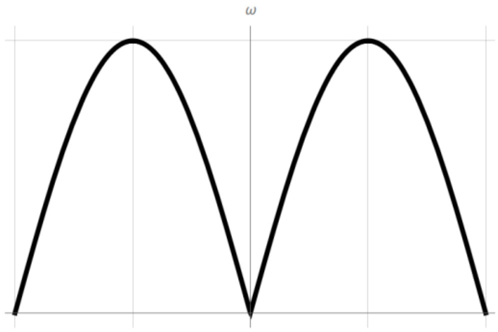
附录

色散关系图像利用 methematic 绘图

一维单原子链（$a = 1, \beta = 1, m = 1$）

```
(*一维单原子链,布里渊区宽度=(2π)/a*)
In[100]:= ω[{q_, β_, m_, a_}] := 2 √(β/m) Abs[Sin[(q a)/2]];
(*ω[{q,1,1,1}],β=1;m=1;a=1;*)
a = 1; β = 1; m = 1;
Plot[ω[{q, 1, 1, 1}], {q, -((2π)/a), (2π)/a}, AxesLabel → ω, Ticks → False, PlotStyle → {Black, Thickness[0.01]},
 GridLines → {{-((2π)/a), -(π/a), π/a, (2π)/a}, {2 √(β/m)}}]
```

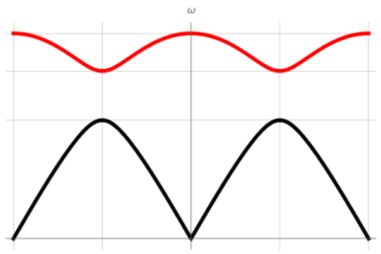
Out[•]=



一维双原子链（a=1，$\beta = 1, m = 1, M = 2$）

```
(*一维双原子链,布里渊区宽度=π/a*)
In[•]:= ω₋[{q_, β_, M_, m_, a_}] := (β/(M m) ((M + m) - √(M^2 + m^2 + 2 M m Cos[2 q a])))^(1/2);
ω₊[{q_, β_, M_, m_, a_}] := (β/(M m) ((M + m) + √(M^2 + m^2 + 2 M m Cos[2 q a])))^(1/2);
(*ω[{q,1,1,1}],β=1;M=2;m=1;a=1;*)
ω₋[{q, 1, 2, 1, 1}];
ω₊[{q, 1, 2, 1, 1}];
a = 1; β = 1; M = 2; m = 1;
Plot[{ω₋[{q, 1, 2, 1, 1}], ω₊[{q, 1, 2, 1, 1}]}, {q, -π/a, π/a}, AxesLabel → ω, Ticks → False, PlotStyle → {{Black, Thickness[0.01]}, {Red, Thickness[0.01]}},
 GridLines → {{-π/a, -π/(2 a), π/(2 a), π/a}, {√(2 β/M), √(2 β/m), √(2 β (M + m)/(M m))}}]
```

Out[•]=



考虑次近邻相互作用的一维单原子链，三种情况

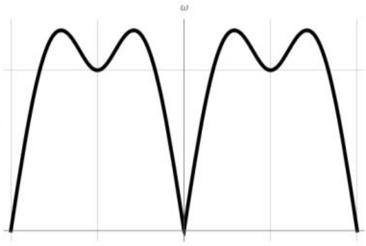
第一种（$a = 1, \beta_1 = 1, \beta_2 = 1, m = 1$）

```
In[197]:= ω[{q_, β1_, β2_, m_, a_}] := Sqrt[4 β1/m (Abs[Sin[q a/2]])^2 + 4 β2/m (Abs[Sin[q a]])^2];
          (*ω[{q,1,1,1,1,1}],β=1,m=1;a=1;*)

          a = 1;
          β1 = 1;
          β2 = 1;
          m = 1;

          Plot[ω[{q, 1, 1, 1, 1}], {q, -2π/a, 2π/a}, AxesLabel → ω, Ticks → False, PlotStyle → {Black, Thickness[0.01]}, GridLines → {{-2π/a, -π/a, π/a, 2π/a}, {2 Sqrt[β/m]}}]
```

Out[201]=



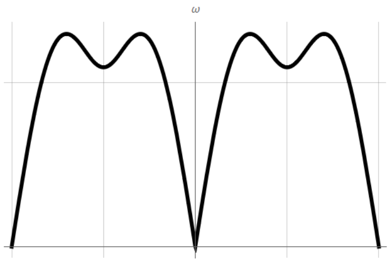
第二种（$a=1,\beta_1=1.2,\beta_2=1,m=1$）

```
In[202]:= ω[{q_, β1_, β2_, m_, a_}] := Sqrt[4 β1/m (Abs[Sin[q a/2]])^2 + 4 β2/m (Abs[Sin[q a]])^2];
          (*ω[{q,1.2,1,1,1,1}],β=1,m=1;a=1;*)

          a = 1;
          β1 = 1.2;
          β2 = 1;
          m = 1;

          Plot[ω[{q, 1.2, 1, 1, 1}], {q, -2π/a, 2π/a}, AxesLabel → ω, Ticks → False, PlotStyle → {Black, Thickness[0.01]}, GridLines → {{-2π/a, -π/a, π/a, 2π/a}, {2 Sqrt[β/m]}}]
```

Out[206]=



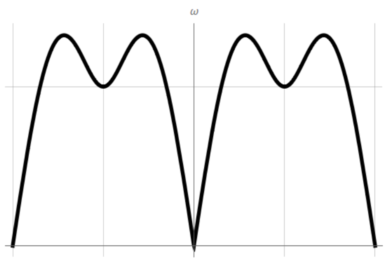
第三种（$a=1,\beta_1=1,\beta_2=1.2,m=1$）

```
In[222]:= ω[{q_, β1_, β2_, m_, a_}] := Sqrt[4 β1/m (Abs[Sin[q a/2]])^2 + 4 β2/m (Abs[Sin[q a]])^2];
          (*ω[{q,1,1.2,1,1}],β=1,m=1;a=1;*)

          a = 1;
          β1 = 1;
          β2 = 1.2;
          m = 1;

          Plot[ω[{q, 1, 1.2, 1, 1}], {q, -2π/a, 2π/a}, AxesLabel → ω, Ticks → False, PlotStyle → {Black, Thickness[0.01]}, GridLines → {{-2π/a, -π/a, π/a, 2π/a}, {2 Sqrt[β/m]}}]
```

Out[226]=



考虑次近邻相互作用的一维双原子链的两种情况

$$CC = -2\alpha + \left(-\frac{1}{4}\mathrm{Cos}[2\,q\,a] - \frac{7}{4}\right)\beta;$$

余弦

$$DD = 2\alpha\,\mathrm{Cos}[q\,a] + 2\beta\,\mathrm{Cos}[q\,a];$$

余弦 余弦

$$\left(\frac{1}{2\,M\,m}\left(-CC\,(m+M) + \left(CC^2\,(m+M)^2 - 4\,m\,M\left(CC^2 - DD^2\right)\right)^{1/2}\right)\right)^{1/2};$$

$$\left(\frac{1}{2\,M\,m}\left(-CC\,(m+M) - \left(CC^2\,(m+M)^2 - 4\,m\,M\left(CC^2 - DD^2\right)\right)^{1/2}\right)\right)^{1/2};$$

$$\omega_-[\{q\_,\alpha\_,\beta\_,M\_,m\_,a\_\}] := \frac{\sqrt{\frac{\sqrt{-4\,m\,M\left(-(2\alpha\,\mathrm{Cos}[a\,q]+2\beta\,\mathrm{Cos}[a\,q])^2+\left(-2\alpha+\beta\left(-\frac{7}{4}-\frac{1}{4}\mathrm{Cos}[2\,a\,q]\right)\right)^2\right)+(m+M)^2\left(-2\alpha+\beta\left(-\frac{7}{4}-\frac{1}{4}\mathrm{Cos}[2\,a\,q]\right)\right)^2}+(m+M)\left(2\alpha-\beta\left(-\frac{7}{4}-\frac{1}{4}\mathrm{Cos}[2\,a\,q]\right)\right)}{m\,M}}}{\sqrt{2}};$$

$$\omega_+[\{q\_,\alpha\_,\beta\_,M\_,m\_,a\_\}] := \frac{\sqrt{\frac{-\sqrt{-4\,m\,M\left(-(2\alpha\,\mathrm{Cos}[a\,q]+2\beta\,\mathrm{Cos}[a\,q])^2+\left(-2\alpha+\beta\left(-\frac{7}{4}-\frac{1}{4}\mathrm{Cos}[2\,a\,q]\right)\right)^2\right)+(m+M)^2\left(-2\alpha+\beta\left(-\frac{7}{4}-\frac{1}{4}\mathrm{Cos}[2\,a\,q]\right)\right)^2}+(m+M)\left(2\alpha-\beta\left(-\frac{7}{4}-\frac{1}{4}\mathrm{Cos}[2\,a\,q]\right)\right)}{m\,M}}}{\sqrt{2}};$$

```
(*ω[{q,1,1,1}],β=1;M=2;m=1;a=1;*)
ω-[{q, 1, 0.8, 1, 0.5, 1}];
ω+[{q, 1, 0.8, 1, 0.5, 1}];
α = 1; β = -0.2; M = 1; m = 0.5; a = 1;
```

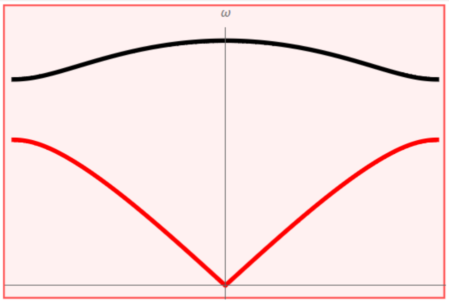
$$\mathrm{Plot}\left[\{\omega_-[\{q,1,-0.2,1,0.5,1\}],\ \omega_+[\{q,1,-0.2,1,0.5,1\}]\},\ \left\{q,-\frac{\pi}{2a},\frac{\pi}{2a}\right\},\ \mathrm{AxesLabel}\to\omega,\ \mathrm{Ticks}\to\mathrm{False},\right.$$

绘图 坐标轴标签 刻度 假

$$\left.\mathrm{PlotStyle}\to\{\{\mathrm{Black},\mathrm{Thickness}[0.01]\},\{\mathrm{Red},\mathrm{Thickness}[0.01]\}\},\ \mathrm{GridLines}\to\left\{\left\{-\frac{\pi}{a},-\frac{\pi}{2a},\frac{\pi}{2a},\frac{\pi}{a}\right\},\left\{\sqrt{\frac{2\beta}{M}},\sqrt{\frac{2\beta}{m}},\sqrt{\frac{2\beta\,(M+m)}{M\,m}}\right\}\right\}\right]$$

绘图样式 黑色 粗细 红色 粗细 网格线

Out[ ]=



In[ ]:=

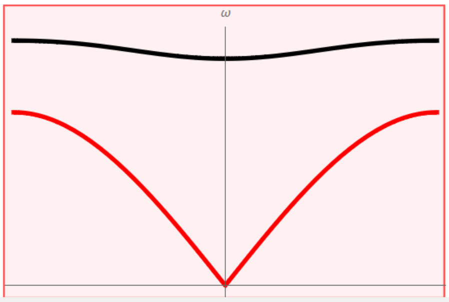
$$\mathrm{Plot}\left[\{\omega_-[\{q,1,-0.75,1,0.5,1\}],\ \omega_+[\{q,1,-0.75,1,0.5,1\}]\},\ \left\{q,-\frac{\pi}{2a},\frac{\pi}{2a}\right\},\ \mathrm{AxesLabel}\to\omega,\ \mathrm{Ticks}\to\mathrm{False},\right.$$

绘图 坐标轴标签 刻度 假

$$\left.\mathrm{PlotStyle}\to\{\{\mathrm{Black},\mathrm{Thickness}[0.01]\},\{\mathrm{Red},\mathrm{Thickness}[0.01]\}\},\ \mathrm{GridLines}\to\left\{\left\{-\frac{\pi}{a},-\frac{\pi}{2a},\frac{\pi}{2a},\frac{\pi}{a}\right\},\left\{\sqrt{\frac{2\beta}{M}},\sqrt{\frac{2\beta}{m}},\sqrt{\frac{2\beta\,(M+m)}{M\,m}}\right\}\right\}\right]$$

绘图样式 黑色 粗细 红色 粗细 网格线

Out[ ]=



致谢

大学四年就要结束了，入学那天的情景却还历历在目，今后要开始新的阶段了。

时间过得飞快，但是它留下的印记却不会抹去。和同学们的朝夕相处，让我为人处世方面得到了成长，四年间也结识了一些有趣的朋友；在课堂中的学习，拓展了我的视野，锻炼了我的能力，让我受益匪浅；这四年间，还要感谢四川师范大学，校园给我提供了各种可能，我可以按着我的喜好规划我的时间，学我感兴趣的东西，图书馆有着这一辈子都看不完的书，校园又大又漂亮的花园，有鸟儿，锦鲤和大鹅，充满生机，社团内各种各样的活动，虽然我参加很少，但我喜欢看别人玩，这热烈的氛围是独属于青春的，这四年时光，我永远无法忘记。

在完成也论文这段时间，受到很多人的帮助。我要衷心感谢我的导师程才。感谢您在整个毕业论文的写作过程中给予我的耐心指导和宝贵建议。您的专业知识和严谨态度深深地影响了我，让我受益匪浅。我还要感谢我的父母和家人，还有同学们。感谢你们一直以来对我的支持和鼓励，没有你们的理解和支持，我无法顺利完成这篇论文。

衷心的感谢！