Chapter 3.1: 课后作业

考虑一维双原子链(1D diatomic chain):

1) 计算长波极限($q \to 0$)下声学支和光学支格波的色散关系$\omega \sim q$;

2) 分析第一布里渊区边界处的振动特点;

3) 当$m = M$时, 画出第一布里渊区内的色散关系$\omega \sim q$, 并与一维单原子链(1D monoatomic chain) 的情形进行比较.

提交时间： 3月17日之前

提交方式： 手写（写明姓名学号）后拍照，通过本班课代表统一提交电子版

Chapter 3.1: 课后作业-答案

考虑一维双原子链(1D diatomic chain):

1) 计算长波极限($q \to 0$)下声学支和光学支格波的色散关系ω~q;

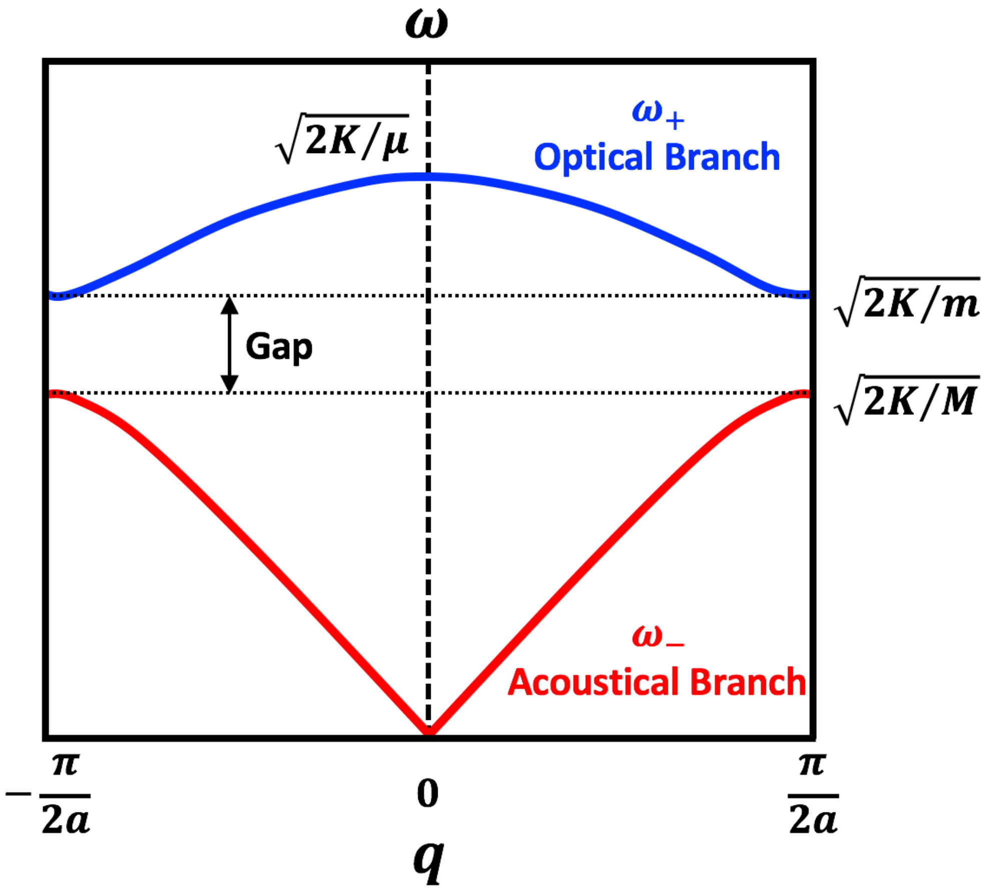
$$\omega^2 = \begin{cases} \omega_+^2 = \dfrac{K}{\mu}\left[1 + \sqrt{1 - \dfrac{4\mu^2}{mM}\sin^2(aq)}\right] \xrightarrow{q \to 0} \omega_+^2 \to \dfrac{2K}{\mu} \\ \omega_-^2 = \dfrac{K}{\mu}\left[1 - \sqrt{1 - \dfrac{4\mu^2}{mM}\sin^2(aq)}\right] \xrightarrow{q \to 0} \omega_-^2 \to 0 \end{cases}$$

注意对比一维单原子链: $\omega = 2\sqrt{\dfrac{K}{m}}\left|\sin\left(\dfrac{1}{2}aq\right)\right| \xrightarrow{q \to 0} \omega \to a\sqrt{\dfrac{K}{m}}|q|$

Chapter 3.1: 课后作业-答案

考虑一维双原子链(1D diatomic chain):

1) 计算长波极限($q \to 0$)下声学支和光学支格波的色散关系$\omega \sim q$;



Chapter 3.1: 课后作业-答案

考虑一维双原子链(1D diatomic chain):

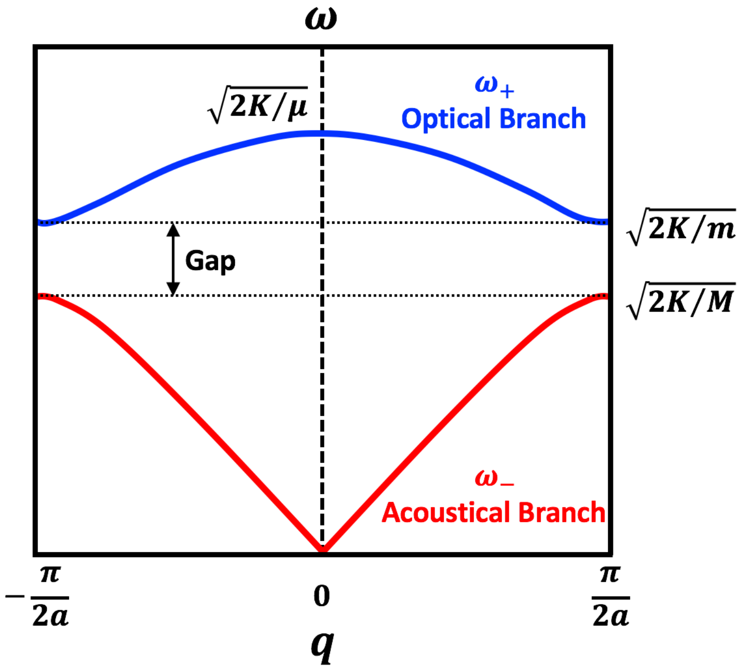
2) 分析第一布里渊区边界处的振动特点;

$$q = \pm\frac{\pi}{2\mathrm{a}} \longrightarrow \quad \omega_+^2 \to \frac{2K}{m} \qquad \omega_-^2 \to \frac{2K}{M}$$

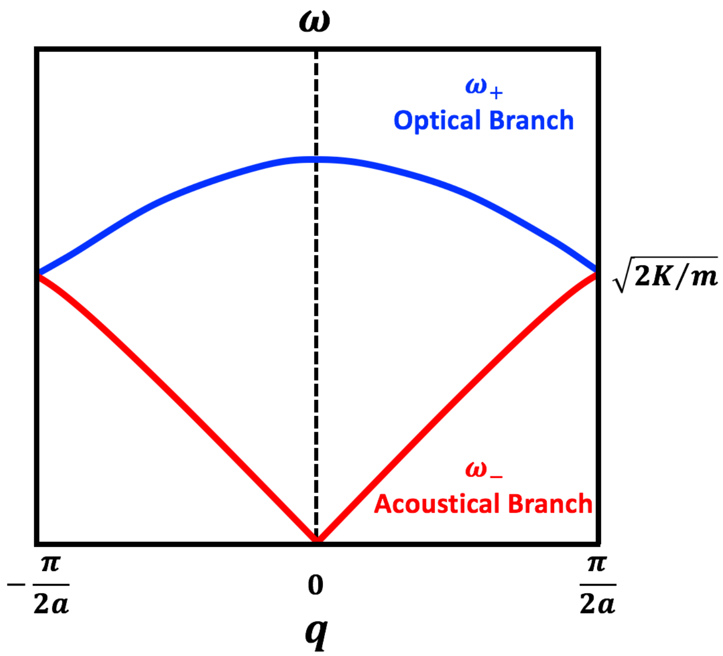
$$\left.\begin{aligned}(m\omega^2 - 2K)A + 2K\cos(aq)\,B &= 0\\ 2K\cos(aq)\,A + (M\omega^2 - 2K)B &= 0\end{aligned}\right\} \longrightarrow \begin{cases} A_+\text{为任意值，}\quad B_+ = 0 \\ A_- = 0\text{，}\quad B_-\text{为任意值}\end{cases}$$

考虑一维双原子链(1D diatomic chain):

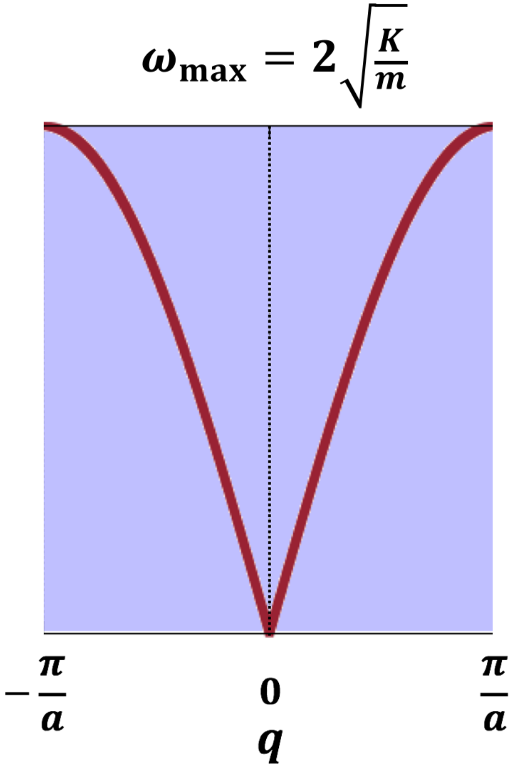
3) 当$m = M$时, 画出第一布里渊区内的色散关系$\omega \sim q$, 并与一维单原子链(1D monoatomic chain)的情形进行比较.



1D双原子链



1D双原子链（$m = M$）



1D单原子链

Chapter 3.2: 课后作业

考虑一维量子谐振子 $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$,

令 $\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)$ 和 $\hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)$

证明:

1) $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$

2) $[\hat{a}^+\hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+$

3) $[\hat{a}^+\hat{a}, \hat{a}] = -\hat{a}$

4) $\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right)$

提交时间：3月17日之前

提交方式：手写（写明姓名学号）后拍照，通过本班课代表统一提交电子版

证明要点: 利用$[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$ $\hat{a}=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x}+\frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)$ $\hat{a}^{+}=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x}-\frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)$

证明: 1) $[\hat{a},\hat{a}^{+}]=1$

$$[\hat{a},\hat{a}^{+}]=\hat{a}\ \hat{a}^{+}-\hat{a}^{+}\,\hat{a}$$

$$=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x}+\frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x}-\frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)-\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x}-\frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x}+\frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)$$

$$=-\frac{i}{\hbar}(\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x})$$

$$=1$$

Chapter 3.2: 课后作业-答案

证明要点: 利用$[\hat{a},\hat{a}^{+}]=1$ 即 $\hat{a}\,\hat{a}^{+}-\hat{a}^{+}\hat{a}=1$

证明: 2) $[\hat{a}^{+}\hat{a},\hat{a}^{+}]=\hat{a}^{+}$

$$[\hat{a}^{+}\hat{a},\hat{a}^{+}]=\hat{a}^{+}\hat{a}\,\hat{a}^{+}-\hat{a}^{+}\hat{a}^{+}\hat{a}=\hat{a}^{+}(1+\hat{a}^{+}\hat{a})-\hat{a}^{+}\hat{a}^{+}\hat{a}=\hat{a}^{+}$$

证明: 3) $[\hat{a}^{+}\hat{a},\hat{a}]=-\hat{a}$

$$[\hat{a}^{+}\hat{a},\hat{a}]=\hat{a}^{+}\hat{a}\hat{a}-\hat{a}\hat{a}^{+}\hat{a}=(\hat{a}\hat{a}^{+}-1)\hat{a}-\hat{a}\hat{a}^{+}\hat{a}=-\hat{a}$$

Chapter 3.2: 课后作业-答案

证明要点: 利用 $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2}\frac{1}{m\omega}}(\hat{a}^+ + \hat{a})$ $\hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar}{2}m\omega}(\hat{a}^+ - \hat{a})$ $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$

证明: 4) $\widehat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right)$

$$\widehat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 = -\frac{\hbar\omega}{4}(\hat{a}^+ - \hat{a})(\hat{a}^+ - \hat{a}) + \frac{\hbar\omega}{4}(\hat{a}^+ + \hat{a})(\hat{a}^+ + \hat{a})$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+)$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a} + 1)$$

$$= \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right)$$

Chapter 3.3: 课后作业

设晶体中每个振动模的零点振动能为$\frac{1}{2}\hbar\omega$，使用德拜模型和爱因斯坦模型分别求晶体的零点振动能。

提交时间： 3月17日之前

提交方式： 手写（写明姓名学号）后拍照，通过本班课代表统一提交电子版

Chapter 3.3: 课后作业-答案

解题要点：充分理解态密度$g(\omega)$的物理意思，并利用态密度将"求和"化为"积分"

解：

$$E=\sum_{j}^{3N}\frac{1}{2}\hbar\omega_j=\int_0^{\omega}\frac{1}{2}\hbar\omega g(\omega)\mathrm{d}\omega$$

设N为原胞个数，每个原胞1个原子

德拜模型：

$$g(\omega)=\frac{3V}{2\pi^2\bar{c}^3}\omega^2 \qquad \omega_{\mathrm{D}}=\bar{c}\left[6\pi^2\left(\frac{N}{V}\right)\right]^{1/3}$$

$$\longrightarrow \quad E_{\mathrm{Debye}}=\int_0^{\omega_{\mathrm{D}}}\frac{1}{2}\hbar\omega g(\omega)\mathrm{d}\omega=\frac{9}{8}N\hbar\omega_{\mathrm{D}}$$

解题要点：充分理解态密度$g(\omega)$的物理意思，并利用态密度将"求和"化为"积分"

解：

$$E=\sum_{j}^{3N}\frac{1}{2}\hbar\omega_j=\int_0^{\omega}\frac{1}{2}\hbar\omega g(\omega)\mathrm{d}\omega$$

设N为原胞个数，每个原胞1个原子

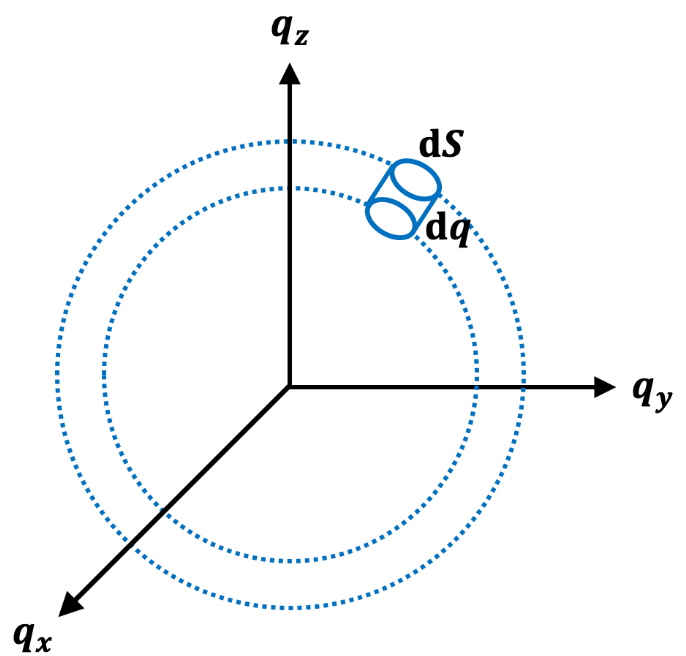
爱因斯坦模型：$g(\omega)=3N\delta(\omega-\omega_{\mathrm{E}})$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}f(x)\delta(x-x_0)=f(x_0)$$

$$\longrightarrow\quad E_{\mathrm{Einstein}}=\int_0^{+\infty}\frac{1}{2}\hbar\omega g(\omega)\mathrm{d}\omega=\frac{3}{2}N\hbar\omega_{\mathrm{E}}$$

解题要点：充分理解态密度$g(\omega)$的物理意思，并利用态密度将”求和”化为”积分”

德拜模型态密度的推导： $g(\omega)=\dfrac{3V}{2\pi^2\bar{c}^3}\omega^2$



德拜模型考虑线性色散： $\omega=cq$

态密度可表示为：

$$g(\omega)=\frac{V}{(2\pi)^3}\oiint\frac{\mathrm{d}S}{|\nabla_q\omega_q|}=\frac{V}{(2\pi)^3}\frac{4\pi q^2}{|\nabla_q\omega_q|}=\frac{V}{(2\pi)^3}\frac{4\pi\omega^2}{c^3}=\frac{V}{2\pi^2}\frac{\omega^2}{c^3}$$

Chapter 3.3: 课后作业-答案

解题要点：充分理解态密度$g(\omega)$的物理意思，并利用态密度将"求和"化为"积分"

三维情况下：1支纵波（声速c_{L}）和2支横波（声速c_{T}）

对于1支纵波，态密度： $g_{\mathrm{L}}(\omega)=\dfrac{V}{2\pi^2}\dfrac{\omega^2}{c_{\mathrm{L}}^3}$

对于2支横波，态密度： $g_{\mathrm{T}}(\omega)=\dfrac{V}{2\pi^2}\left(\dfrac{\omega^2}{c_{\mathrm{T}}^3}+\dfrac{\omega^2}{c_{\mathrm{T}}^3}\right)=\dfrac{\omega^2}{c_{\mathrm{T}}^3}\dfrac{2\omega^2}{c_{\mathrm{T}}^3}$

总态密度： $g(\omega)=g_{\mathrm{L}}(\omega)+g_{\mathrm{T}}(\omega)=\dfrac{V}{2\pi^2}\left(\dfrac{\omega^2}{c_{\mathrm{L}}^3}+\dfrac{2\omega^2}{c_{\mathrm{T}}^3}\right)=\dfrac{3V}{2\pi^2\bar{c}^3}\omega^2$

等效声速： $\dfrac{1}{\bar{c}^3}=\dfrac{1}{3}\left(\dfrac{1}{c_{\mathrm{L}}^3}+\dfrac{2}{c_{\mathrm{T}}^3}\right)$