

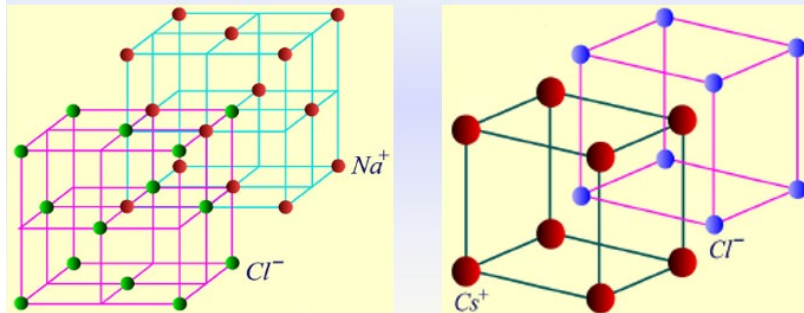
第三章 晶体的原子热振动

3.1 原子间的相互作用

晶体的分类

3.1.1 离子晶体

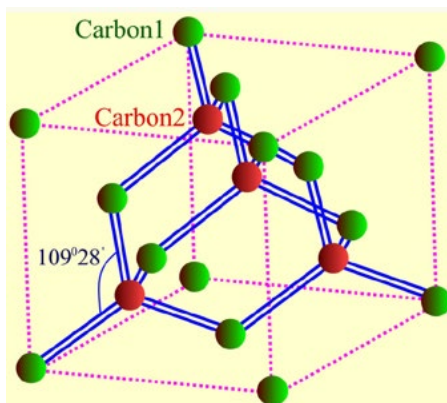
如 NaCl, CsCl



特点：晶体结合很稳定，熔点高，硬度高。导电性导热性差

3.1.2 共价晶体

如金刚石，石墨

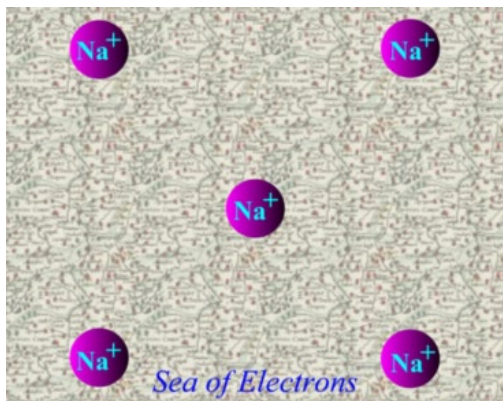


含有共价键：共价键特点是具有**饱和性和方向性**（必考）

共价晶体的特点：熔点高，硬度高，价电子在共价键上，导电性差

3.1.3 金属晶体

如 Li, Na, K, 等等



共有化电子可以在整个晶体中运动，导电性，导热性良好，具有高延展性

3.1.4 分子晶体

如惰性气体

惰性元素在低温下结合成的晶体

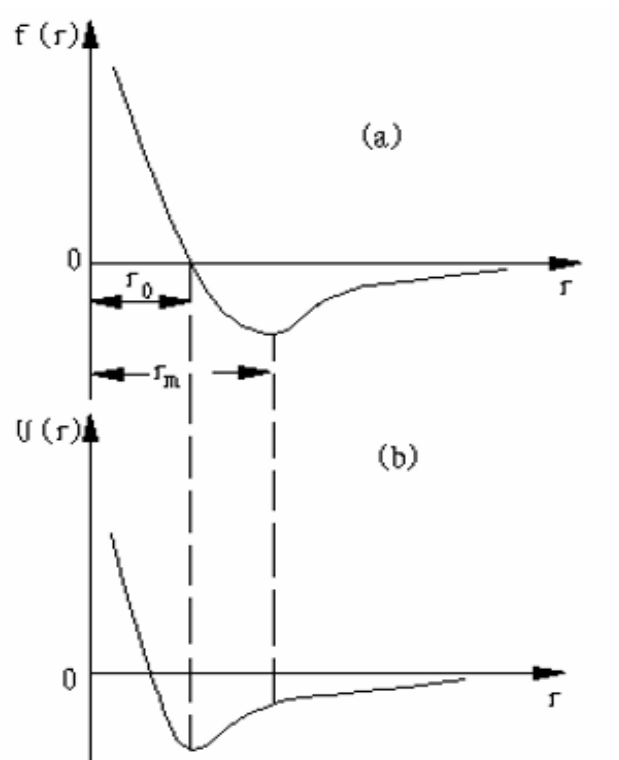
依靠瞬时偶极矩的相互作用--范德瓦耳斯力

特点：熔点特别低，绝缘体（导电性不好）

3.2 原子间的相互作用

原子间有排斥力和吸引力

如图，可见原子间的力与 r ，势能与 r 的关系



$r = r_m$ 时，吸引力最大

$r = r_0$ 时，势能最小

晶体的结合能：

$$\left. \frac{dU(r)}{dr} \right|_{r=r_0} = 0 \implies U(r_0)$$

晶体的结合能

晶体的恢复力常数：

$$\begin{aligned}
 f(r) &= -\frac{dU(r)}{dr} \\
 &= -\left. \frac{dU}{dr} \right|_{r_0} - \left(\left. \frac{d^2U}{dr^2} \right|_{r_0} \right) \delta \\
 &= -\beta \delta
 \end{aligned}$$

恢复力常数

3.3 一维单原子晶格热振动（只有声学子）

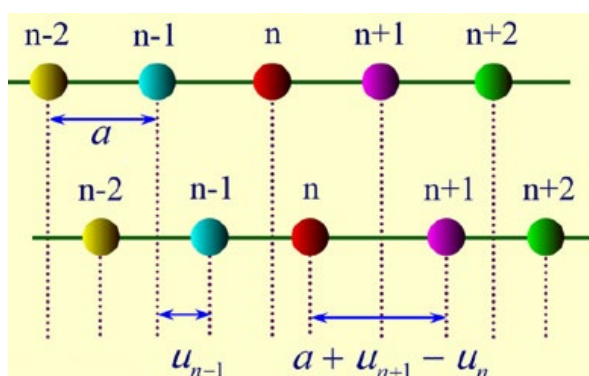
3.3.1 振动方程的建立

假设基础：

只考虑相邻原子的作用

简谐近似

方向：向右为正



$$\begin{aligned}
 f &= \beta(u_{n+1} - u_n) - \beta(u_n - u_{n-1}) \\
 &= \beta(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) \\
 m \frac{d^2 u_n}{dt^2} &= \beta(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n)
 \end{aligned}$$

对这个方程进行求解：

试探解：

$$u_n = Ae^{i(qna - \omega t)}$$

A: 振幅 **ω : 振动频率** **qna : 第n个原子的初相位**

单个原子(n 固定)的运动是简谐振动

整个晶格中各原子的运动：

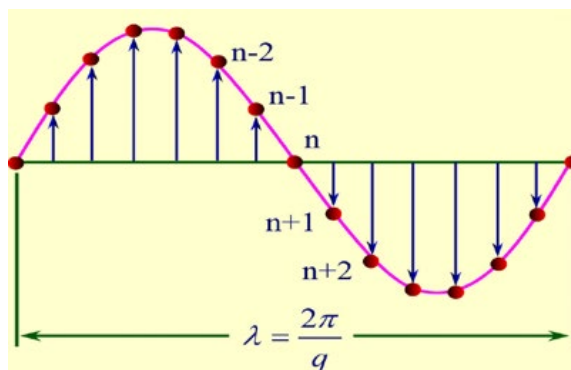
$$u_n = Ae^{i(qna - \omega t)}$$

各原子振动间存在相互联系，有固定的位相差。相邻原子的位相差为 qa 。

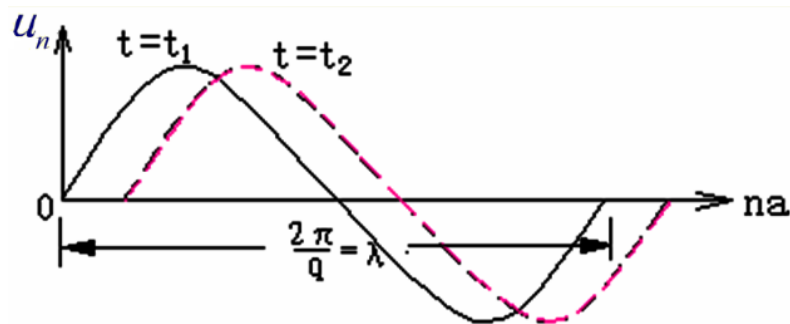
$$\text{当 } u_m = u_n \text{ 时} \implies ma - na = \frac{2\pi}{q} k \dots \text{整数}$$

不同波函数满足相位差为 $2\pi k$

研究这些原子的波函数



比如下面两个波的波函数



格波：

整个晶格的振动(原子振动的集体行为)，构成了一个波矢为 q 的前进波。

波矢代表空间频率，即 2π 长度内有多少波长。因为动量代表空间平移对称性，空间变化。所以波矢即代表波的动量。

3.3.2

色散关系 ($\omega \sim q$)

将试探解代入下列方程中

$$m \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \beta(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n)$$

可以得到:

$$m \omega^2 = 4\beta \sin^2 \frac{qa}{2}$$

即:

$$\omega = 2 \sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right| \quad (\omega \text{ 与 } q \text{ 的关系})$$

3.3.3 相速度

下面我们来定义相速度

$$v_{\text{phase}} = \frac{\omega}{q} \neq \text{常数} \Rightarrow \text{色散}$$

也就是说 ω/q 是相速度，当相速度不为常数的时候就发生了色散

其中，可以进行长波近似（ q 趋近于 0）

即 ω 与 q 的关系变成了下面关系

$$\omega \xrightarrow{q \rightarrow 0 \text{ 或 } \lambda \rightarrow \infty \text{ 或 长波近似}} 2 \sqrt{\frac{\beta}{m}} \cdot \frac{1}{2} qa$$

$$\frac{\omega}{q} \approx \sqrt{\frac{\beta}{m}} \cdot a = \text{常数}$$

$\lambda \gg a$, 晶格可以近似看作连续。

（ λ 越大，越接近宏观物体，因此也就是说越接近于刚体，原子的位移都相同）

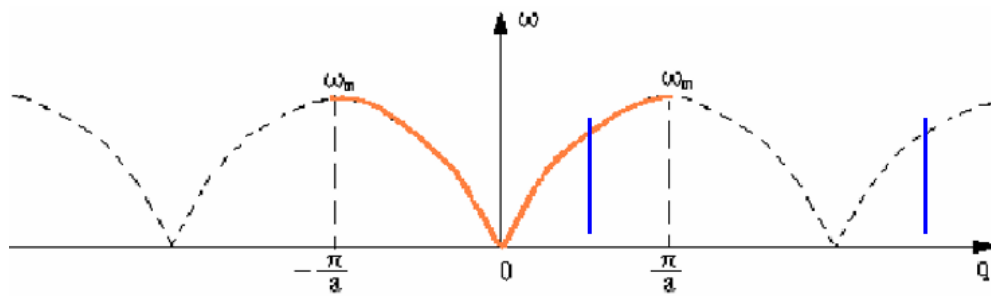
(a 是晶体中粒子之间的距离)

3.3.4 对 $\omega(q)$ 一些性质的讨论

$\omega(q)$ 具有对称性和周期性

$$\omega = 2 \sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right| \begin{cases} \omega(q) = \omega(-q) \\ \omega\left(q + \frac{2\pi}{a}\right) = \omega(q) \end{cases}$$

其图像为：



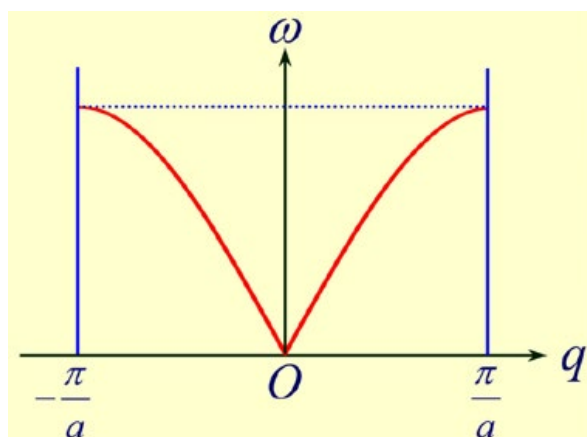
在区间 $-\frac{\pi}{a} \sim +\frac{\pi}{a}$ 之外并不提供新的格波，因此可以将 q 限制在 $-\frac{\pi}{a} \sim +\frac{\pi}{a}$ 区间(第一布里渊区)内。

$\omega(q)$ 的取值范围

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

$$\omega_{\max} \left(\pm \frac{\pi}{a} \right) = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}$$

$$\omega_{\min}(0) = 0$$

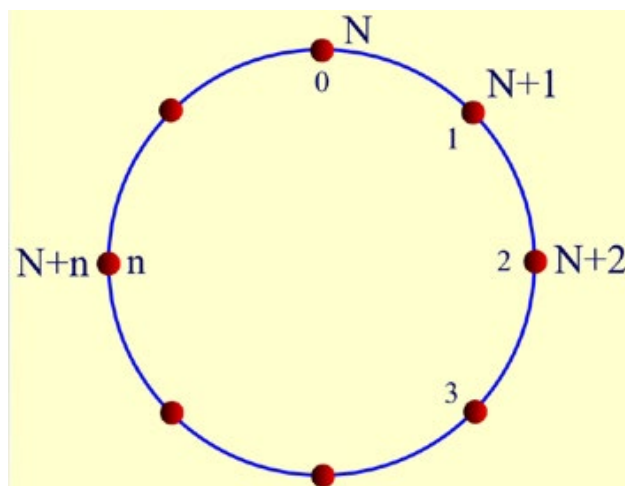


ω 与 q 的取值是准连续的，是分立的值，不是一条直线

3.3.5 周期性边界条件

假设晶格由 N 个原胞构成，并且以圆圈的方式构成（直线型的会带来表面效应，不便于分

析)



一些条件:

$$u_n = u_{n+N}$$

$$u_n = Ae^{i(qna - \omega t)}$$

推出:

$$e^{iNqa} = 1 \implies q = \frac{2\pi}{a} \frac{l}{N} \quad \text{整数} \quad -\frac{N}{2} < l \leq \frac{N}{2}$$

(l 是量子数, 而且同时加上 $N/2$, 可以看到 l 取 N 个值, N 和 a 已知), 可以看出 q 是不连续的

结论:

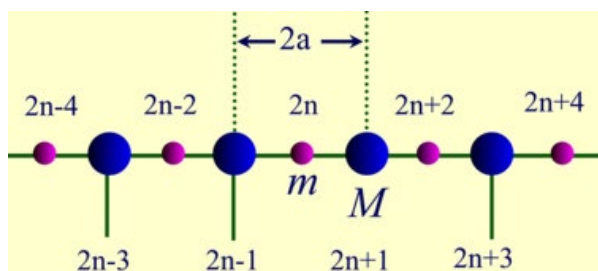
q 取 N 个分立的值, 相应地 ω 也取 N 个分立的值。所以: 在单原子晶格中可以传播 N 个格波, 或者说有 N 种振动模式。(必考)

$+q$: 相应与于向右传播的波;

$-q$: 相应与于向左传播的波。

3.4 一维双原子晶格振动模型

振动方程的建立



只考虑相邻原子的作用

简谐近似

方向：向右为正

两个原子，两个方程

$$m \frac{d^2 u_{2n}}{dt^2} = \beta(u_{2n+1} + u_{2n-1} - 2u_{2n})$$

$$M \frac{d^2 u_{2n+1}}{dt^2} = \beta(u_{2n+2} + u_{2n} - 2u_{2n+1})$$

振动方程的解：

$$u_{2n} = A e^{i(q \cdot 2n \cdot a - \omega t)}$$

$$u_{2n+1} = B e^{i[q(2n+1)a - \omega t]}$$

对于解的一些理解：

1. 单个原子的运动为简谐振动！

m 原子：振幅— A ；振动频率— ω ；初相位— $q(2n)a$

M 原子：振幅— B ；振动频率— ω ；初相位— $q(2n+1)a$

2. 整个晶格中各个原子的运动

两种原子振动的振幅比和位相差是确定的！

色散关系

$$\begin{pmatrix} m\omega^2 - 2\beta & 2\beta \cos qa \\ 2\beta \cos qa & M\omega^2 - 2\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0$$

（从这里可以推出一些结论性的东西哦）

对矩阵求行列式

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

得到：

$$mM\omega^4 - 2\beta(m+M)\omega^2 + 4\beta^2 \sin^2 qa = 0$$

解得：

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

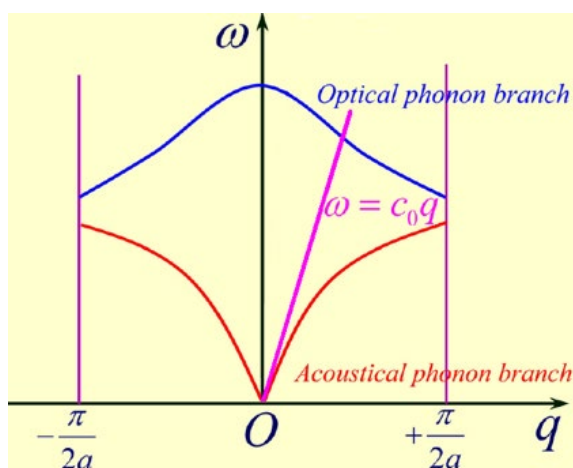
结论：

1. 双原子晶格振动存在两种色散关系 $\begin{cases} \omega_+(q) \\ \omega_-(q) \end{cases}$
也可以说双原子晶格具有两支格波

对 $\omega_-(q)$ 取长波近似 ($q \rightarrow 0$) :

$$\omega_-(q) = \sqrt{\frac{2\beta}{m+M}} \cdot aq$$

连续介质的弹性波

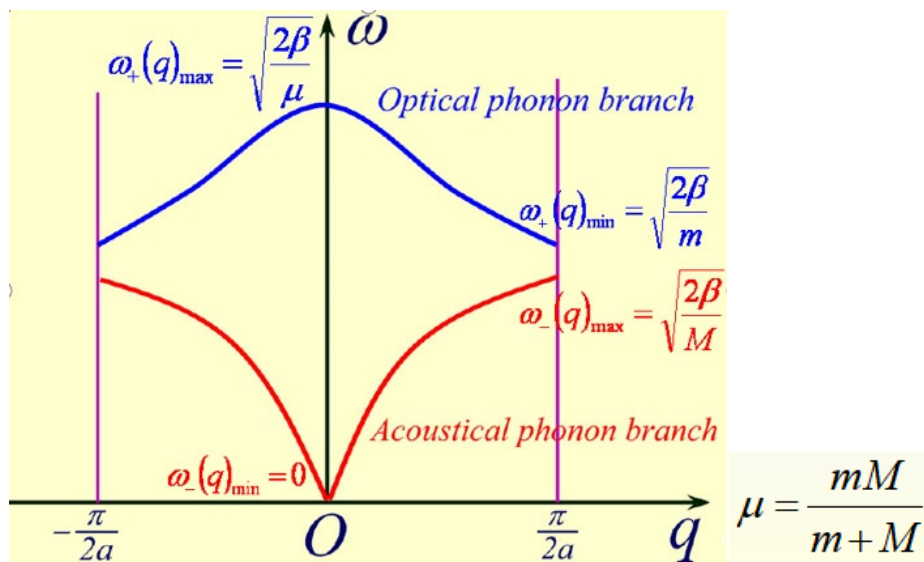


2. $\omega_{\pm}(q)$ 具有对称性和周期性

$$\begin{cases} \omega_{\pm}(q) = \omega_{\pm}(-q) \\ \omega_{\pm}\left(q + \frac{\pi}{a}\right) = \omega_{\pm}(q) \end{cases} \quad -\frac{\pi}{2a} < q \leq \frac{\pi}{2a}$$

在区间 $-\frac{\pi}{2a} \sim +\frac{\pi}{2a}$ 之外并不提供新的格波，因此可以将 q 限制在 $-\frac{\pi}{2a} \sim +\frac{\pi}{2a}$ 区间(第一布里渊区)内。

3. $\omega_{\pm}(q)$ 的取值范围



(蓝色部分是光学子，对应于 $w_+(q)$;
红色部分是声学子，对应于 $w_-(q)$)

3.4(2) 声学波与光学波

还是从那个矩阵中推出一些结论

$$\begin{pmatrix} m\omega^2 - 2\beta & 2\beta \cos qa \\ 2\beta \cos qa & M\omega^2 - 2\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0$$

(A B 表示振动幅度)

光学波 (蓝色部分，对应 $w_+(q)$) :

$$\text{光学波: } \left(\frac{A}{B} \right)_{\omega_+} = \frac{2\beta - M\omega_+^2}{2\beta \cos qa} < 0 \quad \text{表明基元中原子相对运动!}$$

$$q \rightarrow 0, \left(\frac{A}{B} \right)_{\omega_+} = -\frac{M}{m} \quad q \rightarrow \pm \frac{\pi}{2a}, \left(\frac{A}{B} \right)_{\omega_+} = -\infty$$

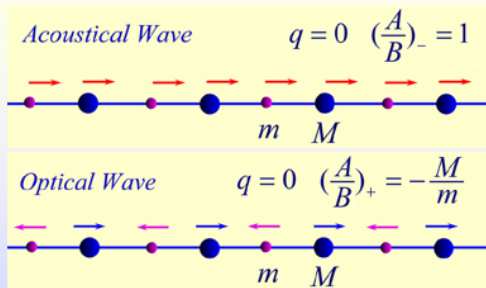
声学波 (红色部分，对应于 $w_-(q)$)

$$\text{声学波: } \left(\frac{A}{B} \right)_{\omega_-} = \frac{2\beta \cos qa}{2\beta - m\omega_-^2} > 0 \quad \text{表明基元中原子同向运动!}$$

$$q \rightarrow 0, \left(\frac{A}{B}\right)_{\omega_-} = 1 \qquad q \rightarrow \pm \frac{\pi}{2a}, \left(\frac{A}{B}\right)_{\omega_-} = 0$$

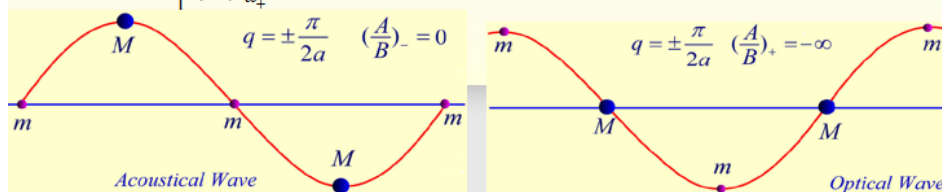
➤长波近似

$$q \rightarrow 0 \quad \begin{cases} \left(\frac{A}{B}\right)_{\omega_-} \rightarrow 1 \\ \left(\frac{A}{B}\right)_{\omega_+} \rightarrow -\frac{M}{m} \end{cases}$$



➤短波近似

$$q \rightarrow \pm \frac{\pi}{2a} \quad \begin{cases} \left(\frac{A}{B}\right)_{\omega_-} \rightarrow 0 \quad \text{即: } A \ll B & A=0 \quad \text{小原子不动} \\ \left(\frac{A}{B}\right)_{\omega_+} \rightarrow -\infty \quad \text{即: } A \gg B & B=0 \quad \text{大原子不动} \end{cases}$$



(必考!!!)

周期性边界条件:

$$\begin{aligned} u_{2n} &= u_{2(n+N)} \\ u_{2n} &= A e^{i(q \cdot 2n \cdot a - \omega t)} \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad e^{i2Naq} = 1$$

得到:

$$q = \frac{2\pi}{2Na} l = \frac{\pi}{a} \frac{l}{N}$$

结论:

- 对于双原子晶格，在第一布里渊区内， q 取 N 个分立的值，而每一个 q 又对应两个 ω 值。
- 在一维双原子晶格中可以传播 $2N$ 个格波，或者说有 $2N$ 种振动模式。其中 N 个声学支格波， N 个光学支格波。

(必考)

	原胞中 原子数	原胞自 由度数	晶体中 原胞数	晶体自 由度数	格波 支数	q 数	ω 数
一维单原子	1	1	N	N	1	N	N
一维双原子	2	2	N	$2N$	2	N	$2N$
三维多原子	l	$3l$	N	$3lN$	$3l$	N	$3lN$

波矢数(q 取值数)=晶体中的原胞数

格波的支数=原胞的自由度数

格波的个数 $[\omega(q)$ 取值数]=晶体的自由度数

声学支格波的支数=晶体的维度

晶格振动的波矢数=晶体中的原胞数。

晶格振动频率数=晶体中所有原子的自由度数。

晶格振动模式数=晶体中所有原子的自由度数。

(必考)

例题:

例: 设有一长度为 L 的一价正负离子构成的一维晶格, 正负离子间距为 a , 正负离子的质量分别为 m^+ 和 m^- , 近邻两离子的相互作用势为

$$U(r) = -\frac{e^2}{r} + \frac{b}{r^n}$$

式中 e 为电子电荷, b 和 n 为参量常数, 求

(1) 参数 b 与 e , n 及 a 的关系,

(2) 恢复力系数 β ,

(3) $q \rightarrow 0$ 时的光学波频率 ω ,

(4) 长声学波的速度 v_A 。

3.5 晶格振动的量子化以及声子

量子化了解即可

声子：声子是玻色子，不受泡利不相容原理的限制

声子： $\hbar\omega_j(q)$

- 共有 $3IN$ 种不同的振动模式，即有 $3IN$ 个不同的 $\omega_j(q)$ 值。
- 晶格振动能量的增减必须是 $\hbar\omega_j(q)$ 的整数倍。
- 一个振动模(格波) $\omega_j(q)$ ，由 $n_j(q)$ 个声子所组成。
- 整个系统则是由众多声子组成的声子气体。

意义：

- 生动的反映了晶格振动能量量子化的特点。
- 处理晶格振动有关的问题时，可以更加方便和形象。
(例：晶格振动对电子波、光波的散射等。)

特点： 1. 声子是准粒子：

- 不能离开晶格而独立存在。
- $\hbar q$ ：准动量 $\omega(\vec{q}) = \omega(\vec{q} + \vec{G}_n)$

2. 声子是玻色子：

- 声子不可区分、不受泡利原理的限制。

$$\bar{n}_j(q) = \frac{1}{e^{\hbar\omega_j(q)/k_0T} - 1}$$

3. 粒子数目不守恒

- 当温度变化时，系统中的声子数将发生变化。

4. 声子具有零点能： $\frac{1}{2}\hbar\omega_j(q)$

2 中公式可以用来计算声子数；温度增加，能量增大， ω_i 增多了，振动模不增大，声子数目增多了

小结补充：

单原子晶格振动，只有声学波，多原子晶格振动可产生声学波和光学波。对于一维以上的情况声学波和光学波又可分为纵波和横波。

q 的数目由晶格的原胞数确定， ω_q 的数目由晶格的自由度确定。

三维晶格，若原胞数为 N ，每个原胞含有 l 个原子，则晶格振动的自由度为 $3lN$ 。即可产生的格波有 $3lN$ 个。每一个 q 对应 $3l$ 个 ω ，其中声学波有 3 支、光学波有 $(3l-3)$ 支。也就是说， $3lN$ 个格波中有 $3N$ 个声学波， $(3l-3)N$ 个光学波。

用声子语言来描述晶格振动问题：晶格振动时产生声子，声子的能量是 $\hbar\omega_j(q)$ ， $\omega_j(q)$ 是声子频率，共有 $3lN$ 种不同模式。一个格波，也就是一种振动模，称为一种声子。如果振动模从基态 (能量为 $\frac{1}{2}\hbar\omega_j(q)$) 激发到能量为 $(n_j(q)+\frac{1}{2})\hbar\omega_j(q)$ 的激发态，那么就产生了能量为 $\hbar\omega_j(q)$ 的 $n_j(q)$ 个声子。共有 3 支声学声子， $3l-3$ 支光学声子。

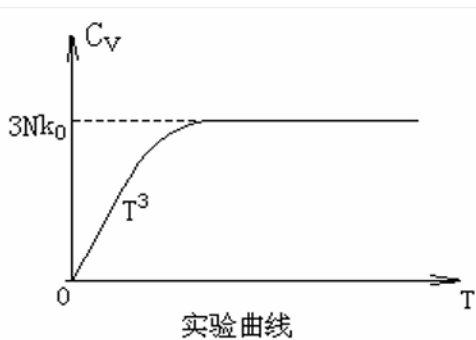
3.6 晶格的热容

经典理论在低温段不符

经典理论：

每个自由度平均能量 k_0T ，
系统总能量= $3Nk_0T$ 。（与 T 是一次方关系）

但实际上：



在低温时是 T^3 的关系

声子理论：

频率为 $\omega_j(q)$ 的格波的平均声子数为：

$$\bar{n}_j(q) = \frac{1}{e^{\hbar\omega_j(q)/k_0T} - 1}$$

引入了一个模密度的量：

如果 $\omega_j(q)$ 非常密集, 近似连续:

模密度

$$C_V = \int_0^{\omega_m} k_0 \left(\frac{\hbar \omega}{k_0 T} \right)^2 \frac{e^{\hbar \omega / k_0 T}}{(e^{\hbar \omega / k_0 T} - 1)^2} \rho(\omega) d\omega$$

爱因斯坦模型:

假设:

爱因斯坦模型假设: $\omega_j(q) = \omega_E$

假定晶体中共有 N 个原子, 总的自由度为 $3N$ 。

得到:

$$C_V = 3Nk_0 \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 \frac{e^{\theta_E/T}}{(e^{\theta_E/T} - 1)^2}$$

引入了爱因斯坦温度

爱因斯坦温度

$$\theta_E = \frac{\hbar \omega_E}{k_0}$$

验证:

$$\text{高温时: } T \gg \theta_E \quad C_V = 3Nk_0$$

$$\text{低温时: } T \ll \theta_E \quad C_V = 3Nk_0 \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 e^{-\theta_E/T}$$

(可以推出来的)

会出现:

$T \rightarrow 0$ 时, C_V 以指数方式趋于 0。

(正常的是 T^3 的方式趋近于 0)

原因? 爱因斯坦假定只有一个振动频率, 因而忽略了格波的色散关系。

德拜模型 (重点, 考点):

假设:

假定晶体中共有 N 个原子，总的自由度为 $3N$ 。

德拜模型假设：可以将晶格近似为连续介质，

纵波横波具有相同的速度 v_p ： $\omega(q) = v_p q$

为了保证振动模式数=总自由度数，

引入频率上限 ω_D ： $\int_0^{\omega_D} \rho(\omega) d\omega = 3N$

设模密度为：

$$\text{模密度: } \rho(\omega) = \frac{3V\omega^2}{2\pi^2 v_p^3}$$

代入引入的频率上限公式后，得到德拜频率：

德拜频率

$$\omega_D = (6\pi^2 n)^{\frac{1}{3}} v_p$$

代入求 C_V 的公式中可得：

$$C_V = 9Nk_0 \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\frac{\theta_D}{T}} \frac{e^x x^4}{(e^x - 1)^2} dx$$

其中设置了德拜温度和一个无量纲的代量：

德拜温度

$$\theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_0} \quad x = \frac{\hbar \omega}{k_0 T}$$

验证：

$$C_V = 9Nk_0 \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\frac{\theta_D}{T}} \frac{e^x x^4}{(e^x - 1)^2} dx$$

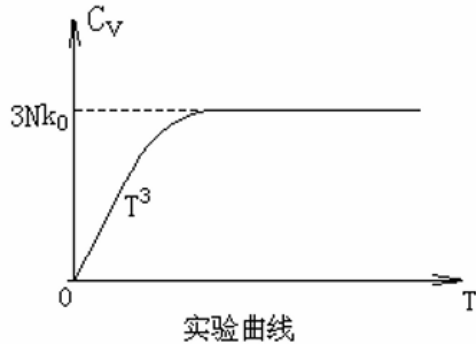
$$\text{高温时: } T \gg \theta_D \quad C_V = 3Nk_0$$

$$\text{低温时: } T \ll \theta_D \quad C_V = \frac{12\pi^4}{5} Nk_0 \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3$$

$T \rightarrow 0$ 时, C_V 以 T^3 趋于 0。

局限性：一般只适用于 $T < \frac{1}{30} \theta_D$ 的范围。

（主要是模密度在低温时比较简单，温度稍高模密度就比较复杂了）



3.6(补充)金属热容

金属的热容量=电子热容+晶格热容

N 个电子构成的系统，电子热容：

$$C_V^e = \frac{\pi^2}{2} Nk_0 \left(\frac{k_0 T}{E_F^0} \right)$$

N 个原子构成的系统，晶格热容：

$$C_V^a = \frac{12\pi^4}{5} Nk_0 \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3$$

低温金属的热容量=电子热容+晶格热容

其中，电子热容与 T 成正比，晶格热容与 T^3 成正比

3.7 晶体的热传导：

非简并效应：

$$U(r) = U(a + \delta)$$

$$= U(a) + \left(\frac{dU}{dr} \right)_a \delta + \frac{1}{2!} \left(\frac{d^2U}{dr^2} \right)_a \delta^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{d^3U}{dr^3} \right)_a \delta^3 + \dots$$

$$F = - \frac{dU}{dr} = - \left(\frac{d^2U}{dr^2} \right)_a \delta = -\beta \delta$$

为什么要考虑非简谐效应呢？是因为在简谐近似下，格波间（声子间）不存在相互作用，系统永远不会达到平衡，即热阻为无穷，热导率为 0
因此，要解释热传导现象，必须要考虑声子间的相互作用，即考虑非简谐效应

3.7.1 热导率：

基础原理：若给定的样品两端温度不等，热流就会从高温端流向低温端。

固体的导热本领由热导率描述

能流密度 Q 正比于温度梯度：

$$Q = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x} \quad \kappa: \text{热导率}$$

（热导率只与材料特性有关）

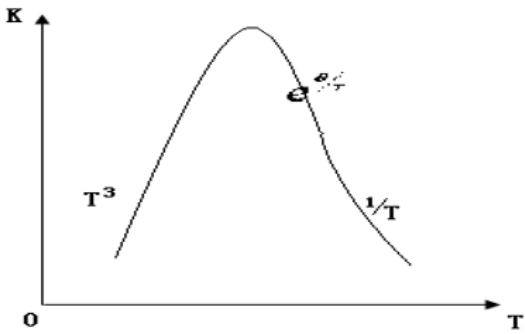
晶格振动系统可以看作“声子气”系统，直接套用气体分子的热传导公式即可：

$$\kappa = \frac{1}{3} C_V l \bar{v}$$

C_V : 晶格比热
 l : 平均自由程
 \bar{v} : 平均速度

$$\kappa = \frac{1}{3} C_V l \bar{v}$$

$$l \propto \frac{1}{\bar{n}} = e^{\hbar\omega/KT} - 1$$



	极低温区	低温区	高温区
C_V	T^3	T^3	Const.
l	L	$e^{\hbar\omega/KT}$	$\frac{1}{T}$
\bar{v}	Const.	Const.	Const.
$\kappa = \frac{1}{3} C_V l \bar{v}$	$L \cdot T^3$	$e^{\theta/2T}$	$\frac{1}{T}$

会考趋势

声子的散射机制

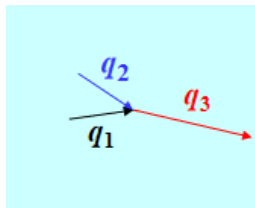
声子之间的散射

声子受晶体中点缺陷(杂质、空位)的散射

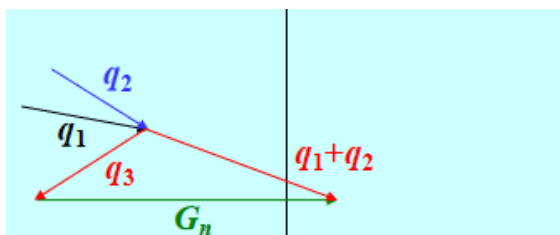
声子受样品边界的散射

$$\hbar\vec{q}_1 + \hbar\vec{q}_2 = \hbar\vec{q}_3 + \hbar\vec{G}_n \quad \left\{ \begin{array}{l} \vec{G}_n = 0: \text{正常过程(N过程)} \\ \vec{G}_n \neq 0: \text{倒逆过程(U过程)} \end{array} \right.$$

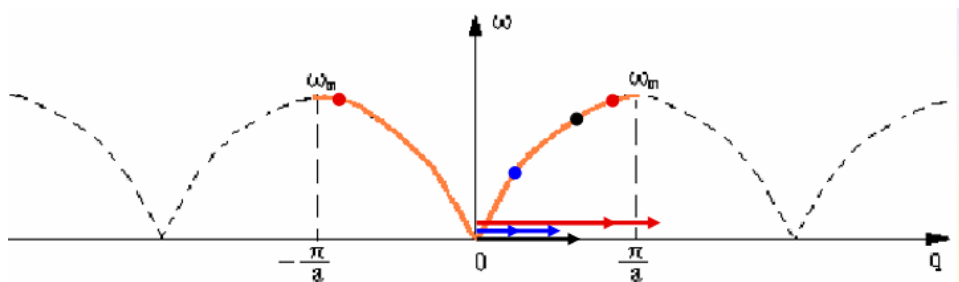
$\vec{G}_n = 0$: 正常过程(N过程) 对热阻无贡献!



$\vec{G}_n \neq 0$: 倒逆过程(U过程) 对热阻有贡献!



(在布里渊区会发生反射, 动量不守恒)



(在第一布里渊区的表示)

3.8 晶格振动的应用

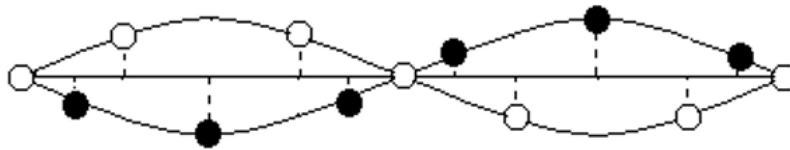
3.8.1 离子晶体的红外光学性质

离子晶体的特征之一: 大多数离子晶体对可见光是透明的, 但在远红外区域则有一特征吸收峰。

远红外区的波长很大, 即 $q \rightarrow 0$

根据一维双原子的公式:

$$q \rightarrow 0 \quad \left(\frac{A}{B} \right)_{\omega_+} \rightarrow -\frac{M}{m}$$



在半波长的范围内，正离子所组成的一些布喇菲原胞同向地位移，而负离子所组成的一些布喇菲原胞反向地位移，使晶体出现宏观的极化。长光学波又称为极化波。

离子晶体长光学波可以用光波激发，如果它们具有相同的频率和波矢，可以发生共振，这决定了离子晶体的红外光学性质，使离子晶体在红外区对光波有强的吸收。

3.8.2 中子的非弹性散射

中子的非弹性散射可以用来测量声子的色散关系。

散射过程遵守能量守恒和动量守恒：

$$\frac{\bar{p}^2}{2m_n} \pm \hbar\omega_j(q) = \frac{\bar{p}'^2}{2m_n}$$

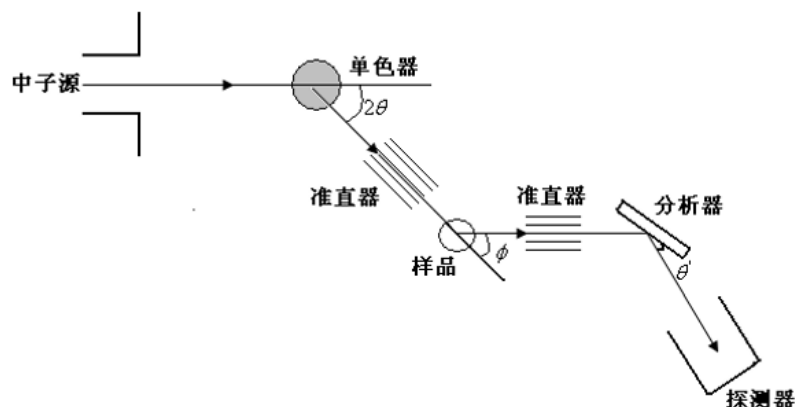
$$\bar{p} \pm \hbar\bar{q} + \hbar\bar{G} = \bar{p}'$$

\bar{p} 、 \bar{p}' ：散射前、后中子的动量

$\omega_j(\bar{q})$ ：吸收或发射的声子的频率

\bar{q} ：吸收或发射声子的波矢

只要测出各个方位上散射前后的中子能量差，并根据散射前后中子束的几何关系求出 $\bar{p}' - \bar{p}$ ，就可决定声子的振动谱。



三轴中子谱仪

金属的热导率：

$$\begin{aligned} \kappa &= \kappa_e + \kappa_{ph} \\ \downarrow \quad \kappa_e &\approx (20 \sim 100) \kappa_{ph} \\ \kappa &\approx \kappa_e = \frac{\pi^2 N k_0^2 T \tau_F}{3 m^*} \end{aligned}$$

金属的电导率：

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*}$$

金属中电子运动所受阻力的来源：

- 电子-声子散射。
- 晶体中的杂质、缺陷、晶粒间界等结构上的不完整所引起的散射。

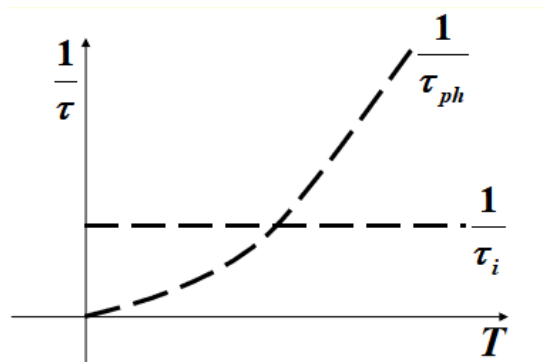
金属热导率和电导率的关系：

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{1}{3} \left(\frac{\pi k_0^2}{e} \right)^2 T$$

$$\begin{aligned} C_{WF} &= \frac{\kappa}{\sigma T} = \frac{1}{3} \left(\frac{\pi k_0^2}{e} \right)^2 \\ &= 2.31 \times 10^{-8} W \Omega K^{-2} \end{aligned}$$

热导率中的 τ 讨论：

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{ph}} + \frac{1}{\tau_i}$$



高温时，声子散射起主要作用 $\tau = \tau_{ph}$

$$\rho_{ph} = \frac{m^*}{ne^2\tau_{ph}} \propto \frac{1}{\tau_{ph}} \propto \frac{1}{l_{ph}} \propto \bar{n}_{ph} = \frac{1}{e^{\hbar\omega/KT} - 1} \approx \frac{KT}{\hbar\omega}$$

低温时，杂质缺陷散射起主要作用 $\tau = \tau_i$

$$\propto \tau^2 \propto \tau^2 \propto \frac{1}{\tau^2} \propto \tau^*$$