3.23　大致绘制出$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$-GaAs突变异质结在下列情况下的能带图（假定$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$的E_g=1.85eV，GaAs的E_g为1.42eV，$\Delta E_c=2/3\Delta E_g$）

(1) N-AlGaAs与本征GaAs

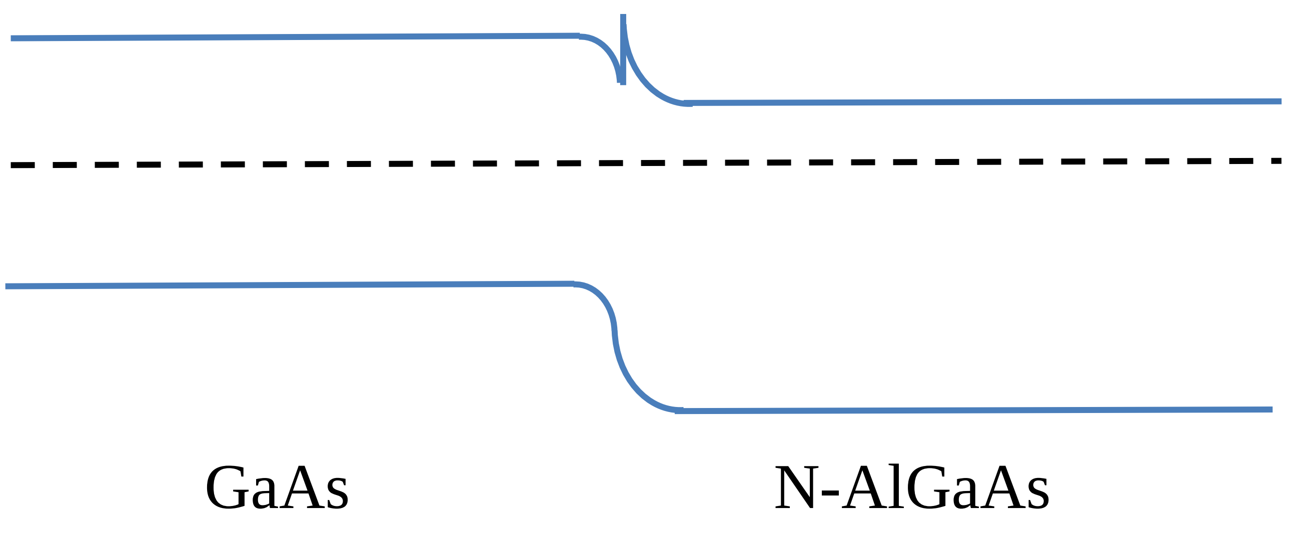
(2) N-AlGaAs与p-GaAs

(3) P-AlGaAs与n-GaAs

参考答案

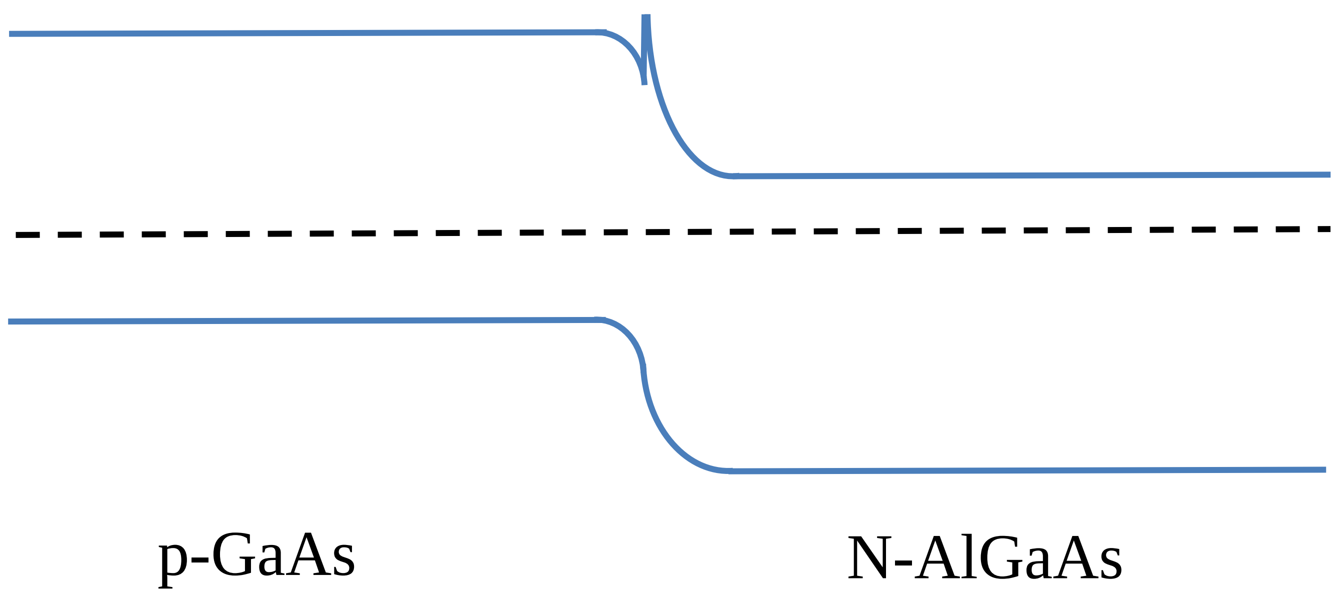
解答：

(1)



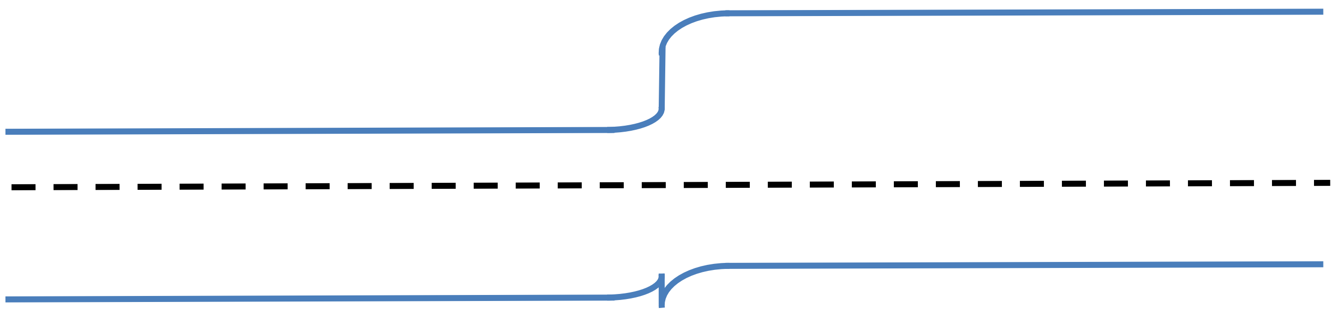
参考答案

(2)



参考答案

(3)



n-GaAs P-AlGaAs

第六章　固体的热特性

清华大学电子系

黄昆

主要内容

- 6.1 晶格振动的经典描述
- 6.2 晶格振动的量子化
- 6.3 晶格振动谱的测量
- 6.4 晶体的热特性

6.1 晶格振动的经典描述

- 6.1.1 假设固体为均匀弹性介质——弹性波（略讲）

考虑晶格的周期性——格波

- 6.1.2 简单晶格模型——一维单原子链
- 6.1.3 复式晶格模型——一维双原子链
- 6.1.4 推广——三维晶格的振动

应力与应变

- 当固体在外力作用下而不能产生位移时，它的几何形状和尺寸将发生变化，这种形变称为**应变**（无量纲）
- 如果固体有形变，那么就不再处于平衡态，而会受到力的作用，该力会有使固体回复到平衡状态的趋向。这种在固体形变时，作用在固体中单位面积上的力称为**应力**（N/m^2）
- 对于足够小的形变，其应变与应力成正比——胡克定律，应力=弹性模量×应变
- **弹性模量**一般是张量，单位N/m^2

弹性波方程

- 想讨论物质内某一质点的振动（相对平衡位置的位移及其传播情况），可由牛顿第二定律（$F=ma$）列出该质点位移u满足的方程

$$\rho\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}=C\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

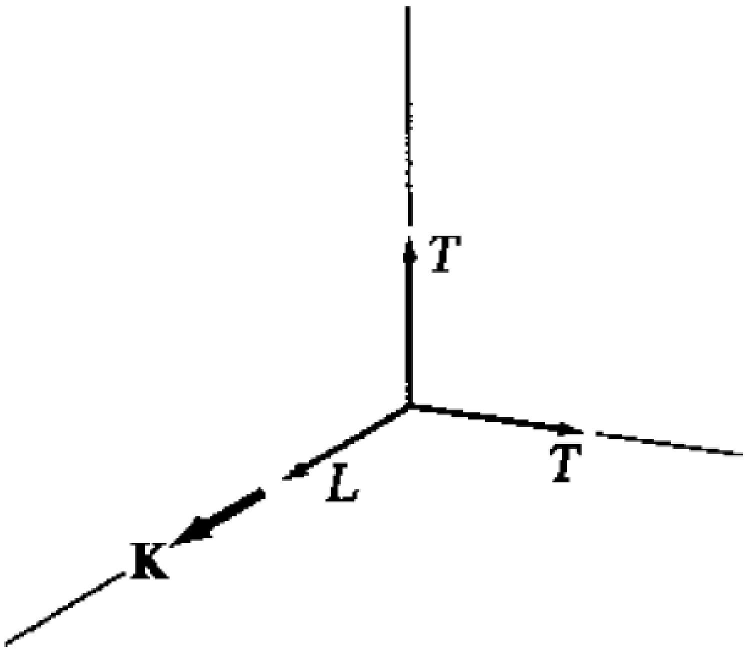
C是传播方向上等效的弹性模量分量

- 可解得u满足如下形式

$$u=u_0e^{i(\omega t-Kx)}$$

ω：频率
K：波矢

例：沿立方晶格[100]方向的弹性波



Wave in [100] direction
$L : C_{11}$

$T : C_{44}$

- **纵波——振动方向和传播方向一致**

$$u = u_0 e^{i(\omega t - Kx)}$$

ω和K之间满足<u>色散关系</u> $\omega^2 \rho = C_{11} K^2$

波速 $\upsilon_s = \dfrac{\omega}{K} = \left(C_{11} / \rho\right)^{1/2}$

- **横波（剪切波）——振动方向和传播方向垂直**

$$v = v_0 e^{i(\omega t - Kx)}$$

ω和K之间满足<u>色散关系</u> $\omega^2 \rho = C_{44} K^2$

波速 $\upsilon_s = \left(C_{44} / \rho\right)^{1/2}$

6.1 晶格振动的经典描述

- 6.1.1 假设固体为均匀弹性介质——弹性波（略讲）

实际晶体为周期性排列的原子（非均匀连续介质），应具体考察每一个原子的振动情况

- 6.1.2 简单晶格模型——一维单原子链 (教材P138-144)
- 6.1.3 复式晶格模型——一维双原子链
- 6.1.4 推广——三维晶格的振动

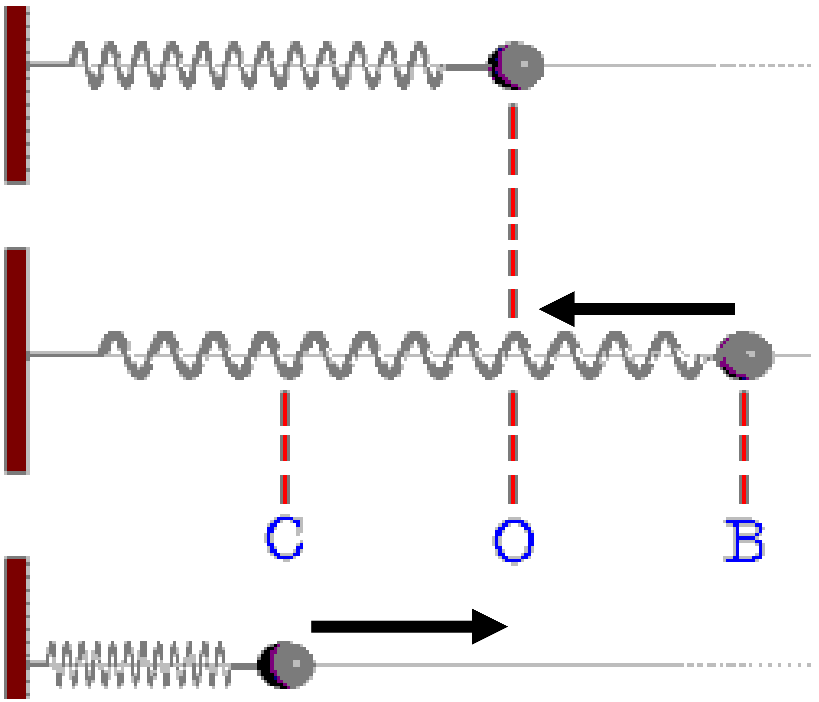
绝热近似

- 固体系统分为两个子系统——电子和原子核
  - 电子运动速度比原子核快得多
- 绝热近似
  - 认为电子可以很快地适应原子核位置的变化
  - 原子核的运动可以看作整个中性原子的运动
  - 在研究电子的运动时，我们也用到过绝热近似，那时是认为离子实基本静止，将电子的运动分离出来。

简谐近似

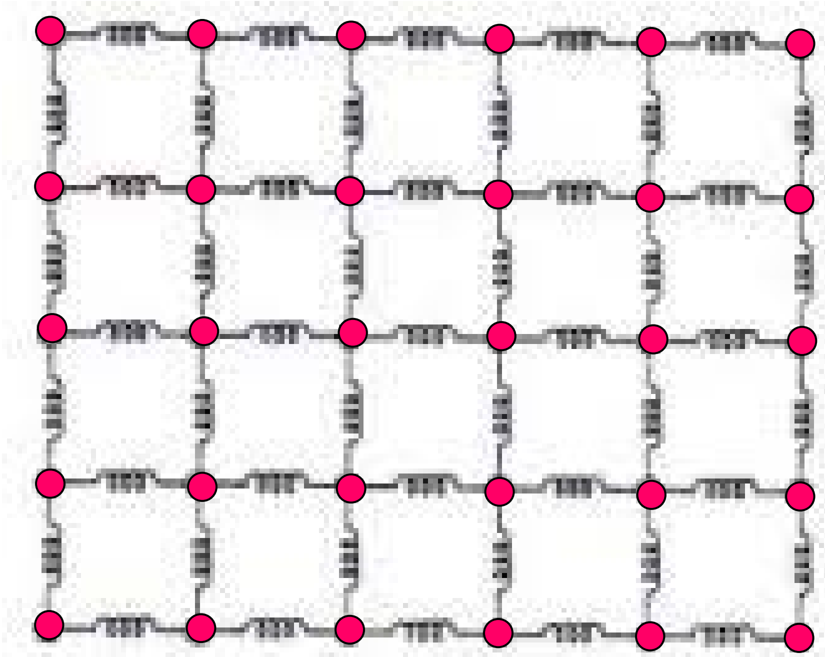
经典力学的晶格振动是小振动问题，可采用简谐振动近似

简谐振动是物体在一个位置附近往复偏离该振动中心位置（叫平衡位置）进行运动，在这个振动形式下，物体受力的大小总是和他偏离平衡位置的距离成正比，并且受力方向总是指向平衡位置



简谐近似

原子通过其间的相互作用力而连系在一起，即它们各自的振动不是彼此独立的。原子之间的相互作用力一般可以很好地近似为**弹性力**

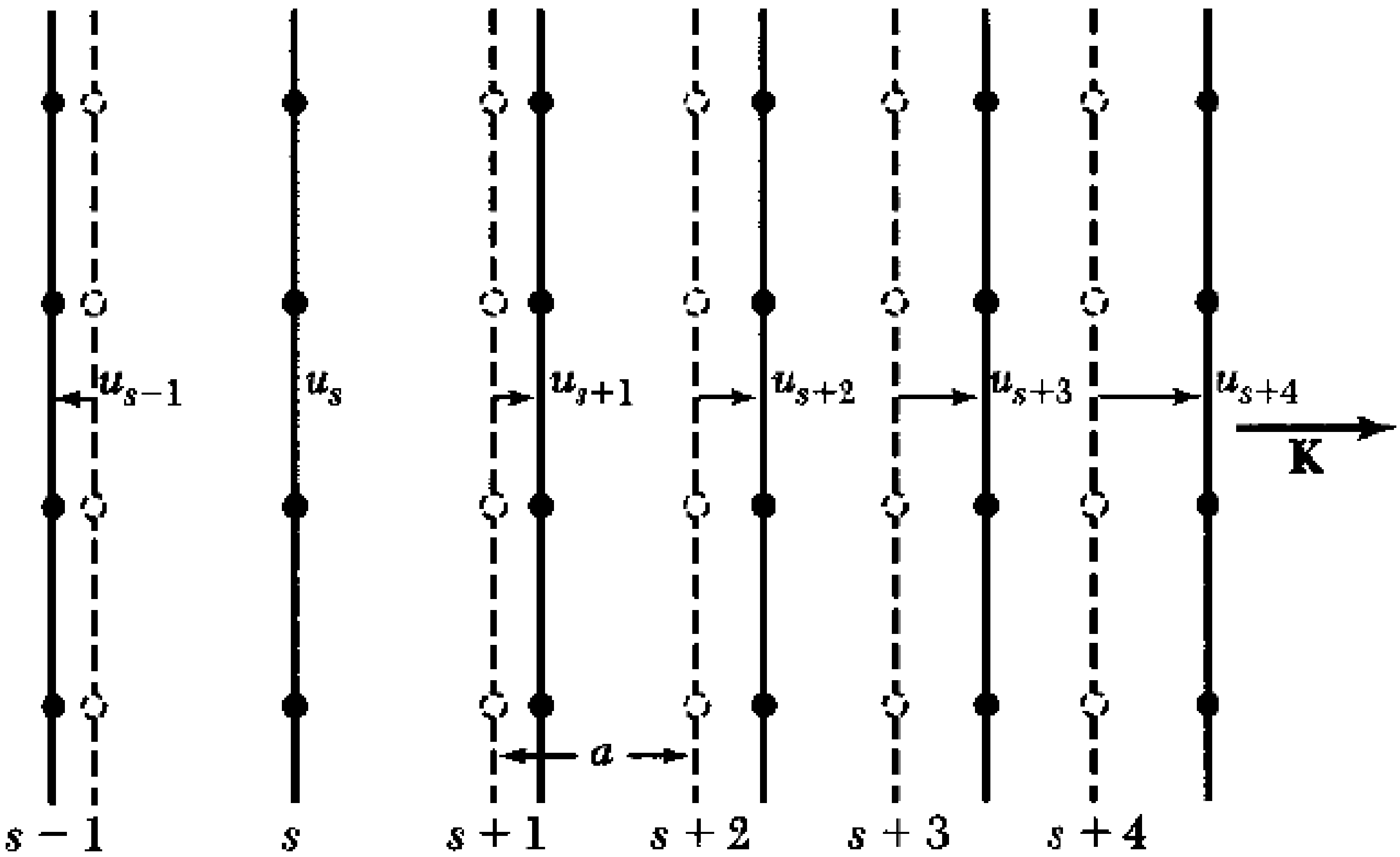


形象地讲，若把原子比作小球的话，整个晶体犹如由许多规则排列的小球构成，而小球之间又彼此由弹簧连接起来一般，从而每个原子的振动都要牵动周围的原子，使振动以弹性波的形式在晶体中传播

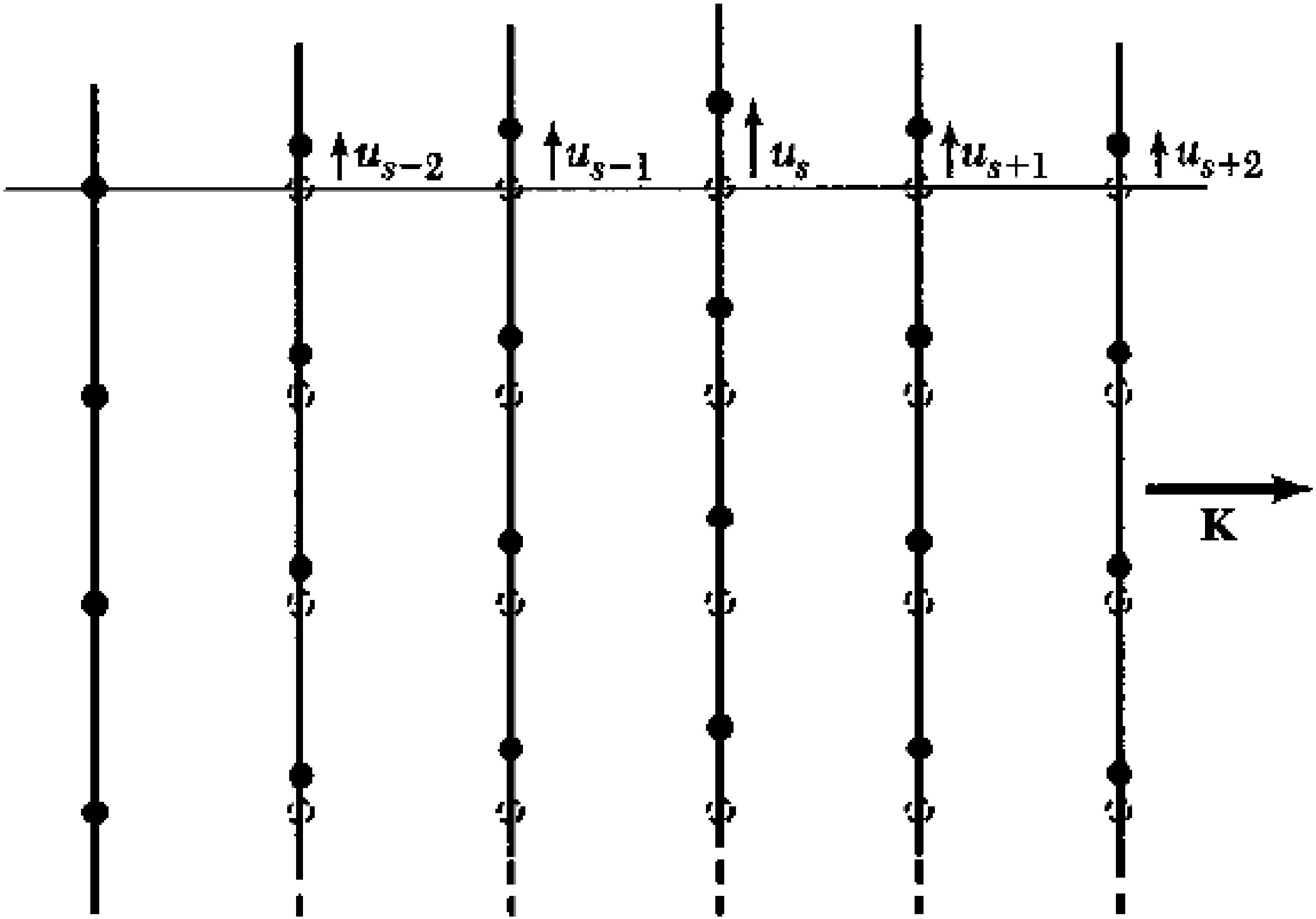
晶体中一维单原子链的振动

- 对于特殊方向的波动可以简化为一维单原子链的振动
  – 每个波动存在3种模式：1个纵波（偏振），2个横波（偏振）
- 以[100]晶向的弹性波为例
  – 1个{100} 晶面的原子，速度完全相同、相位完全一致
  – 位移方向或是横波、或是纵波
- [110]和[111]方向也是一样

纵波



横波



一维单原子链的原子间距变化

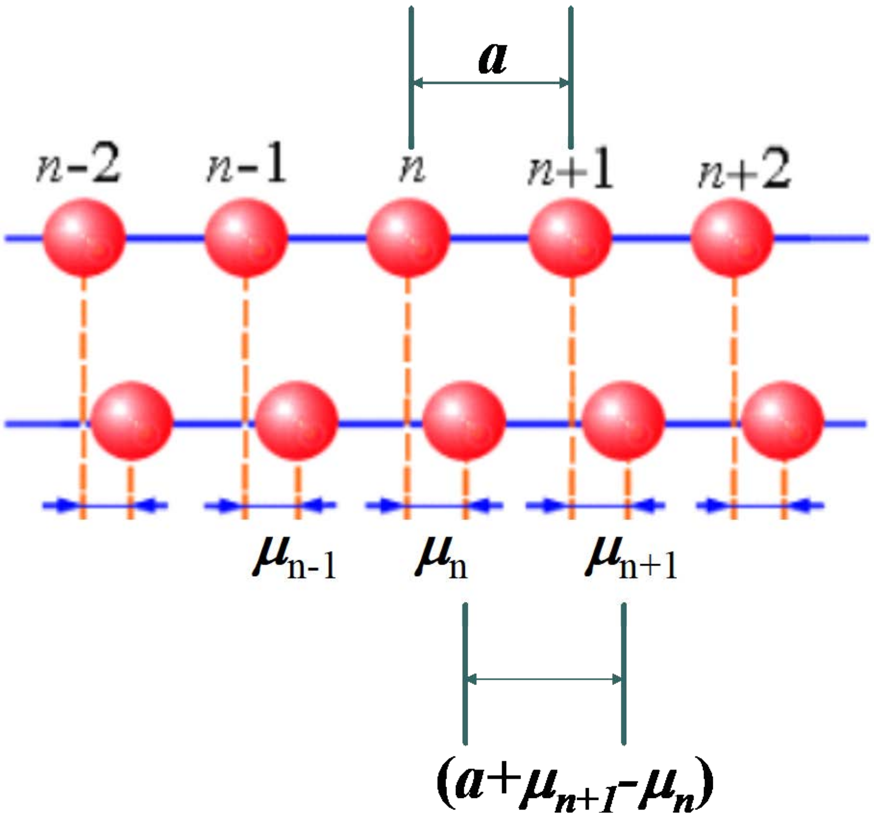
平衡状态原胞体积：原子距离a，原子质量m

非平衡状态（一般情况）考虑纵向振动，原子限制在沿链的方向运动，偏离格点的位移为

$$\cdots, \mu_{n-1}, \mu_n, \mu_{n+1}, \cdots$$

则n和$n+1$原子间距为

$a+(\mu_{n+1}-\mu_n)=a+\delta$



一维单原子链的振动

如果两个原子相对位移为δ，则两个原子间势能由$v(a)$变为$v(a+\delta)$，展成泰勒级数：

$$v(a+\delta)=v(a)+\left(\frac{dv}{dr}\right)\delta+\frac{1}{2}\left(\frac{d^2v}{dr^2}\right)\delta^2+\text{高阶项}$$

$\left(\frac{dv}{dr}\right) \rightarrow$ **0**

平衡时，势能处于极值位置

$$v(a+\delta)=v(a)+\frac{1}{2}\beta\delta^2+\text{高阶项}$$

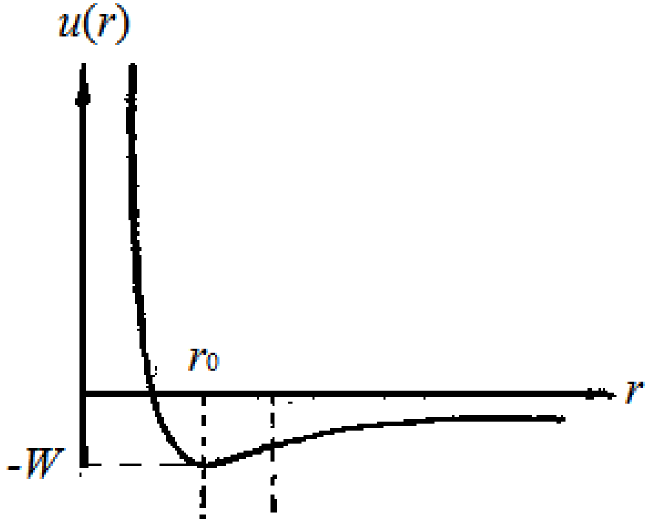
一维单原子链的振动

假设只有邻近原子间存在相互作用。相互作用能：

$$v(a+\delta)=v(a)+\frac{1}{2}\beta\delta^{2}+\text{高阶项}$$

简谐近似，保留到δ^2项，相邻原子间的作用力为：

$$F=-\frac{\partial v}{\partial\delta}\approx-\beta\delta$$

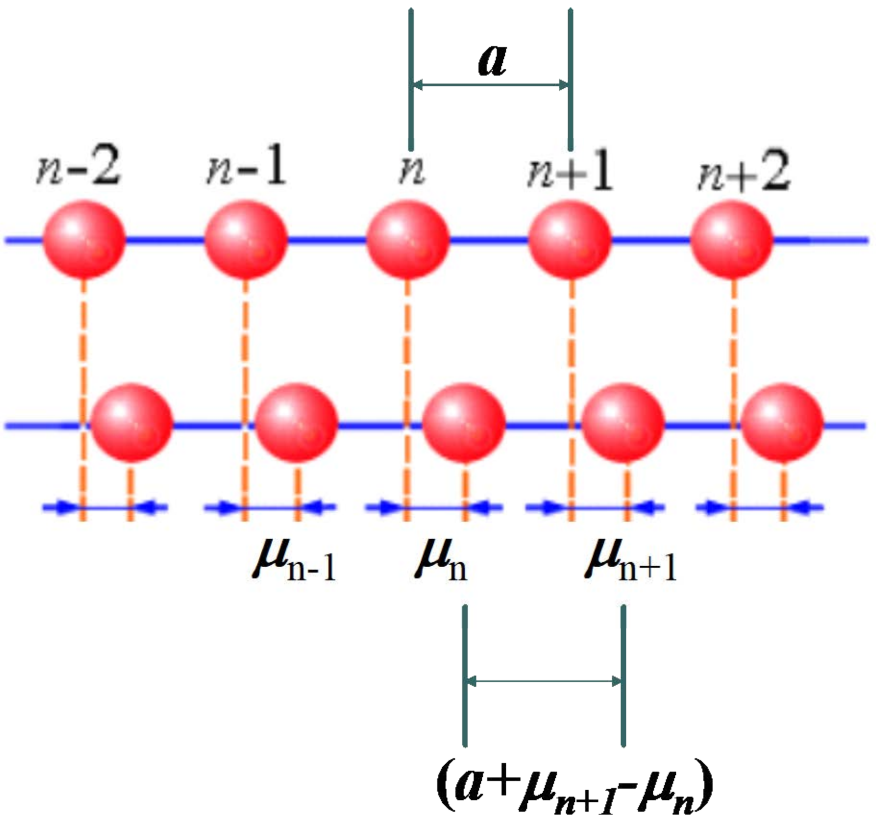


表明存在于相邻原子间的是正比于相对位移的弹性恢复力

一维单原子链的振动

相邻原子间的作用力为：

$$F=-\frac{\partial v}{\partial \delta}\approx-\beta\delta$$



第n个原子受左方
第n-1个原子的作用力为：

$$F_{nl}=-\beta\left(\mu_n-\mu_{n-1}\right)$$

第n个原子受右方
第n+1个原子的作用力为：

$$F_{nr}=\beta\left(\mu_{n+1}-\mu_n\right)$$

一维单原子链的振动

第n个原子受左方第n-1个原子的作用力为：

$$F_{nl}=-\beta\left(\mu_n-\mu_{n-1}\right)$$

第n个原子受右方第n+1个原子的作用力为：

$$F_{nr}=\beta\left(\mu_{n+1}-\mu_n\right)$$

第n个原子所受的总力为：

$$F_n=F_{nl}+F_{nr}=\beta(\mu_{n+1}-\mu_n)-\beta(\mu_n-\mu_{n-1})$$

$$=\beta(\mu_{n+1}+\mu_{n-1}-2\mu_n)$$

若原子的质量为m，则运动方程为：

$$m\ddot{\mu}_n=\beta(\mu_{n+1}+\mu_{n-1}-2\mu_n)$$

一维单原子链的振动—格波

一维简单晶格原子运动方程：

$$m\ddot{\mu}_n = \beta(\mu_{n+1} + \mu_{n-1} - 2\mu_n)$$

对晶格中所有的原子都可以列出相似的方程

它的解是一个简谐振动： $\mu_n = Ae^{i(\omega t - qX_n)}$

式中 $X_n = na$ **是第*n*个原子的平衡位置**

原子在平衡位置附近的振动以波的形式在晶体中传播，我们称之为格波，格波的波矢：

$$q=2\pi/\lambda$$

一维单原子链的振动—格波

一维简单晶格原子运动方程：

$$m\ddot{\mu}_n = \beta(\mu_{n+1} + \mu_{n-1} - 2\mu_n)$$

对晶格中所有的原子都可以列出相似的方程

它的解是一个简谐振动： $\mu_n = Ae^{i(\omega t - qX_n)}$

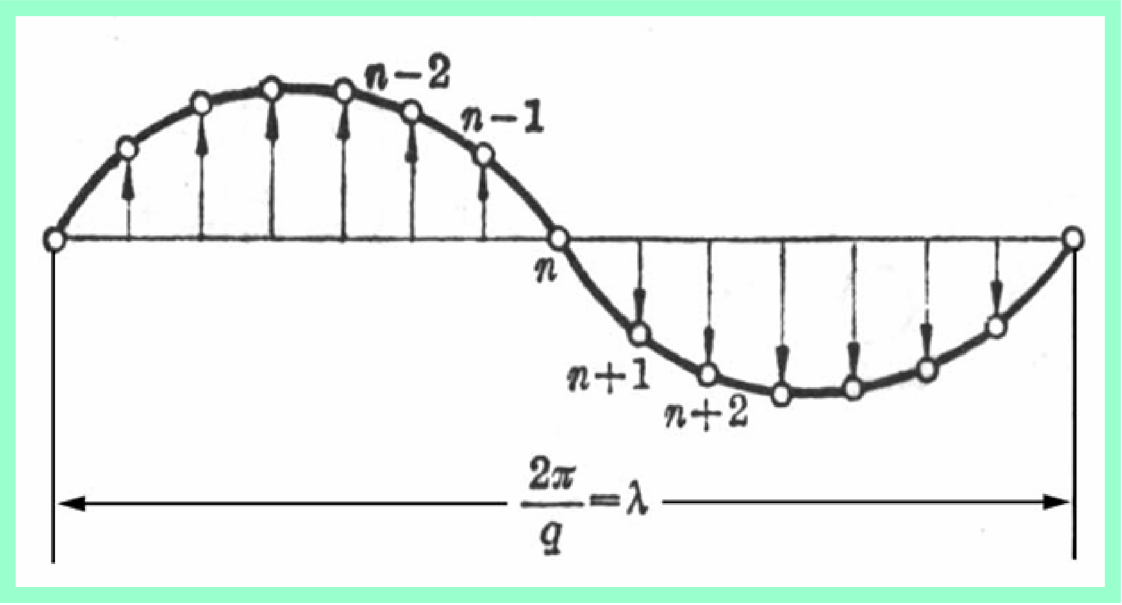
式中 $X_n = na$ **是第*n*个原子的平衡位置**

所有原子都以相同的频率ω和相同的振幅*A*振动，不同原子之间有相位差，相邻原子之间的相位差为*aq*，并且当原子间距为$2\pi/q$的整数倍时，两原子的振动位移相同

格波的波长

两个相邻原子的位移之比 $\dfrac{\mu_n}{\mu_{n-1}} = \dfrac{Ae^{i(\omega t - qna)}}{Ae^{i(\omega t - q(n-1)a)}} = e^{-iqa}$

如果相位相差2π，则两原子位移相同，格波波长: $\lambda = \dfrac{2\pi}{q}$



25

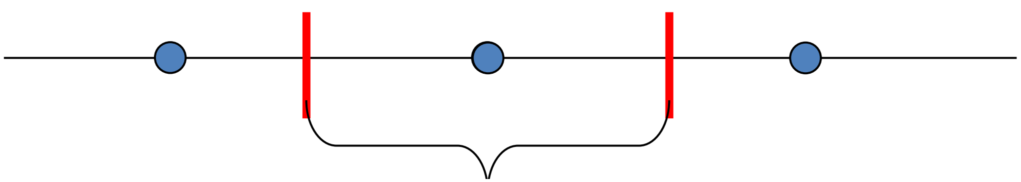
格波的波矢—第一布里渊区

两个相邻原子的位移之比 $\dfrac{\mu_n}{\mu_{n-1}} = \dfrac{Ae^{i(\omega t - qna)}}{Ae^{i(\omega t - q(n-1)a)}} = e^{-iqa}$

- 在-π到π的qa涵盖了指数函数所有独立的值
- 独立q值的区间为$-\dfrac{\pi}{a} < q \le \dfrac{\pi}{a}$

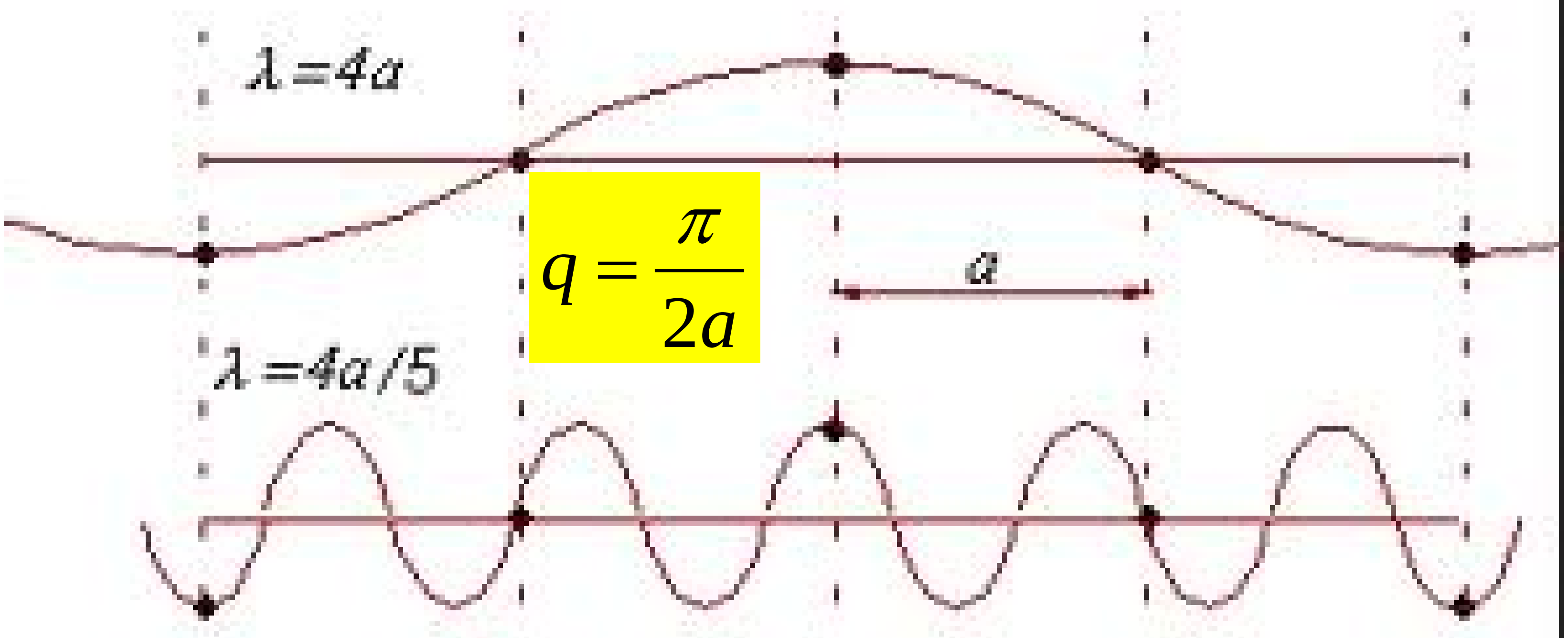
这个区间为一维晶格的**第一布里渊区**

$$\mathbf{a} = ai \qquad \mathbf{b} = 2\pi / ai$$



第一布里渊区

格波的波矢—第一布里渊区（q的取值可以限定在简约区）



$$q=\frac{\pi}{2a}$$

$$q=\frac{\pi}{2a}+\frac{2\pi}{a}=\frac{5\pi}{2a}$$

格波解中频率与波数的关系 (色散关系ω-q)

将格波解代入运动方程，求ω与q的关系

格波的解：

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

运动方程：

$$m\ddot{\mu}_n = \beta(\mu_{n+1} + \mu_{n-1} - 2\mu_n)$$

$$m(i\omega)^2 \underline{Ae^{i(\omega t - naq)}} = \underline{Ae^{i(\omega t - naq)}} \cdot \beta[e^{-iaq} + e^{iaq} - 2]$$

$$-m\omega^2 = 2\beta[\cos(aq) - 1]$$

$$\omega^2 = \frac{2\beta}{m}(1 - \cos aq) = \frac{4\beta}{m}\sin^2\left(\frac{aq}{2}\right)$$

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

频率ω习惯取正值

格波解中频率与波数的关系 (色散关系ω-q)

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}\left|\sin\left(\frac{aq}{2}\right)\right|$$ —— 频率与波数之间的关系式

公式与原子号n无关，说明频率适合所有原子的运动方程

所有原子同时做频率为ω的波动，原子间有固定的相位差qa

根据色散关系，频率ω不能大于$2(\beta/m)^{1/2}$

色散关系具有反演对称性

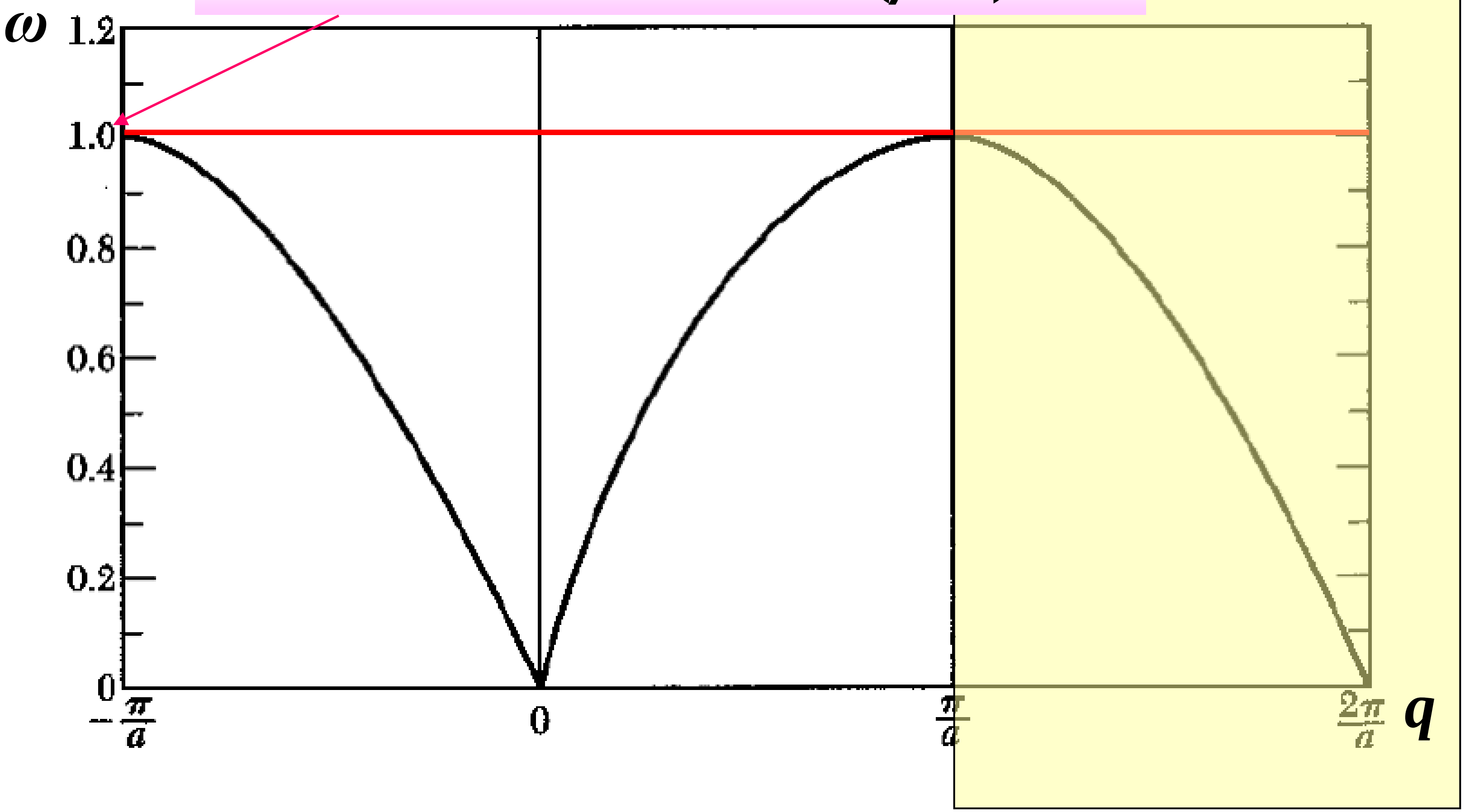
色散关系

ω-q

平移对称性：

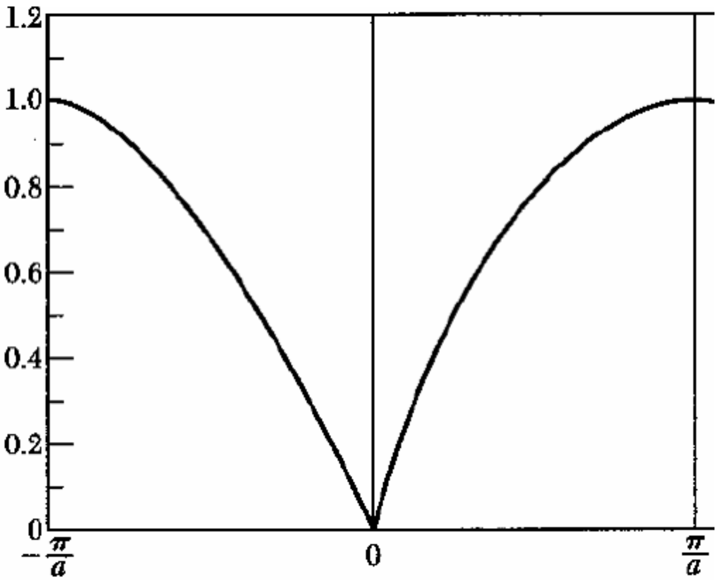
$$\omega(q)=\omega\left(q+\frac{2\pi}{a}\right)$$

ω 有最大值—截止频率$2(\beta/m)^{1/2}$



色散关系中的波速

- 波速
  - 相速度 $\upsilon_p = \lambda f = \omega / q$
  - 群速度 $\upsilon_g = \partial\omega / \partial q$

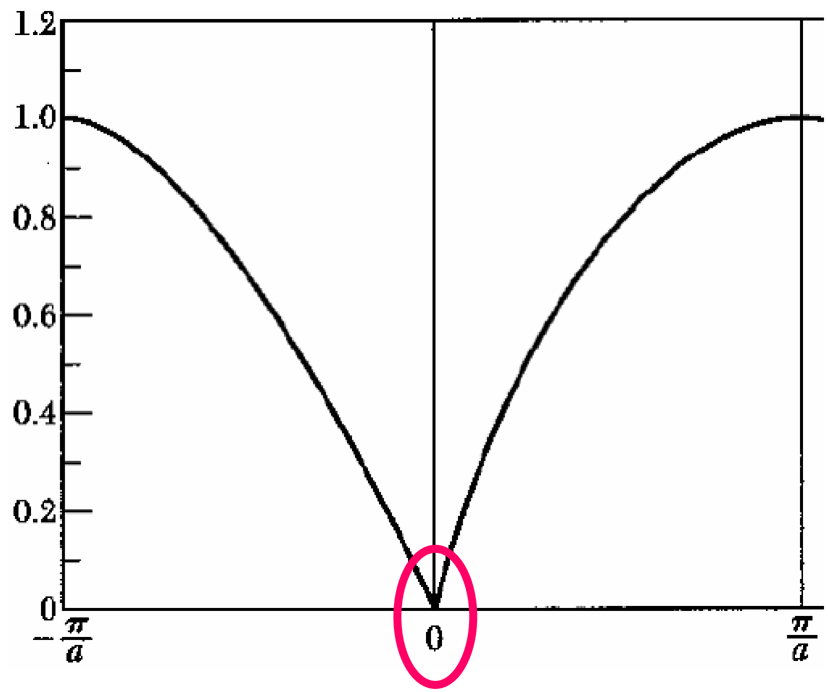


相速度：是单色波单位时间内一定的振动位相所传播的距离

群速度：是平均频率为ω，平均波矢为 q 的波包的传播速度，它是合成波能量和动量的传播速度

色散关系中的波速

- 波速
  - 相速度 $\upsilon_p=\lambda f=\omega/q$
  - 群速度 $\upsilon_g=\partial\omega/\partial q$

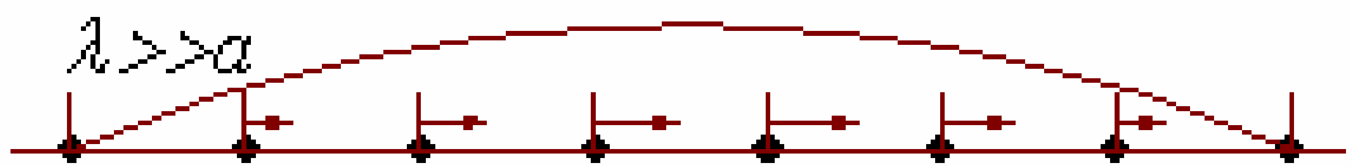


$\lambda>>a$时(长波极限)，$q\to 0$，则

$$\omega\approx 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}\left|\frac{1}{2}aq\right|=a\sqrt{\frac{\beta}{m}}q$$

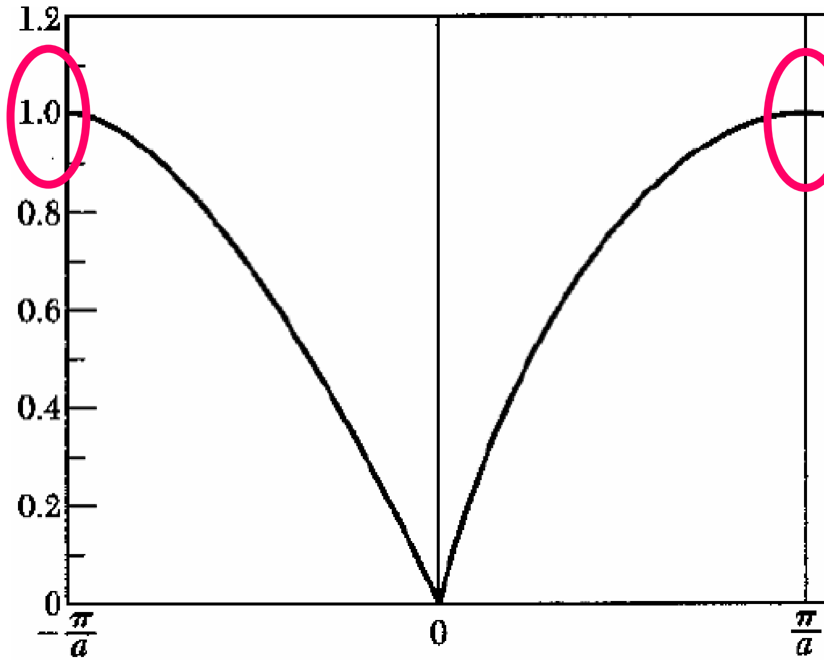
类似于连续介质弹性波
相速度等于群速度

$$\upsilon_g=\upsilon_p\approx a\sqrt{\frac{\beta}{m}}\quad .$$



色散关系中的波速

- 波速
  - **相速度** $\upsilon_p = \omega / q$
  - **群速度** $\upsilon_g = \partial\omega / \partial q$

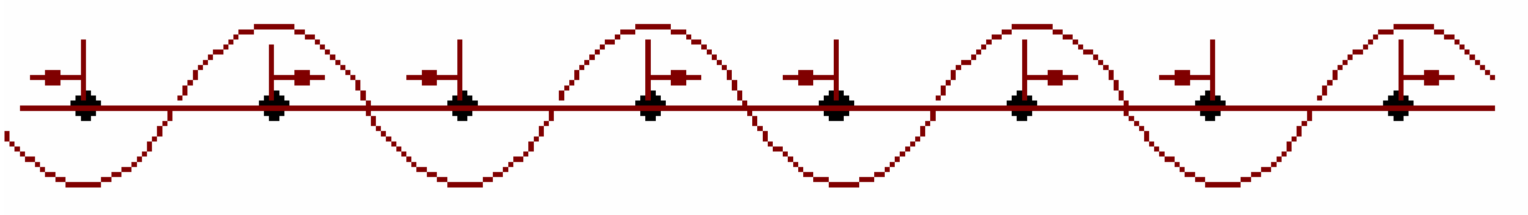


q接近布里渊区边界($\pm\pi/a$)时，频率ω趋向于常数

$$\omega \to 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}$$

相邻原子相位相差π
振动相反，类似于布拉格反射，成驻波
群速度等于0

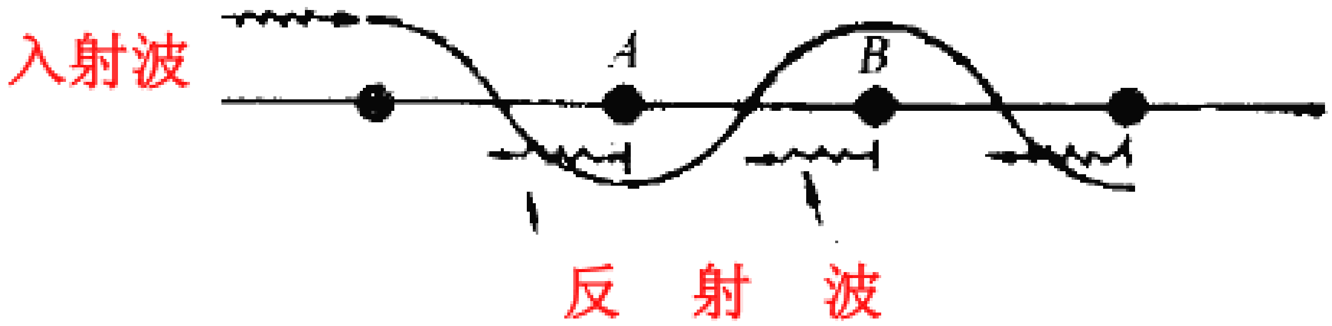
$\lambda = 2a$



色散关系中的波速

这是因为此时近邻原子散射的子波与入射波位相相差π，由B原子反射的子波到达近邻A原子处时恰好和A原子反射的子波同位相，对所有原子的散射波都满足上述π条件，所以散射子波之间发生相长干涉，结果反射达到最大值，并与入射波相结合，形成驻波，群速度为零。

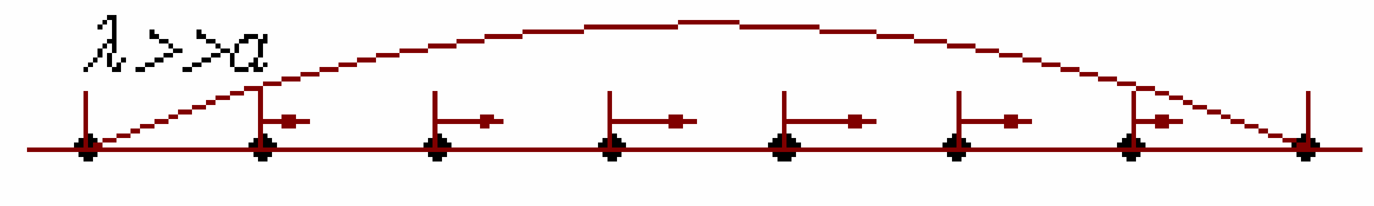
这和X射线衍射的Bragg条件，以及在布里渊区边界处电子的布洛赫波是驻波是一致的，也同样显示了布里渊区边界的特征。它们都是由于入射波的波动性和晶格的周期性所产生的结果。



λ>>*a*时(长波极限)，$q \to 0$，则 $\omega \approx 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}\left|\frac{1}{2}aq\right| = a\sqrt{\frac{\beta}{m}}q$

类似于连续介质弹性波
相速度等于群速度

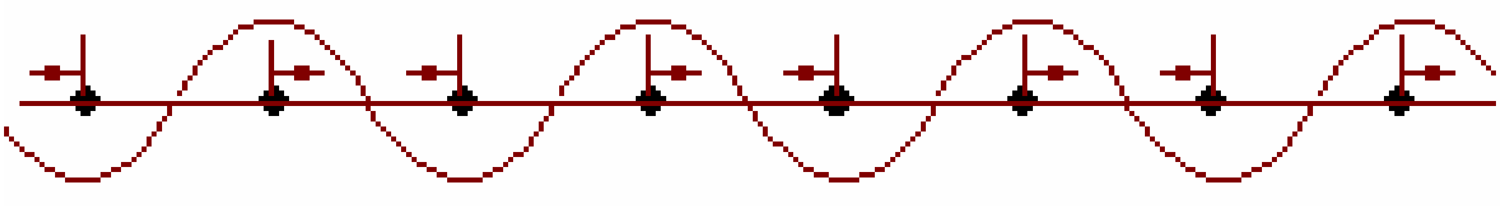
$$\upsilon_g = \upsilon_p \approx a\sqrt{\frac{\beta}{m}}$$



*q*接近布里渊区边界($\pm\pi/a$)时，
频率ω趋向于常数

$$\omega \to 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}$$

相邻原子相位相差π
振动相反，类似于布拉格反射，成驻波
群速度等于0



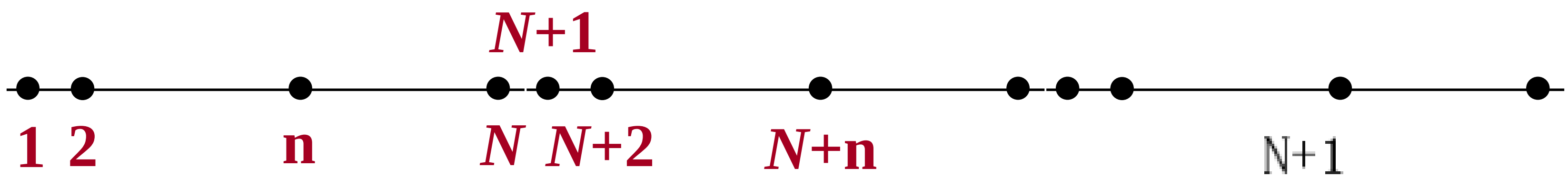
格波波数q：如何取值?

前面讨论的运动方程只适用于无穷长的原子链

对于有限长度的一维原子链，边界原子的运动方程不一样，方程组变得复杂，原来的解不能适用！

周期性边界条件（波恩-卡门条件）

设晶体中原子总数为N，晶体链长为Na，所谓周期性边界条件就是将一有限长度的晶体链看成无限长晶体链的一个重复单元，即：

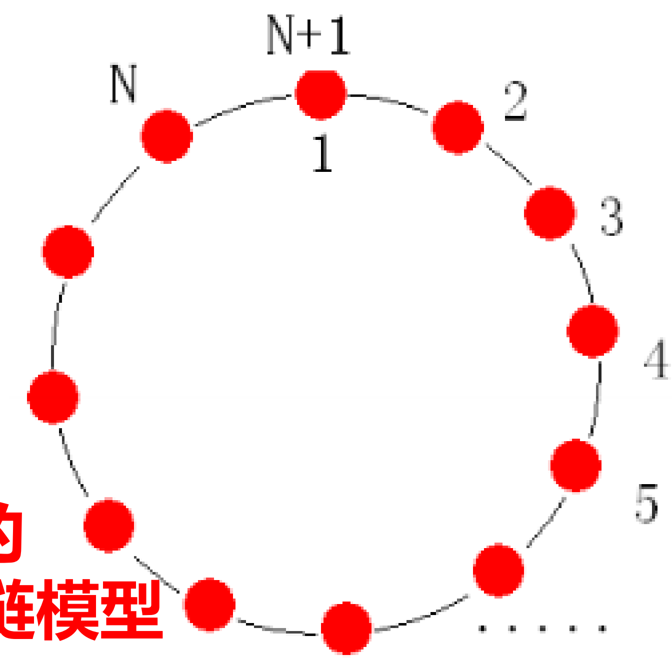


$$\mu_{N+n} = \mu_n$$

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

即：$e^{-iNaq} = 1$

$$\therefore q = \frac{2\pi}{Na}\cdot h \quad (h = \text{整数})$$



首尾相连的
波恩-卡曼环状链模型

格波波矢的取值

引入周期性边界条件后，波数q不能任意取值，只能取分立的值

在q轴上，相邻两个q的取值相距 $\dfrac{2\pi}{Na}$，

即在q轴上，每一个q的取值所占的空间为 $\dfrac{2\pi}{Na}$

所以，q的分布密度为： $\rho(q) = \dfrac{Na}{2\pi} = \dfrac{L}{2\pi}$

$L = Na$ **为晶体链的长度**

简约区中波数q的取值总数 $= \rho(q)\cdot 2\pi/a = (Na/2\pi)\cdot 2\pi/a$

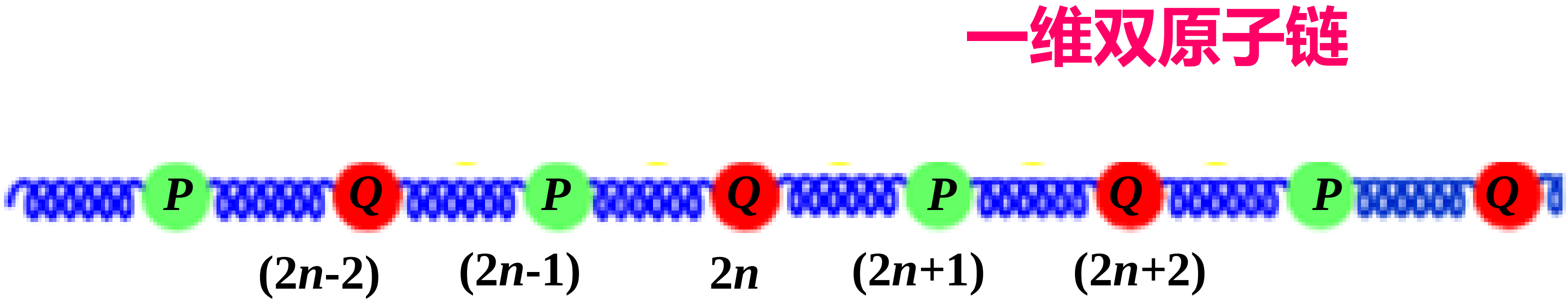
$= N =$ **晶体链的原胞数**

晶格振动格波的总数$=N\cdot$晶体链的自由度数

6.1 晶格振动的经典描述

- 6.1.1 假设固体为均匀弹性介质——弹性波（略讲）
- 考虑晶格的周期性——格波
- 6.1.2 简单晶格模型——一维单原子链
- 6.1.3 复式晶格模型——一维双原子链
  (教材P144-147)
- 6.1.4 推广——三维晶格的振动

一维双原子链的结构



双原子链的构成：

- 两个原子不同
- 间距不同
- 恢复力常数不同

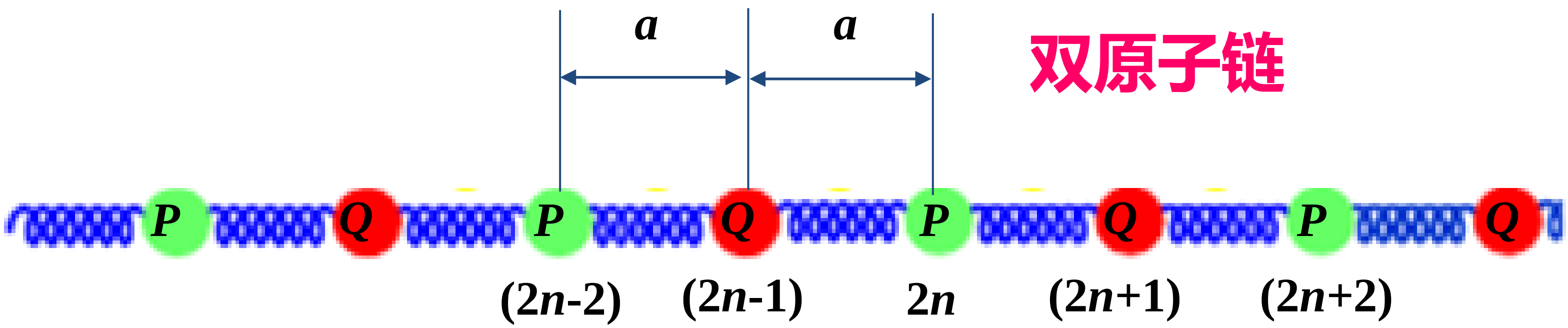
*P*原子质量：m

*Q*原子质量：M

对于基元含有多个原子，晶格振动将出现新的特征

基元含有多个原子，是电子材料晶体的常见情况

一维双原子链的结构



与单原子链的区别：原胞含2个不同原子

其余条件不变

P原子质量：*m*

Q原子质量：*M*

类比写出运动方程

P原子：临近2个Q原子 $m\ddot{\mu}_{2n} = -\beta(2\mu_{2n} - \mu_{2n+1} - \mu_{2n-1})$

Q原子：临近2个P原子 $M\ddot{\mu}_{2n+1} = -\beta(2\mu_{2n+1} - \mu_{2n+2} - \mu_{2n})$

双原子链晶格的色散关系

格波试解（对应P和Q）

$$\mu_{2n} = Ae^{i[\omega t-(2na)q]}$$

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

运动方程

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

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

$$\begin{cases} -m\omega^2 A = \beta\left(e^{-iaq} + e^{iaq}\right)B - 2\beta A \\ -M\omega^2 B = \beta\left(e^{-iaq} + e^{iaq}\right)A - 2\beta B \end{cases}$$

方程与n无关，
化简为A、B的齐次方程：

$$\begin{cases} \left(m\omega^2 - 2\beta\right)A + 2B\beta\cos(aq) = 0 \\ 2A\beta\cos(aq) + \left(M\omega^2 - 2\beta\right)B = 0 \end{cases}$$

双原子链晶格的色散关系

- **系数行列式=0**

$$\Rightarrow \begin{vmatrix} m\omega^2 - 2\beta & 2\beta\cos(aq) \\ 2\beta\cos(aq) & M\omega^2 - 2\beta \end{vmatrix}$$

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

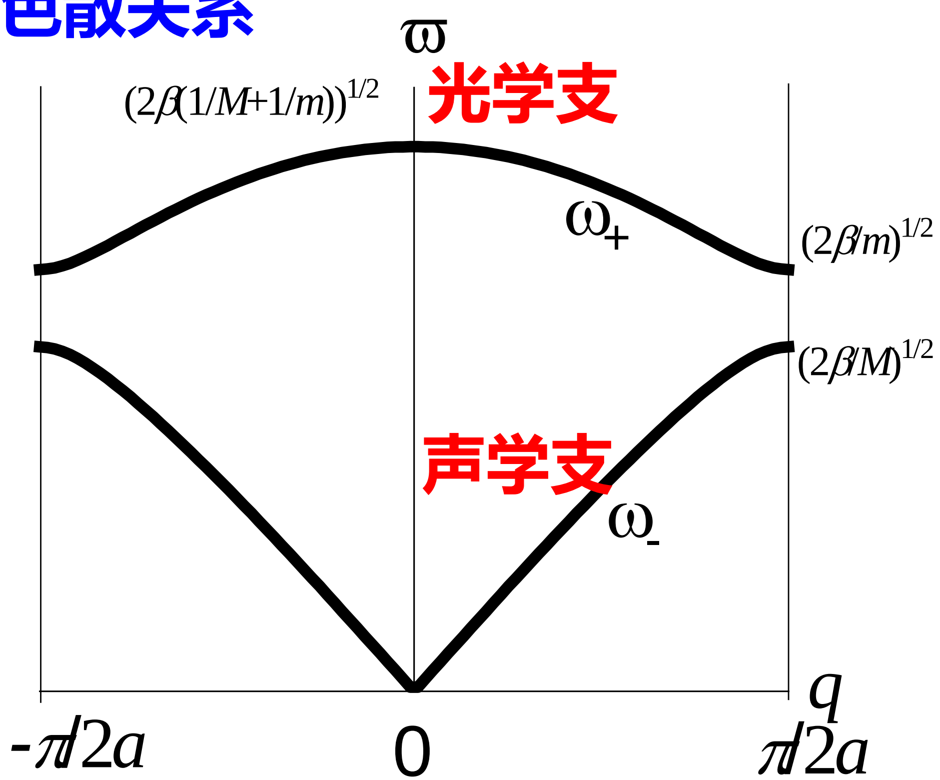
得到两个频率解：

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

双原子链晶格的色散关系

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

***m*与*M*不同时的色散关系**



长波极限——光学波与声学波

光学支和声学支：是指色散关系曲线

光学波和声学波：是指格波，格波表达式中的ω和q的取值对应色散曲线（光学支或声学支）上的（ω, q）点

$q\to 0$的长波在许多实际问题中具有特别重要的作用，光学波和声学波的命名也主要是由于它们在长波极限的性质

在长波极限($q\to 0$)的声学波

- ω_- 支—声学波的色散关系

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

当$q\to 0$:

$<<1$

$$\omega_-^2\approx\beta\frac{m+M}{mM}\cdot\frac{2mM}{(m+M)^2}(aq)^2=\frac{2\beta}{m+M}(aq)^2$$

$$\omega_-\approx aq\sqrt{\frac{2\beta}{m+M}}$$

长声学波频率正比于波数，类似于连续介质的弹性波

在长波极限($q\rightarrow 0$)的声学波

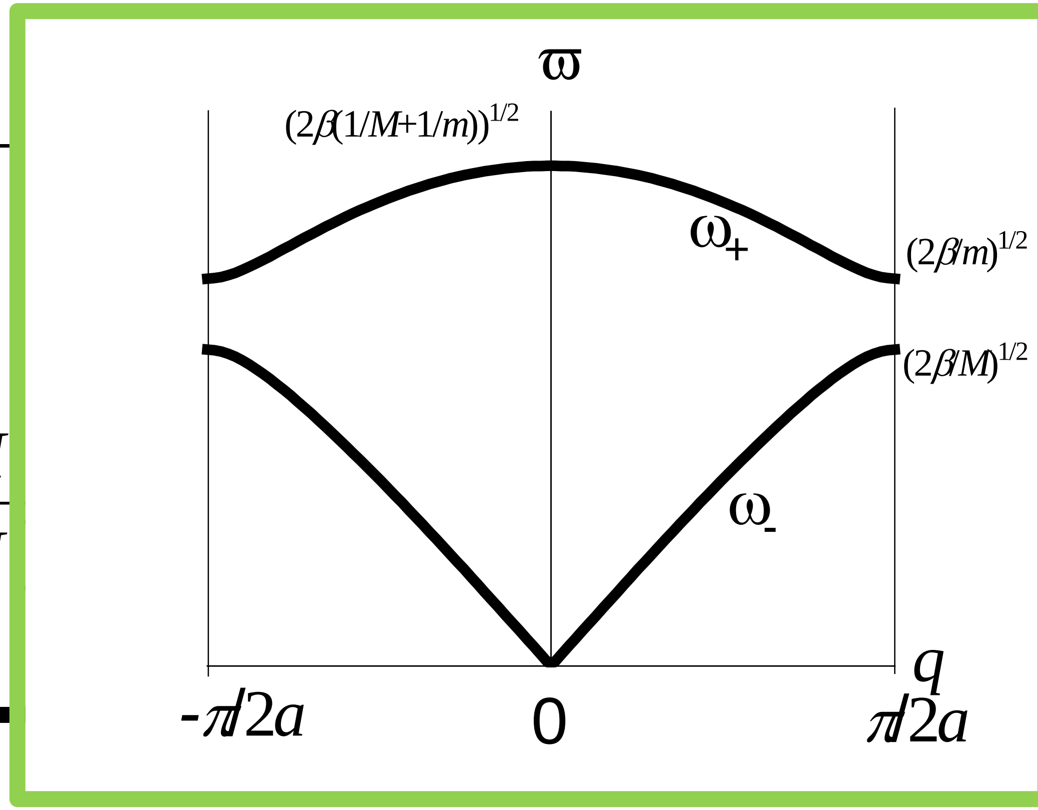
- ω_- 支—声学波的色散关系

$$\omega_-^2 = \beta \frac{m+M}{mM}\left\{1-\right.$$

当$q\rightarrow 0$，则

$$\omega_-^2 \approx \beta \frac{m+M}{mM} \cdot \frac{2mM}{(m+M}$$

$$\omega_- \approx aq\sqrt{\frac{2\beta}{m+M}}$$



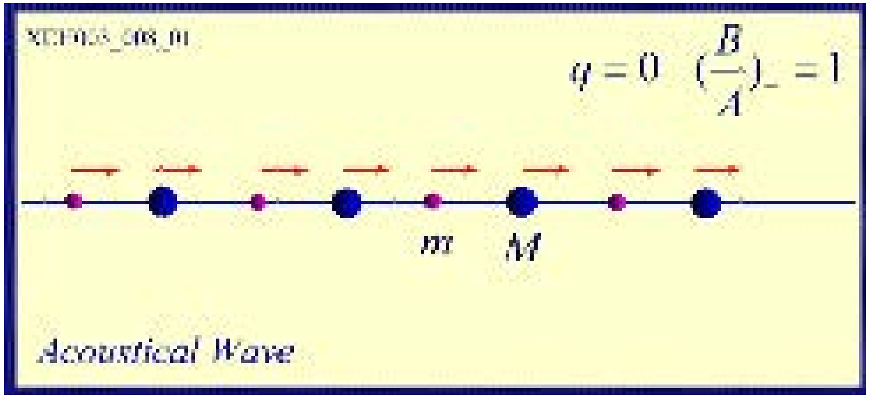
长声学波频率正比于波数，类似于连续介质的弹性波

在长波极限($q\to0$)的声学波

波速：相速度=群速度

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

$$\begin{cases}\left(m\omega^2-2\beta\right)A+2B\beta\cos\left(aq\right)=0\\ 2A\beta\cos\left(aq\right)+\left(M\omega^2-2\beta\right)B=0\end{cases}$$



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

$q\to0$时$\omega_-\to0$， $B/A\to1$, 相位差$qa\to0$

相邻原子同步运动,原胞中两种原子的运动是完全一致的振幅和位相没有差别

在长波极限($q\to 0$)的光学波

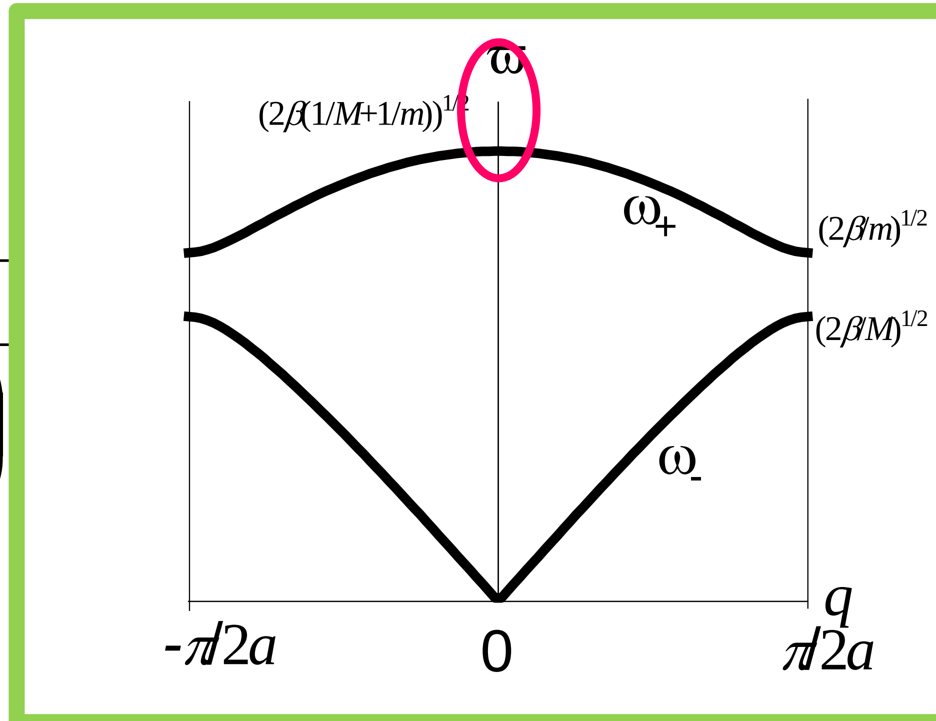
ω_+ 光学波色散关系

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

当$q\to 0$，为长光学波

$$\omega_+^2 \to 2\beta\frac{m+M}{mM}$$

频率最高 $$\omega_+ \to \sqrt{\frac{2\beta}{\left(\frac{mM}{m+M}\right)}}$$



在长波极限($q \to 0$)的光学波

波速：群速度为0

$$\begin{cases} \left(m\omega^2 - 2\beta\right)A + 2B\beta\cos\left(aq\right) = 0 \\ 2A\beta\cos\left(aq\right) + \left(M\omega^2 - 2\beta\right)B = 0 \end{cases}$$

$$\omega_+ \to \sqrt{\frac{2\beta}{\left(\frac{mM}{m+M}\right)}}$$

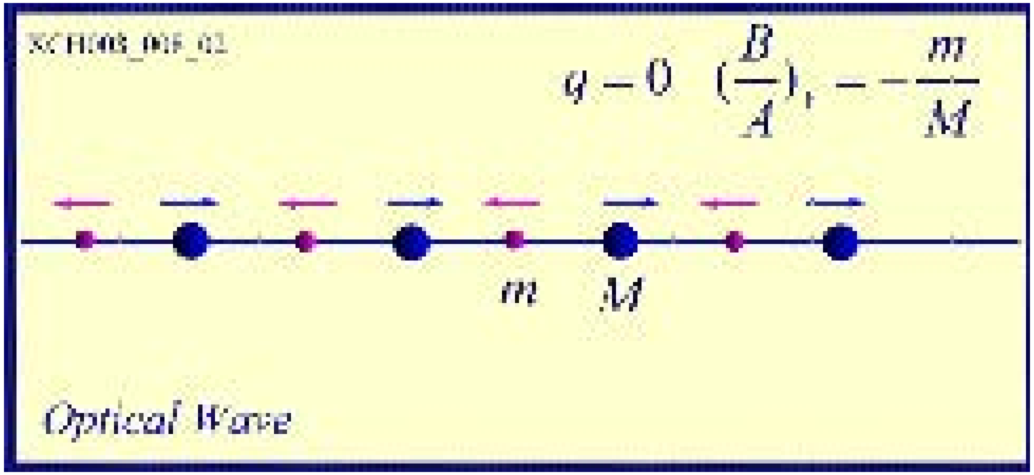
$$\left(\frac{B}{A}\right)_+ = -\frac{m\omega_+^2 - 2\beta}{2\beta\cos\left(aq\right)} = -\frac{m\frac{2\beta}{\left(\frac{mM}{m+M}\right)} - 2\beta}{2\beta} = -\frac{m}{M}$$

相邻原子振动相反，振幅反比于原子质量

在长波极限($q\to0$)的光学波

波速：相速度∞，群速度为0

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



$q\to0$时

（1）同种原子具有相同的位相，所以每一种原子（P原子或Q原子）形成的格子象一个刚体一样整体地振动

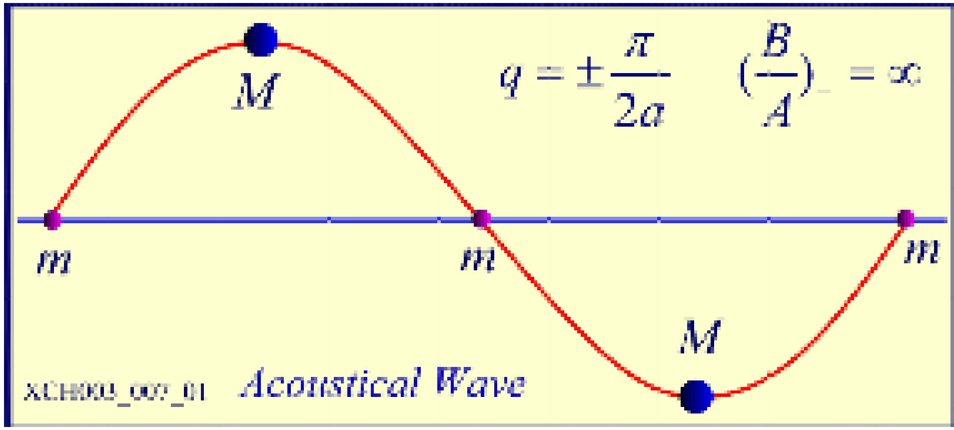
$$\mu_{2n} = Ae^{i[\omega t-(2na)q]}$$
$$\mu_{2n+1} = Be^{i[\omega t-(2n+1)aq]}$$

（2）两种原子的振动有完全相反的位相。长光学波的极限实际上是P和Q两个格子的相对振动，振动中保持质心不变

51

短波极限（$q \to \pm\frac{\pi}{2a}$）时的声学波

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



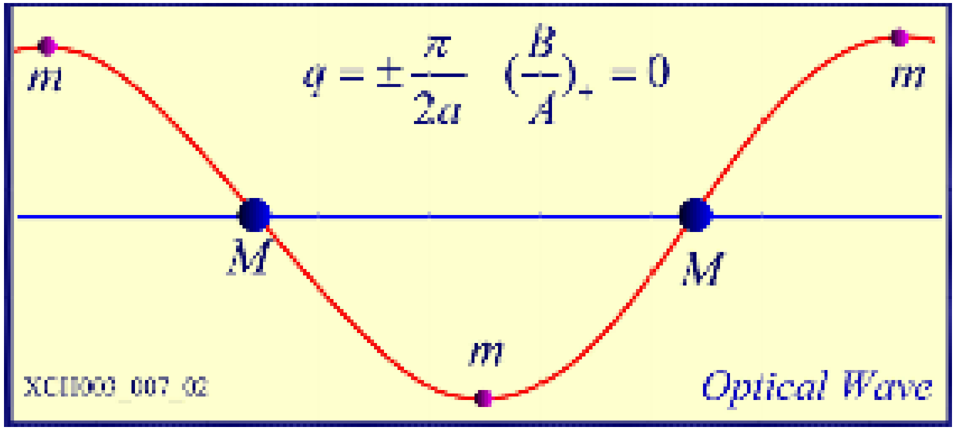
$$\omega_- \to \left(\frac{2\beta}{M}\right)^{1/2}$$

$$\left(\frac{B}{A}\right)_- \to \infty$$

m原子静止不动，相邻M原子振动的相位相反

短波极限（$q \to \pm\frac{\pi}{2a}$）时的光学波

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



$$\omega_+ \to \left(\frac{2\beta}{m}\right)^{1/2}$$

$$\left(\frac{B}{A}\right)_+ \to \infty$$

M原子静止不动，相邻m原子振动的相位相反

声学波与光学波的区别

$q \to 0$时：

长光学支格波的特征是每个原胞内的不同原子做**相对振动**, 振动频率较高, 它包含了晶格振动频率最高的振动模式

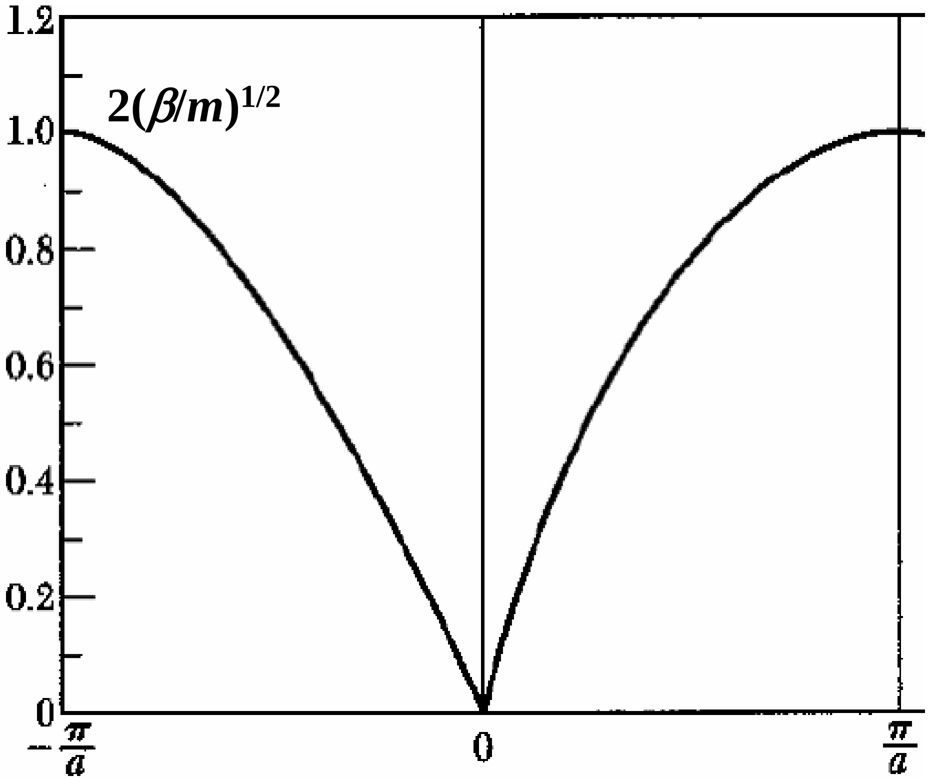
长声学支格波的特征是原胞内的不同原子没有相对位移, 原胞做**整体运动**, 振动频率较低, 它包含了晶格振动频率最低的振动模式, 波速是一常数

任何晶体都存在声学支格波, 但简单晶格(非复式格子)晶体不存在光学支格波

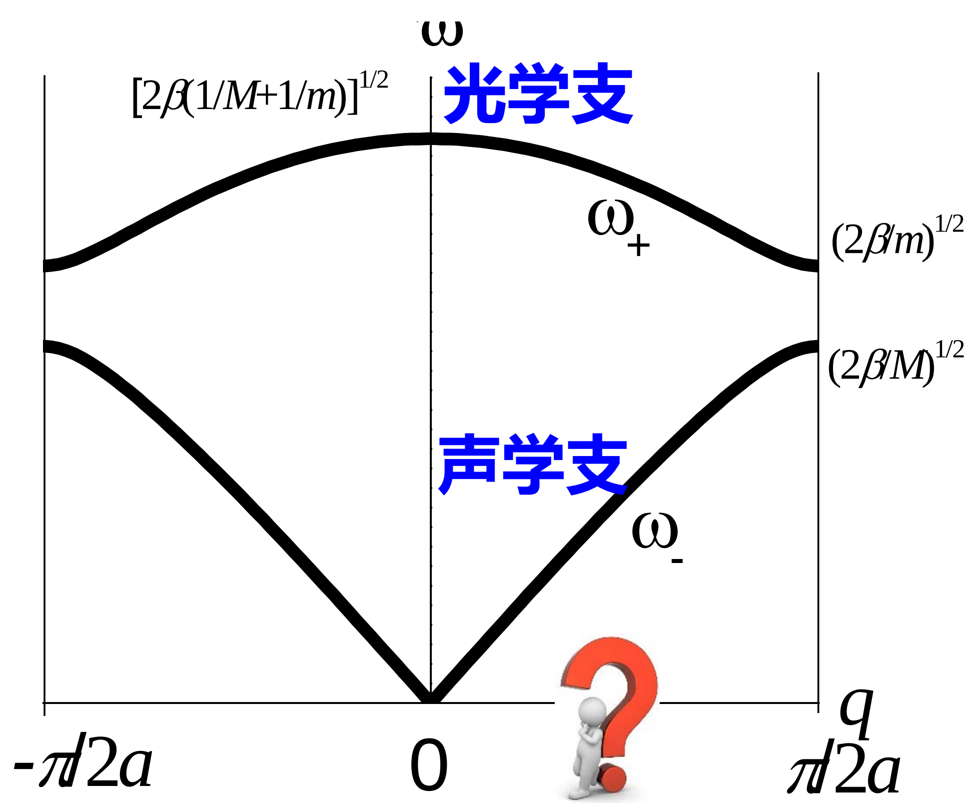
一维单原子链和一维双原子链晶格色散关系的对比

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

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



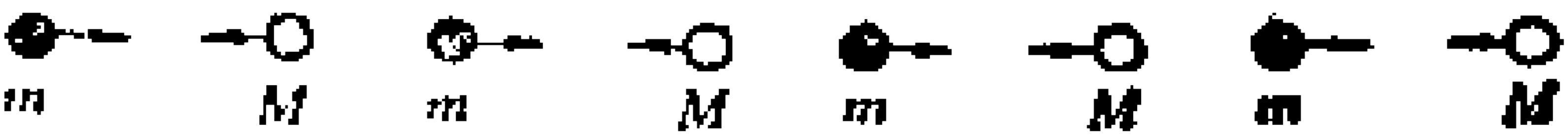
m<M



*m*和*M*相同呢?

离子晶体的晶格振动

- 离子晶体
  - 正、负离子构成（仍满足简谐近似条件）
  - 其相对振动构成**电偶极矩**的变化，可与电磁波相互作用



长光学波的原子振动示意图

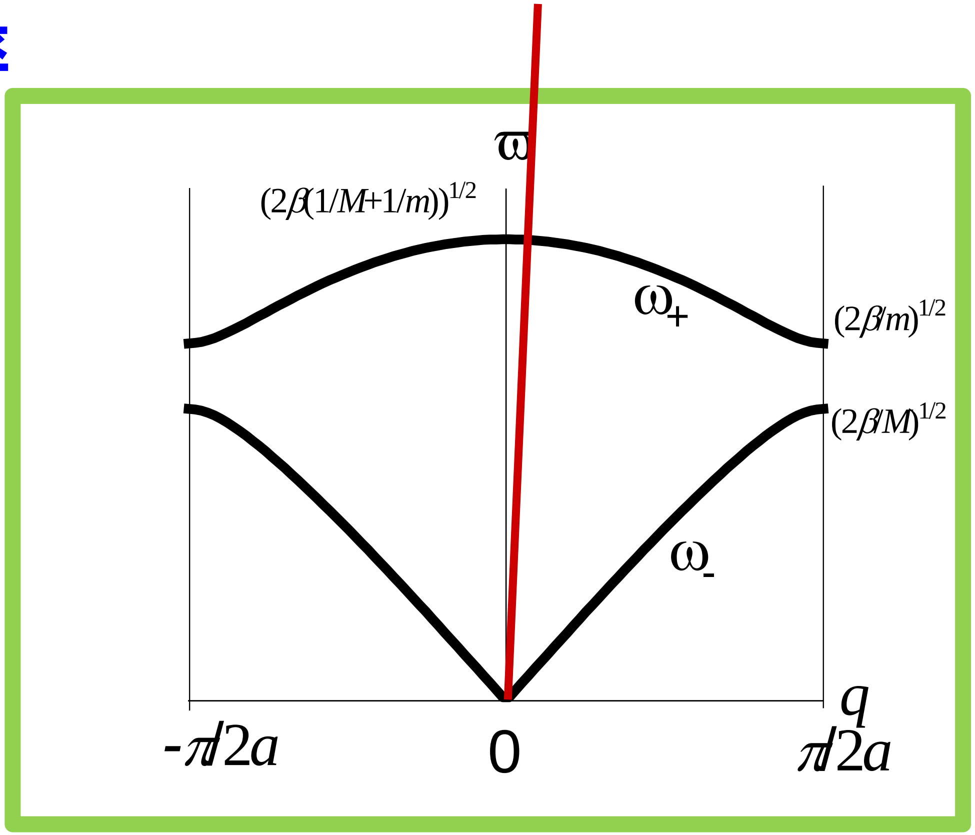
离子晶体中的长光学波

不同离子之间的相对振动产生一定的电偶极矩，从而可以和电磁波相互作用

电磁波和格波在波长和频率都相同时可以发生共振

光波：$\omega = c_0 q$

实际晶体的长光学波的频率对应于远红外的光波，离子晶体中光学波的共振能够引起对远红外光在ω_+附近强烈吸收



双原子链中波矢q的取值

相邻原胞相位差$2aq$

- **波数q的取值范围：**

$$-\frac{\pi}{2a} < q \le \frac{\pi}{2a}$$

$$\boxed{\begin{aligned}\mu_{2n} &= Ae^{i[\omega t-(2na)q]}\\ \mu_{2n+1} &= Be^{i[\omega t-(2n+1)aq]}\end{aligned}}$$

原胞变大，倒格矢变小，布里渊区变小

周期性边界条件：

2N个原子： $N\cdot(2aq)=2\pi h, h$为整数 $\quad q=\frac{h\pi}{Na}$

格波个数

- **一个q值对应两个格波，q的取值数为N**
  - **h只能从-N/2到N/2**

对于双原子链，有2N个原子，也有2N个格波，即2N个自由度

6.1 晶格振动的经典描述

- 6.1.1 假设固体为均匀弹性介质——弹性波（略讲）

考虑晶格的周期性——格波

- 6.1.2 简单晶格模型——一维单原子链
- 6.1.3 复式晶格模型——一维双原子链
- 6.1.4 推广——三维晶格的振动（教材P147）

三维晶体格波的声学波和光学波

- 色散关系(一个复式晶格原胞含有n个原子)
  - ω^2的3n次方程有3n个解ω_j
  - 3个声学支
  - 3n-3个光学支
- 声学波的长波极限
  - 当$q \rightarrow 0$，3个解（3个偏振方向）ω_j正比于q
  - 且所有位移矢量A_k趋同，即长波极限下原胞内原子一起移动
- 光学波的长波极限
  - 3n-3个解描述相对振动，频率不为0

三维晶体格波的振动模

色散关系中的一组(ω, q)即对应一个振动模

每个q占据的q空间体积为 $\dfrac{\beta_1}{N_1}\cdot\left(\dfrac{\beta_2}{N_2}\times\dfrac{\beta_3}{N_3}\right)=\dfrac{1}{N}\times$倒格子原胞的体积

边界条件允许的q在q空间均匀分布的密度

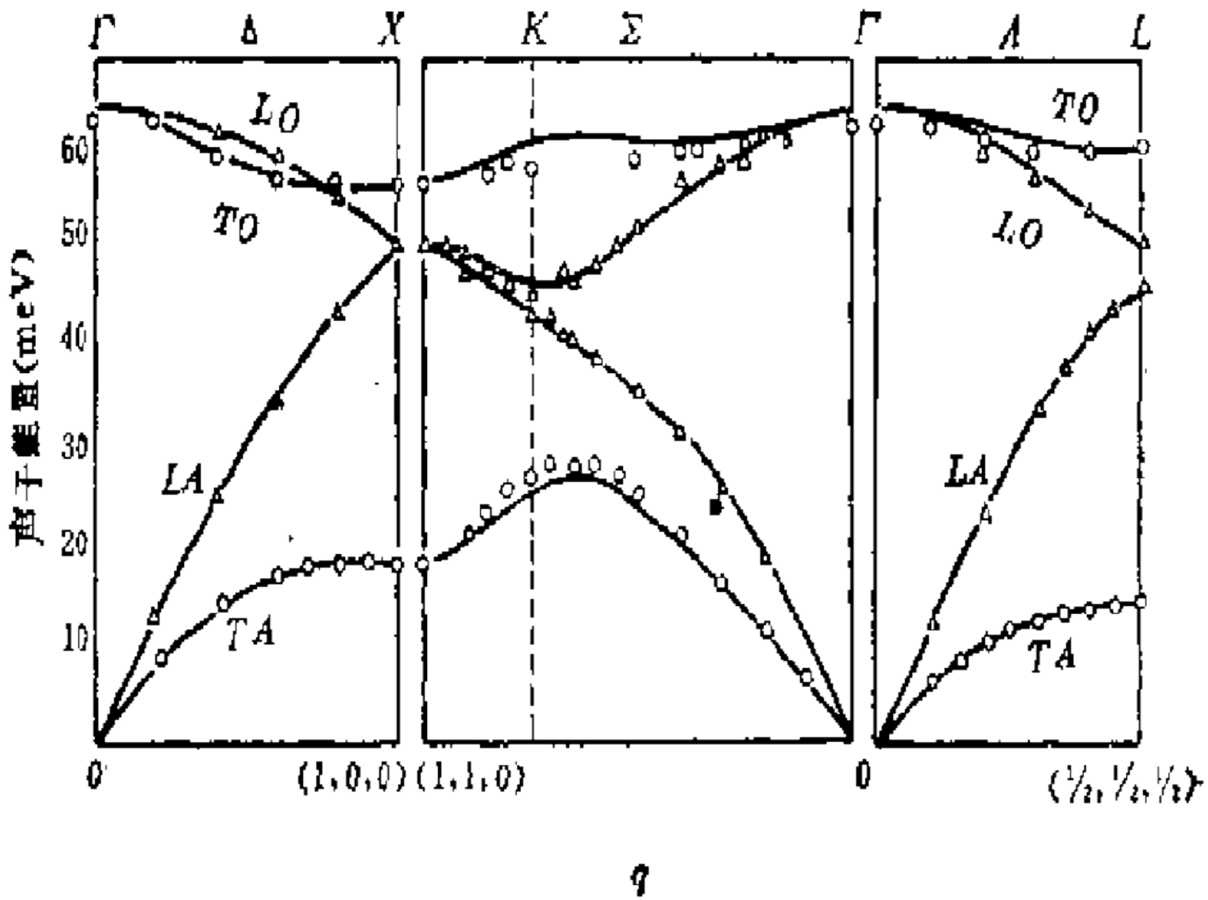
$$\text{状态密度}=\frac{1}{\dfrac{\beta_1}{N_1}\cdot\left(\dfrac{\beta_2}{N_2}\times\dfrac{\beta_3}{N_3}\right)}=\frac{Nv_0}{(2\pi)^3}=\frac{V}{(2\pi)^3}$$

一个倒格子原胞内q的取值已经代表了所有不同的格波，而不同的q的总数是：(倒格子原胞体积)×V / $(2\pi)^3$ = N，所以不同的格波总数是N · (3 + 3n - 3) = 3nN，正好等于晶体中nN个原子的自由度

典型的格波色散关系

- $\omega(q)$是波矢q的函数
  - 波矢方向一般选择最为典型的对称轴方向
  - 格波色散关系也称晶格振动谱
- 横波、纵波
  - 适用条件：q沿对称轴，晶体绕轴转π/2 (<100>)，或者π/3、2π/3(<111>)是对称操作
  - LA,LO：纵声学波、光学波
  - TA,TO：横声学波、光学波

典型格波谱(Si的格波谱)



小结

- 弹性波是线性的色散关系
- 晶格振动，简谐近似求解牛顿力学方程——格波
- 一维单原子链、色散关系
  - 长波极限——弹性波
  - 短波极限——驻波
- 一维双原子链、色散关系（光学支、声学支）
  - 长波极限——声学波是弹性波、反映原胞内原子的一致振动；光学波反映原胞内原子的相互振动
  - 短波极限——声学波和光学波都是驻波
- 三维晶格：原胞数N，一个原胞内n个原子，总原子数nN，总自由度$3nN$
  - 色散关系$3n$支：声学支3，光学支$3n$-3
  - q有N个取值
  - 格波数$3nN$：声学波$3N$，光学波$(3n\text{-}3)N$

作业

- 7.1-7.4