



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
参考文献	6

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。

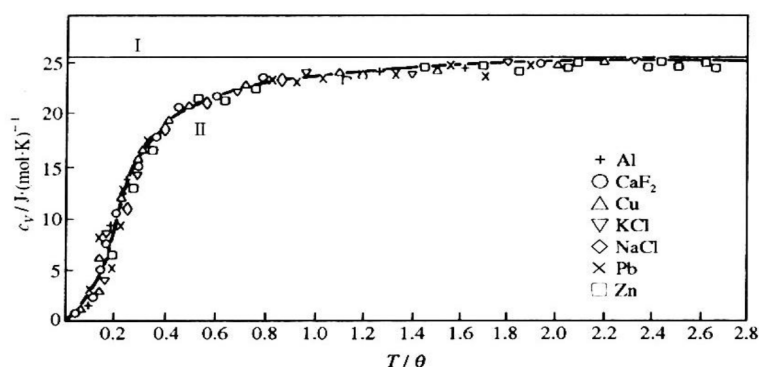


图 1-1 固体热容实验值与理论值的比较

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。

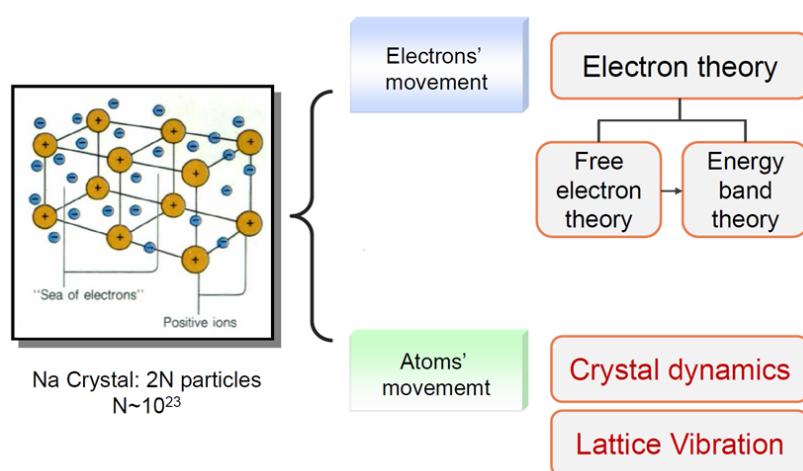


图 2-1 波恩-奥本海默近似

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 的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。

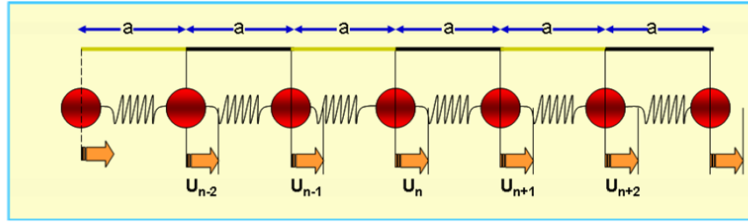


图 3-1 一维单原子链

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。

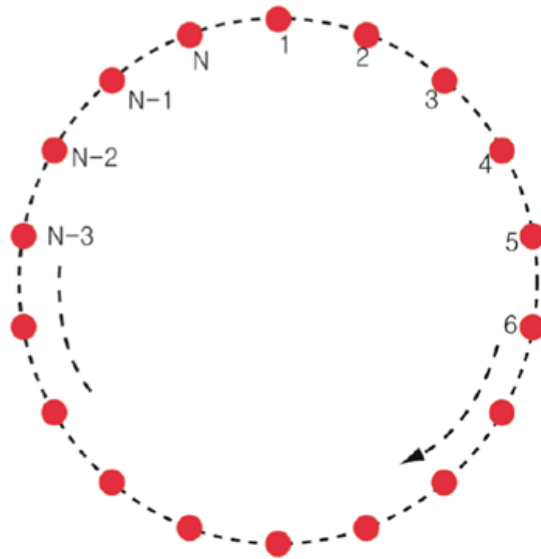


图 3-2 波恩-卡门边界条件

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)

参考文献

- [1] 叶益聪. 简明固体物理[Z].