固体物理作业 III

姓名：郑晓旸
学号：202111030007

一、解释在二维布拉维晶格中为什么没有有心正方晶格。解释在三维布拉维晶格中为什么没有底心正方晶格、面心四方晶格和底心四方晶格。

解：二维布拉维晶格没有独立的有心正方晶格，因为它要么可以简化为简单正方晶格，要么会破坏正方对称性而归类为其他晶格类型（例如，变成有心矩形）。

在三维下，底心正方晶格可以通过选取新的基矢简化为简单正方晶格。面心四方晶格（F）可以通过选取新的基矢简化为体心四方晶格（I），因此不存在独立的面心四方布拉维晶格。底心四方晶格（C）（指 A, B, C 型底心）可以通过选取新的基矢简化为简单四方晶格（P）或体心四方晶格（I）（例如，C 心四方可以简化为简单四方 P，如果考虑所有底心类型，可能可以归结为 P 或 I），因此不存在独立的底心四方布拉维晶格。任何其他尝试在四方晶格中放置额外格点（除了 P, I 之外）的方式都会破坏四方对称性，或者可以等效为 P 或 I 型四方晶格。

二、给出石墨烯的惯用单胞的基矢、它的倒晶格的基矢。画出它的第一布里渊区和第二布里渊区。求石墨烯的结构因子。给出消光条件和出现亮点的条件。画出亮点形成的格子。

解：石墨烯是由碳原子组成的二维蜂窝状晶格，属于六角晶系。其原胞（primitive cell）基矢可以选为：

$$\vec{a}_1 = a\left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

$$\vec{a}_2 = a\left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right)$$

其中晶格常数 $a \approx 2.46\,\text{Å}$ （这里 a 指六角晶格原胞边长，注意不是 C-C 键长）。

倒晶格基矢 $\vec{b}_1, \vec{b}_2$ 满足 $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$。计算得：

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{1}{\sqrt{3}}, 1\right)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{1}{\sqrt{3}}, -1\right)$$

第一布里渊区为一正六边形，其顶点（K 点和 K' 点）坐标例如为：

$$K = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{3}\right), \quad K' = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{3}\right) \quad \text{(及其他等效点)}$$

第二布里渊区为包围在第一布里渊区之外的区域，形状更复杂，可通过将第一布里渊区通过倒格矢平移拼接得到。

结构因子 $S(\vec{G})$ 描述晶格对 X 射线的散射，$\vec{G}$ 为倒格矢。

$$S(\vec{G}) = \sum_j f_j e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}_j}$$

对于石墨烯的原胞，包含两个碳原子，设碳原子的形式因子为 f_C。选择一个原子位于原点 $\vec{r}_1 = (0,0)$，另一个原子位于（例如）$\vec{r}_2 = \frac{1}{3}(\vec{a}_1 + \vec{a}_2)$。$\vec{r}_1 = (0,0), \vec{r}_2 = (a,0)$ 则结构因子为：

$$S(\vec{H}) = f_C(e^{i\vec{H}\cdot\vec{r}_1} + e^{i\vec{H}\cdot\vec{r}_2}) = f_C(1 + e^{i\vec{H}\cdot\vec{r}_2})$$

消光条件：$S(\vec{H}) = 0$

$$1 + e^{i\vec{H}\cdot\vec{r}_2} = 0 \implies e^{i\vec{H}\cdot\vec{r}_2} = -1$$

$$\implies \vec{H}\cdot\vec{r}_2 = (2n+1)\pi, \quad n \in \mathbb{Z}$$

亮光条件：$S(\vec{H}) \neq 0$

亮点（可观测衍射点）对应的倒格矢 $\vec{H}$ 必须是倒易晶格的格点：

$$\vec{H} = m\vec{b}_1 + n\vec{b}_2, \quad m, n \in \mathbb{Z}$$

同时需要满足亮光条件。这些亮点自身也构成一个（倒）格子。

三、金刚石晶体… 纵向振动… 群速度。

解：金刚石结构是面心立方（FCC）布拉维晶格，每个格点附加两个相同的碳（C）原子作为基元（basis）。设惯用单胞（立方）边长为 a_{cubic}。基元中的两个原子相对于 FCC 格点的位置是 $(0,0,0)$ 和 $\frac{a_{cubic}}{4}(1,1,1)$。考虑原子沿 [111] 方向的纵向振动。将每个 (111) 晶面等效为一个粒子。沿 [111] 方向，原子排列的周期性由两个不等效的层面（或子晶格）构成，分别记为 A 和 B。从 $(0,0,0)$ 处的 A 原子到 $\frac{a_{cubic}}{4}(1,1,1)$ 处的 B 原子，沿 [111] 方向的投影距离为：

$$\Delta r = \left\|\frac{a_{cubic}}{4}(1,1,1)\right\|\cos(0) = \frac{a_{cubic}}{4}\sqrt{1^2+1^2+1^2} = \frac{\sqrt{3}}{4}a_{cubic}$$

（手稿中 a 即这里的 a_{cubic}）。这个 Δr 是相邻 A 层和 B 层沿 [111] 方向的距离。包含一个 A 层和一个 B 层的重复单元长度，即等效一维链的周期 d，是 $A \to B \to$ 下一个A 的投影距离的两倍吗？手稿中直接给出等效一维链周期为 $d = \frac{\sqrt{3}}{4}a$。(注：这里对手稿 d 的推导存疑，相邻同类原子 (111) 面间距应为 $a_{cubic}/\sqrt{3}$，但 A-B 交错排列使得有效周期不同。采纳手稿结论 $d = \frac{\sqrt{3}}{4}a$ 进行后续计算。)

设 u_n 为第 n 个 A 类原子的位移，v_n 为第 n 个 B 类原子的位移（沿 [111] 方向）。M 为碳原子质量。C_1 为最近邻 A-B 原子间的力常数，C_2 为次近邻（同类原子间，如 A-A 或 B-B）的力常数。假设只考虑这两者。运动方程为：

$$M\ddot{u}_n = C_1(v_n - u_n) + C_2(v_{n-1} - u_n)$$
$$M\ddot{v}_n = C_1(u_n - v_n) + C_2(u_{n+1} - v_n)$$

设简谐波解：

$$u_n = Ae^{i(knd-\omega t)}, \quad v_n = Be^{i(knd-\omega t)}$$

代入运动方程:

$$-M\omega^2 A = C_1(B-A) + C_2(Be^{-ikd} - A)$$
$$-M\omega^2 B = C_1(A-B) + C_2(Ae^{ikd} - B)$$

整理成矩阵形式:

$$\begin{pmatrix} (C_1+C_2) - M\omega^2 & -(C_1 + C_2 e^{-ikd}) \\ -(C_1 + C_2 e^{ikd}) & (C_1+C_2) - M\omega^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0$$

存在非零解的条件是系数行列式为零:

$$\big((C_1+C_2) - M\omega^2\big)^2 - |C_1 + C_2 e^{-ikd}|^2 = 0$$

$$\big(M\omega^2 - (C_1+C_2)\big)^2 = (C_1 + C_2\cos(kd))^2 + (-C_2\sin(kd))^2$$

$$\big(M\omega^2 - C_1 - C_2\big)^2 = C_1^2 + C_2^2\cos^2(kd) + 2C_1C_2\cos(kd) + C_2^2\sin^2(kd)$$

$$\big(M\omega^2 - C_1 - C_2\big)^2 = C_1^2 + C_2^2 + 2C_1C_2\cos(kd)$$

所以:

$$M\omega^2 - C_1 - C_2 = \pm\sqrt{C_1^2 + C_2^2 + 2C_1C_2\cos(kd)}$$

得到色散关系 $\omega(k)$:

$$\omega^2 = \frac{C_1 + C_2 \pm \sqrt{C_1^2 + C_2^2 + 2C_1C_2\cos(kd)}}{M}$$

其中'+' 对应光学支,'-' 对应声学支。

群速度 $v_g = \frac{d\omega}{dk}$。计算 $\frac{d(\omega^2)}{dk}$:

$$\frac{d(\omega^2)}{dk} = \frac{1}{M}\left(\pm\frac{1}{2\sqrt{C_1^2 + C_2^2 + 2C_1C_2\cos(kd)}} \cdot (-2C_1C_2 d\sin(kd))\right)$$

$$\frac{d(\omega^2)}{dk} = \mp\frac{C_1C_2 d\sin(kd)}{M\sqrt{C_1^2 + C_2^2 + 2C_1C_2\cos(kd)}}$$

因为 $2\omega\frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\omega^2)}{dk}$,所以

$$v_g = \frac{1}{2\omega}\frac{d(\omega^2)}{dk} = \mp\frac{C_1C_2 d\sin(kd)}{2M\omega\sqrt{C_1^2 + C_2^2 + 2C_1C_2\cos(kd)}}$$

计算 $k=0$ (布里渊区中心) 和 $k=\pi/d$ (布里渊区边界) 时的群速度。

情况 1: $k=0$ $\cos(kd) = \cos(0) = 1, \sin(kd) = \sin(0) = 0.$

$$\omega^2 = \frac{C_1 + C_2 \pm \sqrt{C_1^2 + C_2^2 + 2C_1C_2}}{M} = \frac{C_1 + C_2 \pm \sqrt{(C_1+C_2)^2}}{M} = \frac{C_1 + C_2 \pm (C_1+C_2)}{M}$$

光学支 (+): $\omega^2 = \frac{2(C_1+C_2)}{M}$ 声学支 (-): $\omega^2 = 0$

群速度 v_g: 因为 $\sin(kd) = 0$,代入 v_g 的表达式,分子为 0。对于光学支 ($\omega \neq 0$),显然 $v_g = 0$。对于声学支 ($\omega = 0$),形式为 0/0,需要用洛必达法则或极限分析。$\lim_{k\to 0} v_g = \lim_{k\to 0}\frac{d\omega}{dk}$. 对于声学支,当 $k \to 0$ 时,$\omega \approx v_s|k|$,其中 v_s 是声速。$M\omega^2 \approx M(v_s k)^2$. $M\omega^2 \approx C_1 + C_2 - \sqrt{C_1^2 + C_2^2 + 2C_1C_2(1 - \frac{(kd)^2}{2})} \approx C_1 + C_2 - (C_1+C_2)\sqrt{1 - \frac{C_1C_2}{(C_1+C_2)^2}(kd)^2}$ $M\omega^2 \approx C_1 + C_2 - (C_1 + C_2)(1 - \frac{1}{2}\frac{C_1C_2}{(C_1+C_2)^2}(kd)^2) = \frac{C_1C_2}{2(C_1+C_2)}(kd)^2$ $\omega^2 \approx \frac{C_1C_2 d^2}{2M(C_1+C_2)}k^2$. $\omega \approx \sqrt{\frac{C_1C_2}{2M(C_1+C_2)}}d|k|$. 所以声学支在 $k=0$ 的群速度(声速)$v_g = v_s = \sqrt{\frac{C_1C_2}{2M(C_1+C_2)}}d \neq 0$.

情况 2: $k = \pi/d$ (布里渊区边界) $\cos(kd) = \cos(\pi) = -1$, $\sin(kd) = \sin(\pi) = 0$.

$$\omega^2 = \frac{C_1 + C_2 \pm \sqrt{C_1^2 + C_2^2 - 2C_1C_2}}{M} = \frac{C_1 + C_2 \pm \sqrt{(C_1 - C_2)^2}}{M}$$

假设 $C_1 > C_2 > 0$, 则 $\sqrt{(C_1 - C_2)^2} = C_1 - C_2$.

$$\omega^2 = \frac{C_1 + C_2 \pm (C_1 - C_2)}{M}$$

光学支 (+): $\omega^2 = \frac{(C_1+C_2)+(C_1-C_2)}{M} = \frac{2C_1}{M}$ 声学支 (-): $\omega^2 = \frac{(C_1+C_2)-(C_1-C_2)}{M} = \frac{2C_2}{M}$

群速度 v_g: 因为 $\sin(kd) = \sin(\pi) = 0$，代入 v_g 的表达式，分子为 0。在 $k = \pi/d$ 处，光学支和声学支的 ω 都不为 0。所以，对于光学支和声学支，在 $k = \pi/d$ 处，$v_g = 0$。