



华东师范大学

East China Normal University

晶格动力学学习报告

Lattice Dynamics Learning Report

姓 名: 刘光远

学 号: 10222150413

学 院: 通信与工程学院

专 业: 微电子科学与工程

指导教师: 翁国恩

职 称: 副教授

2022 年 11 月

目录

摘要	I
1、 问题导向	1
2、 波恩-奥本海默近似 (Born-Oppenheimer Approximation)	2
3、 晶格振动 (Lattice Vibration)	3
3.1 一维单原子链 (1D Monoatomic Chain)	3
3.1.1 运动方程 (Equation of Motion)	3
3.1.2 波恩-卡门边界条件 (Born-Karman Boundary Condition)	4
3.1.3 色散关系 (Dispersion Relation)	5
3.1.4 格波 (Lattice Waves)	6
3.2 一维双原子链 (1D Diatomic Chain)	7
3.2.1 运动方程 (Equation of Motion)	7
3.2.2 色散关系 (Dispersion Relation)	8
参考文献	10

晶格动力学学习报告

摘要：

本篇学习报告主要记录学习晶格动力学过程和心得。报告开头说明了晶格动力学是在波恩-奥本海默近似的基础上展开研究的

关键词：晶格动力学，晶格振动，声子，声子热容

1、 问题导向

对于大部分固体而言，在室温附近或在比较高的温度下，它的摩尔热容都是一个固定值 $3R$ (R 是理想气体常数)，具体值为 $24.6 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$ 。从能量均分学说的角度出发，在经典理论中这一规律由杜隆-珀蒂定律概括。^[1]

事实上，多数晶体在室温或高温下，热容的实验值十分吻合，如下图1-1所示。但随着温度下降，实验发现固体热容随温度同时下降。所以在较低的温度下，热容随温度下降而下降的现象，经典的杜隆-珀蒂定律无法解释。

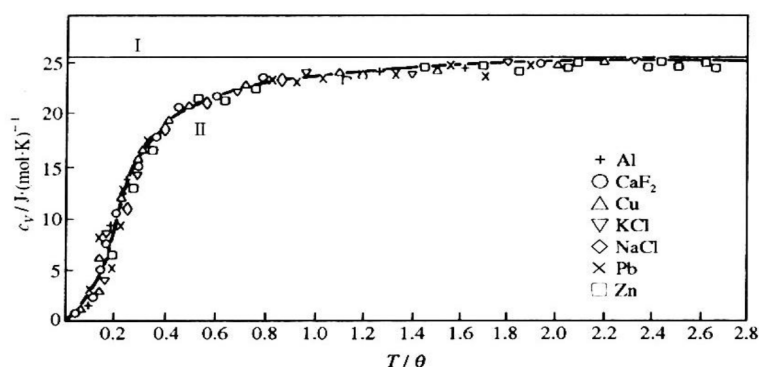


图 1-1 固体热容实验值与理论值的比较

Figure 1-1 Comparison Between Experiment and Theory of Heat Capacity

因此，围绕晶格动力学重新研究原子的运动，从而认识到原子运动对晶体的热性质（如热容）的影响，就是本次学习报告重点关注方向。

2、波恩-奥本海默近似 (Born-Oppenheimer Approximation)

晶体表现出来的各种物理性质，背后的物理原理在于其中组成具体的基本粒子的运动规律，如原子和电子。以钠晶体为例，其中基本粒子的数量级在 10^{23} ，而基本粒子之间又存在着相互作用，要去考察他们各自的运动规律，从数学上来讲，这个多体问题是很难有严格解的。

因此，如图2-1所示，采用波恩-奥本海默近似来简化分析，将电子运动和原子核运动分开处理。当我们考虑原子运动时，就不再关注电子是如何运动的；考虑电子运动的时候也同理。有关前者的研究就是本次报告的主题——晶格动力学。

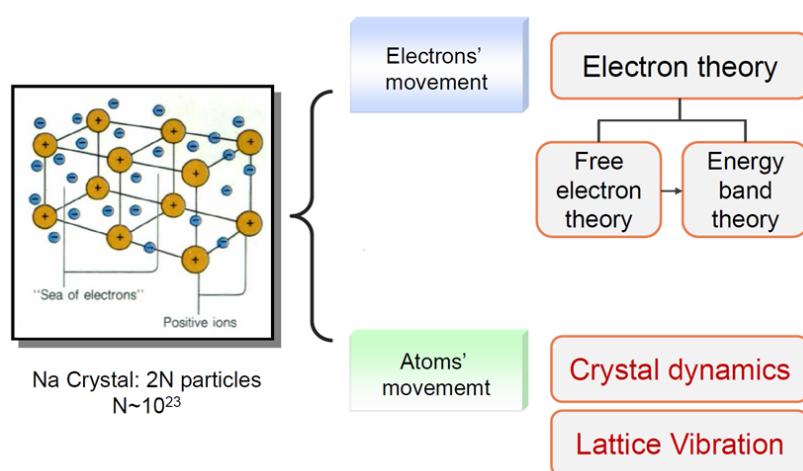


图 2-1 波恩-奥本海默近似

Figure 2-1 Born-Oppenheimer Approximation

3、晶格振动 (Lattice Vibration)

在晶体中，原子都是呈周期性排列，周期排列形成的点阵就是晶格，每个晶格的位置都是原子的平衡位置，所有的原子都在平衡位置做微小的振动。本章为研究晶格振动的基本原理，先从一维单原子链入手，分析其运动方程、边界条件、色散关系、格波形式等等，之后分析一维双原子相关问题并推广到三维。最后，对格波进行量子化分析，引入声子这个概念，从而能够方便地计算晶格振动能量。

3.1 一维单原子链 (1D Monoatomic Chain)

如图 3-1 所示，假设一个晶格常数为 a ，有 N 个原胞的一维单原子链，每个原胞内只有一个原子，为研究方便，先做以下两个假设：

简谐假设，原子做简谐振动，原子之间作用力为简谐力，该力满足

$$F = -\beta x; \quad (3.1)$$

最近邻假设，即原子只和最近邻原子有相互作用。

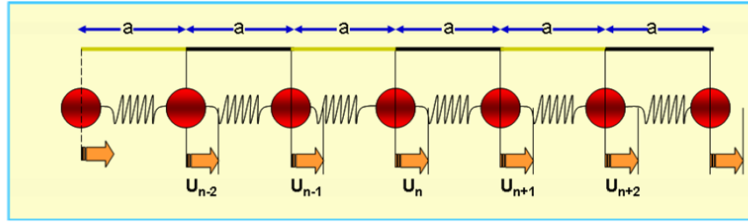


图 3-1 一维单原子链

Figure 3-1 1D Monoatomic Chain

在以上假设的基础上，对该模型进行如下分析。

3.1.1 运动方程 (Equation of Motion)

对一维单原子链中第 n 个原子进行受力分析，即可得到它的运动方程。根据牛顿第二定律和胡克定律，有

$$m\ddot{u}_n = \beta(u_{n+1} - u_n) - \beta(u_n - u_{n-1}), \quad (3.2)$$

化简可得

$$m\ddot{u}_n = \beta(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}), \quad (3.3)$$

式中 β ，可以由两个原子之间的作用势进行的泰勒展开后得到，这里不做讨论； u_n 表示第 n 个原子的位移， m 为原子质量。

下面对该微分方程进行求解，根据二阶微分方程解的特征，可知 u_n 应满足：

$$u_n = Ae^{i(kx_n - \omega t)} = Ae^{i(nak - \omega t)}, \quad (3.4)$$

将其带回原方程，可得 $\omega \sim k$ 关系，即色散关系：

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|, \quad (3.5)$$

将在3.1.3节对其进行讨论。

3.1.2 波恩-卡门边界条件 (Born-Karman Boundary Condition)

波恩-卡门边界条件，又称周期性边界条件。由于前面所考虑的运动方程实际上只适用于无穷长的链，因为所有的原子都假设有相同的运动方程，而一个有限的链两端的原子显然应当与内部的原子有所不同。虽然仅少数原子运动方程不同，但由于所有原子的方程都是联立的，具体解方程就复杂得多。

为了避免这种情况，采用波恩-卡门边界条件，将含 N 个原胞的环状链作为一个有限链的模型，如图3-2所示。

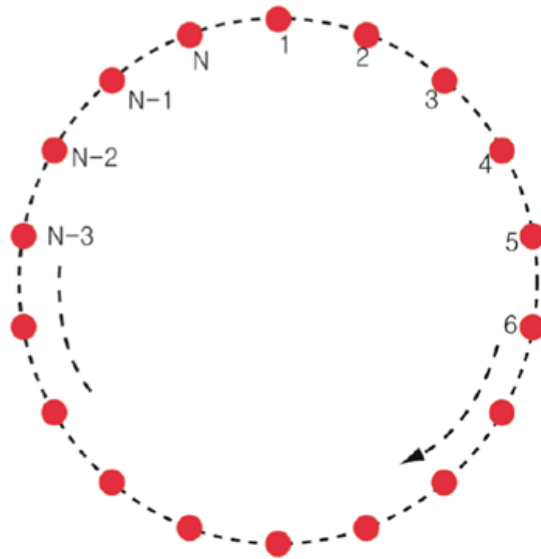


图 3-2 波恩-卡门边界条件

Figure 3-2 Born-Karman Boundary Condition

对于该模型，由于其周期性，显然有以下等式成立：

$$\begin{aligned} u_{N+1} &= u_1 \\ u_{N+n} &= u_n. \end{aligned} \quad (3.6)$$

将该式带入运动方程，可以得到关于 k 的一系列取值：

$$k = \frac{2\pi}{Na}m, \quad (3.7)$$

其中， m 可以取所有整数。

由此可知， k 的取值并不是连续的，而是一个个分立的值。但是由于在晶体中， N 是一个及其大的数，因此，相较于布里渊区的大小， k 可以当作是准连续的一个量。此处得到的 k 的取值，将在后面分析格波数量时起到关键作用。

3.1.3 色散关系 (Dispersion Relation)

将等式3.5和3.7结合起来，得到完整的色散关系表达式：

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|, \quad k = \frac{2\pi}{Na}m, \quad (3.8)$$

其中， m 可以取所有整数。

色散关系反映的是波速和波长的关系，式中 ω 和 k 分别可以作为反映波速和波长的物理量，因此该 $\omega \sim k$ 关系也称为色散关系。

根据色散关系表达式，可以作出 $\omega \sim k$ 在第一布里渊区的关系图：

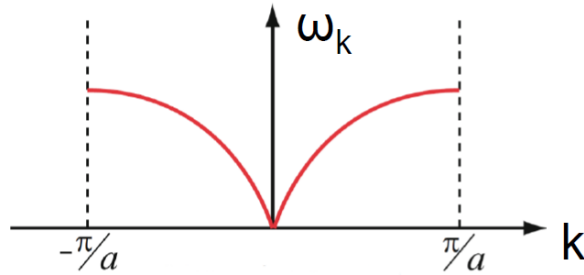


图 3-3 $\omega \sim k$ 在第一布里渊区的关系图

Figure 3-3 $\omega \sim k$ in 1st B.Z.

由简谐振荡的相关概念可知，一维单原子链中的一个原子的固有频率由下式决定：

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{\beta}{m}}; \quad (3.9)$$

而由色散关系的表达式3.8可知，一维单原子链的出现，上述谐振子的固有频率 ω_0 被展宽为一个宽度为 $2\omega_0$ 的频带，在这个频带中，可以给出频率的最大值和最小值如下：

$$\omega_M = \sqrt{\frac{\beta}{m}} \quad (3.10)$$

$$\omega_m = 0. \quad (3.11)$$

因此,可以说色散关系反映的是一维单原子链中所有原子的运动情况,它应该表征的是一些可以描述所有原子运动的物理量。事实上,这 N 个原子的集体行为,可以反映出一种波动(行波),这一波动称为格波,将在下一节进行讨论。

3.1.4 格波 (Lattice Waves)

在经典物理中,机械波可以由波矢、频率等物理量来描述,对于晶体中的格波仍然可以如此分析。由上一节给出的色散关系,一个确定的 k ,可以对应一个 ω_0 ,同时也对应了晶体中的一个格波,或者是一种振动模式。

为了更加清晰地了解格波的性质,现在引入独立格波这个概念。由于晶体的周期性,可以给出:

$$\omega(k) = \omega(k + G), \quad G = m \cdot \frac{2\pi}{a} \hat{a}, \quad (3.12)$$

G 是晶体中倒空间的倒格矢, m 可以取所有整数。

于是可以得知对应于 k 和 $k + G$ 的格波,实际上具有相同的 ω ,反映在原子振动上,这两条格波描述的是同一种振动模式。因此在分析过程中,可以只分析其中一条。将这两条格波对应同一种振动模式的格波视为一种格波,称为独立格波,此时一个 k 可以唯一对应一个格波。

将上述分析推广至整个晶体,只需要分析第一布里渊区内的格波的性质,便可以得出有关晶格振动的相关规律。于是我们可以把限定在第一布里渊区内的格波视为独立格波,而这些格波可以由简约波矢(位于第一布里渊区内的波矢)描述。

下面就来讨论以下在一维单原子链中,独立格波的数量问题。由波恩-卡门边界条件给出的 k 的取值表达式3.7,若限定 k 在第一布里渊区内取值,可以得出 m 的取值范围:

$$-\frac{N}{2} \leq m < \frac{N}{2}, \quad (3.13)$$

因此 m 的取值个数为 N 个,在第一布里渊区内 k 的取值也只能有 N 个。根据色散关系和独立格波的概念,在一维单原子链中,晶体中也只能有 N 个独立的振动模式或 N 个独立格波。

同时,在一维单原子链中,每个原子有一个自由度数, N 个原子则有 N 个自由度数,于是可以得出以下等式:

$$\text{总自由度数} = \text{独立格波数}. \quad (3.14)$$

可以证明,这一结论对于一维双原子链以及三维情况都是成立的,对于后面的学习十分重要。

3.2 一维双原子链 (1D Diatomic Chain)

如图 3-4 所示, 假设一个晶格常数为 a , 有 N 个原胞的一维双原子链, 每个原胞内有两个原子。为研究方便, 同样作一维单原子链中的假设, 即简谐假设和最近邻假设。

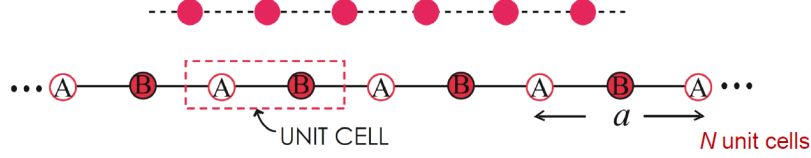


图 3-4 一维双原子链

Figure 3-4 1D Diatomic Chain

在以上假设的基础上, 对该模型进行如下分析。

3.2.1 运动方程 (Equation of Motion)

类似一维单原子链, 对一维双原子链中第 n 个原胞进行受力分析, 即可得到它的运动方程。根据牛顿第二定律和胡克定律, 有

$$M\ddot{u}_n = \beta(v_n + v_{n-1} - 2u_n) \quad (3.15)$$

$$m\ddot{v}_n = \beta(u_n + u_{n+1} - 2v_n), \quad (3.16)$$

式中 β , 可以由两个原子之间的作用势进行的泰勒展开后得到, 这里不做讨论。 u_n 表示第 n 个原胞中一个原子的位移, M 为该原子质量; v_n 表示第 n 个原胞中另一个原子的位移, m 为该原子质量。为了分析方便, 假设 $M > m$ 。如下图3-5所示。

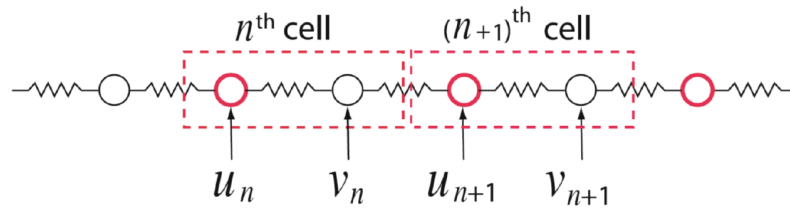


图 3-5 一维双原子链中的一个原胞

Figure 3-5 A Primitive Cell in 1D Diatomic Chain

下面求解这个运动方程 (组)。根据二阶微分方程解的特征, 可知 u_n 和 v_n 应满足:

$$u_n = Ae^{i(nak - \omega t)} \quad (3.17)$$

$$v_n = Be^{i[(n+\frac{1}{2})ak - \omega t]}, \quad (3.18)$$

将其带回原方程，可得一个线性齐次代数方程组：

$$\begin{cases} (2\beta - M\omega^2)A - 2\beta \cos(\frac{1}{2}ak)B = 0, \\ -2\beta \cos(\frac{1}{2}ak)A + (2\beta - m\omega^2)B = 0. \end{cases} \quad (3.19)$$

要使该代数方程组有 A 和 B 的非零解，从而使得运动方程的表达式有意义，需将 A 和 B 当作求解变量，列出其系数行列式并令该行列式的值为零，于是有：

$$\begin{vmatrix} 2\beta - M\omega^2 & -2\beta \cos(\frac{1}{2}ak) \\ -2\beta \cos(\frac{1}{2}ak) & 2\beta - m\omega^2 \end{vmatrix} = 0. \quad (3.20)$$

由上式可得 $\omega^2 \sim k$ 关系，亦即色散关系：

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{\beta}{Mm} [(M + m) \pm \sqrt{M^2 + m^2 + 2Mm \cos(ak)}]. \quad (3.21)$$

式中，取 $+$ 时，表示 ω_+^2 ，此时对应较高的频率；取 $-$ 时，表示 ω_-^2 ，此时对应较低的频率。

与一维单原子链中相同，一维双原子链依据波恩-卡门边界条件也可以得到关于 k 的一系列取值：

$$k = \frac{2\pi}{Na}m, \quad (3.22)$$

其中， m 可以取所有整数。

3.2.2 色散关系 (Dispersion Relation)

将式3.21中的 ω_+^2 和 ω_-^2 分开写，再次叙述这一色散关系：

$$\omega_+^2 = \frac{\beta}{Mm} [(M + m) + \sqrt{M^2 + m^2 + 2Mm \cos(ak)}] \quad (3.23)$$

$$\omega_-^2 = \frac{\beta}{Mm} [(M + m) - \sqrt{M^2 + m^2 + 2Mm \cos(ak)}]. \quad (3.24)$$

根据色散关系表达式，可以作出 $\omega \sim k$ 的关系图：

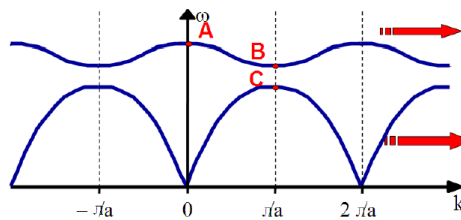


图 3-6 $\omega \sim k$ 的关系图

Figure 3-6 $\omega \sim k$

图中，位于上方的曲线就是高频的 ω_+ ，位于下方的曲线就是低频的 ω_- 。这与一维单原子链中的情况略有不同，此时在图中存在两条 $\omega \sim k$ 的曲线。

高频的 ω_+ 称为光学支 (Optical Branch)，低频的 ω_- 称为声学支 (Acoustical Branch)。光学支和声学支中间的部分就是所谓的“禁带”，在该频率区间不存在振动。

下面，类似一维单原子链中的处理方法，我们只在第一布里渊区中讨论独立格波的一些性质。

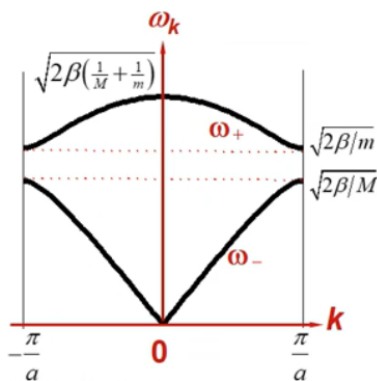


图 3-7 $\omega \sim k$ 在第一布里渊区的关系图

Figure 3-7 $\omega \sim k$ in 1st B.Z.

如图3-7所示，

参考文献

- [1] 叶益聪. 简明固体物理[Z].