第三节　三维晶格的振动

1、三维晶格振动的一般性结论

若三维晶格为复式格子，每个固体物理学原胞中包含n个原子，整个晶体包含N个原胞，则整个晶体共包含nN个原子，晶体的自由度数为3nN。

(1)、存在3n支独立的频支(3n个独立格波)。即：对于每一个q 值，都存在3n个ω值与之对应。3支声学支，3n-3支光学支。

声学支描述的是不同原胞之间的相对运动；光学支描述的是同一原胞内各原子之间的相对运动。

(2)、波矢 $\vec{q}$ 在第一布里渊区取N个分离的值，

$\vec{q}$ 的取值个数等于晶体原胞数。

(3)、晶格振动的总的频率数为3nN,

即：晶格振动的频率数 $= 3nN$

$=$ 晶体的自由度数

2、晶格振动的频率分布函数

晶格振动的频率分布函数被定义为：

单位频率间隔内包含的振动方式数，

即：$\rho_{(\omega)}$ 代表单位频率间隔内所包含 $\vec{q}$ 的取值个数。$dZ = \rho_{(\omega)} d\omega$

$$\rho_{(\omega)} = \frac{dZ}{d\omega} = \frac{dZ}{d\vec{q}}\frac{d\vec{q}}{d\omega}$$

$\frac{dZ}{d\vec{q}}$ 代表波矢空间中 $\vec{q}$ 点子密度，

$\frac{d\vec{q}}{d\omega}$ 可由色散关系求出

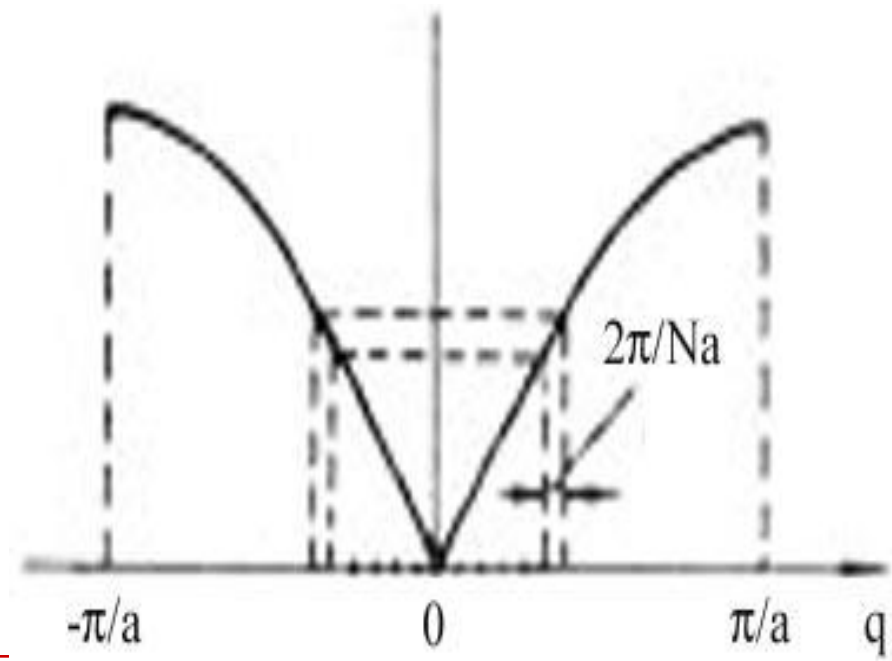
(1)、对一维原子链晶格，波矢空

间中 $\vec{q}$ 点子的密度为 $\dfrac{L}{2\pi}$ 。

(L为整个原子链的总长度)

第一布里渊区的长度为 $\dfrac{2\pi}{a}$，在 $\dfrac{2\pi}{a}$ 长的区间内有N个 $\vec{q}$ 点子，在波矢空间中 $\vec{q}$ 点子密度:

$$\frac{N}{2\pi/a} = \frac{Na}{2\pi} = \frac{L}{2\pi}$$



(2)、对二维晶格，波矢空间中 $\vec{q}$ 点子

的密度为 $\dfrac{S}{(2\pi)^2}$ 。

S 为二维原子面的面积。

对于二维原子面，第一布里渊区的面积

为 $\frac{(2\pi)^2}{S_0}$， S_0为二维正格子原胞面积，

在 $\frac{(2\pi)^2}{S_0}$ 面积内有N个 $\vec{q}$ 点子。

在波矢空间中 $\vec{q}$ 点子的密度为:

$$\frac{N}{(2\pi)^2 / S_0} = \frac{NS_0}{(2\pi)^2} = \frac{S}{(2\pi)^2}$$

(3)、对三维晶格，波矢空间中 $\vec{q}$ 点

子的密度为 $\dfrac{V_C}{(2\pi)^3}$ ，

(V_C 为整个三维晶体的总体积)

第一布里渊区的体积为 $\dfrac{(2\pi)^3}{V_0}$ ，

V_0 为正格子原胞体积

在 $\dfrac{(2\pi)^3}{V_0}$ 体积内有 N 个 $\vec{q}$ 点子

在波矢空间中 $\vec{q}$ 点子的密度为:

$$\frac{N}{(2\pi)^3 \big/ V_0} = \frac{NV_0}{(2\pi)^3} = \frac{V_C}{(2\pi)^3}$$

一维晶格振动的频率分布函数为:

$$\rho_{(\omega)} = \frac{L}{2\pi}\frac{d\vec{q}}{d\omega}$$

二维晶格振动的频率分布函数为:

$$\rho_{(\omega)} = \frac{S}{(2\pi)^2} \frac{d\vec{q}}{d\omega}$$

三维晶格振动的频率分布函数为:

$$\rho_{(\omega)} = \frac{V_C}{(2\pi)^3} \frac{d\vec{q}}{d\omega}$$

对于三维晶格，由于存在不止一个频支，更一般的情况为：

$$\rho_{(\omega)} = \sum_j \rho_{(\omega_j)} = \sum_j \frac{V_C}{(2\pi)^3} \frac{1}{\frac{d\omega_j}{d\vec{q}}}$$

（j代表第 j 支频支）

若量子化现象不明显，求和可改写为在波矢空间中的积分，则三维晶格振动的频率分布函数一般表达式为:

$$\rho_{(\omega)} = \frac{V_C}{(2\pi)^3} \int \frac{dS}{\left|\nabla_{\vec{q}}\omega_j\right|}$$

注意:

$$\rho_{(\omega)} = \frac{L}{2\pi}\frac{d\vec{q}}{d\omega} \quad \textbf{(一维)}$$

$$\rho_{(\omega)} = \frac{S}{(2\pi)^2}\frac{d\vec{q}}{d\omega} \quad \textbf{(二维)}$$

$$\rho_{(\omega)} = \frac{V_C}{(2\pi)^3}\frac{d\vec{q}}{d\omega} \quad \textbf{(三维)}$$

一维

$$\rho_{(\omega)} = \frac{L}{2\pi}\frac{d\vec{q}}{d\omega}$$

$$d\vec{q} = 2dq$$

$$\Downarrow$$

$$\rho_{(\omega)} = \frac{L}{\pi}\frac{dq}{d\omega}$$

二维

$$\rho_{(\omega)} = \frac{S}{(2\pi)^2} \frac{d\vec{q}}{d\omega} \qquad d\vec{q} = 2\pi q dq$$

$$\downarrow$$

$$\rho_{(\omega)} = \frac{S}{2\pi} q \frac{dq}{d\omega}$$

三维

$$\rho_{(\omega)} = \frac{V_C}{(2\pi)^3} \frac{d\vec{q}}{d\omega} \qquad d\vec{q} = 4\pi q^2 dq$$

$$\downarrow$$

$$\rho_{(\omega)} = \frac{V_C}{2\pi^2} q^2 \frac{dq}{d\omega}$$

课堂练习

1、已知某一维原子晶格的色散关系为 $\omega = vq$ 求晶格振动的的频率分布函数

2、已知某二维晶格的色散关系为 $\omega = vq$ 求晶格振动的的频率分布函数

3、已知某三维晶格的色散关系为 $\omega = vq$ 求晶格振动的的频率分布函数

1、已知某一维原子晶格的色散关系为 $\omega = vq$

求晶格振动的的频率分布函数

一维 $\rho_{(\omega)} = \frac{L}{2\pi}\frac{d\vec{q}}{d\omega}$ $d\vec{q} = 2dq$

$$\rho(\omega) = \frac{L}{\pi}\frac{dq}{d\omega} = \frac{L}{\pi v}$$

2、已知某二维晶格的色散关系为 $\omega = vq$ 求晶格振动的的频率分布函数

二维 $\rho_{(\omega)} = \dfrac{S}{(2\pi)^2}\dfrac{d\vec{q}}{d\omega}$ $d\vec{q} = 2\pi q dq$

$$\downarrow$$

$$\rho_{(\omega)} = \frac{S}{2\pi} q \frac{dq}{d\omega} = \frac{S}{2\pi v^2}\omega$$

3、已知某三维晶格的色散关系为 $\omega = vq$ 求晶格振动的的频率分布函数

三维 $\rho_{(\omega)} = \frac{V_C}{(2\pi)^3}\frac{d\vec{q}}{d\omega}$ $d\vec{q} = 4\pi q^2 dq$

$\Downarrow$

$$\rho_{(\omega)} = \frac{V_C}{2\pi^2} q^2 \frac{dq}{d\omega} = \frac{V_C}{2\pi^2 v^3}\omega^2$$