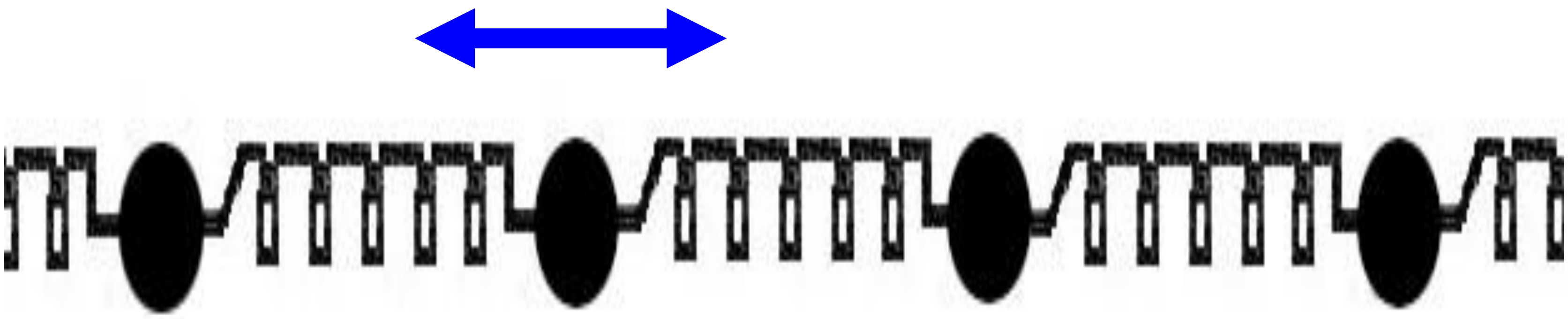
第三章　晶格振动

- 晶格振动 — 组成晶体的原子围绕其平衡位置的振动



□ 本章的线索：

(1)、研究晶格振动的基本规律，

引入格波、声子等概念，

了解其性质。

(2)、介绍固体比热规律及理论。

第一节、一维单原子晶格的振动

处理规程:

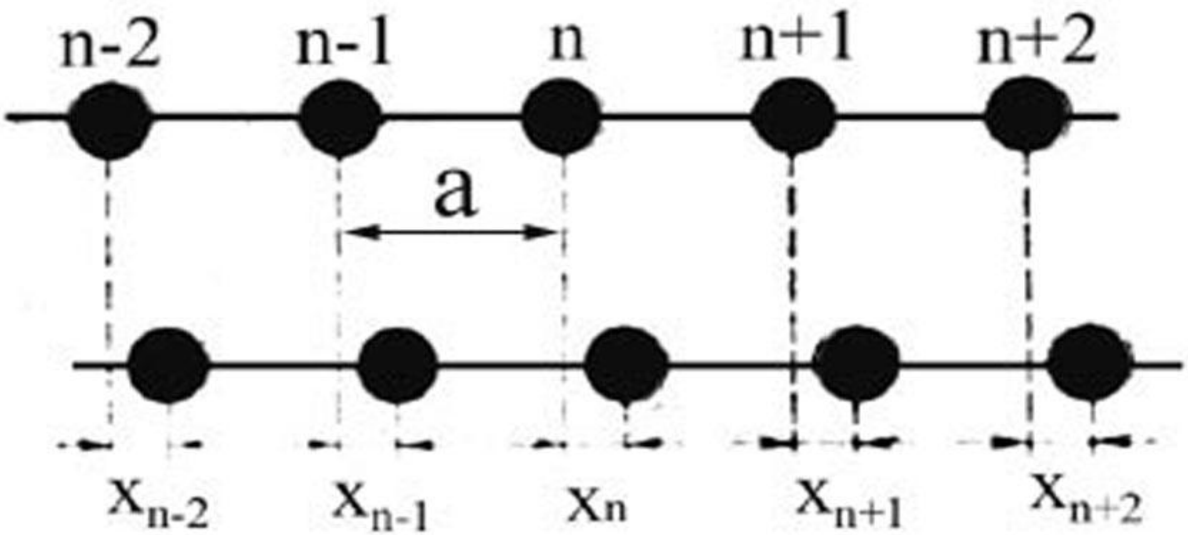
(1)、建立模型。

(2)、振动谱的求解。

(3)、讨论。

一．模型：

原子质量m，晶格常数a。第n个原子的平衡位置坐标为na，第n个原子在t时刻偏离平衡位置的位移量为x_n



模型

二、求解的思路:

1、分析原子受力;

2、列运动方程;

3、写试探解;

4、求色散关系。

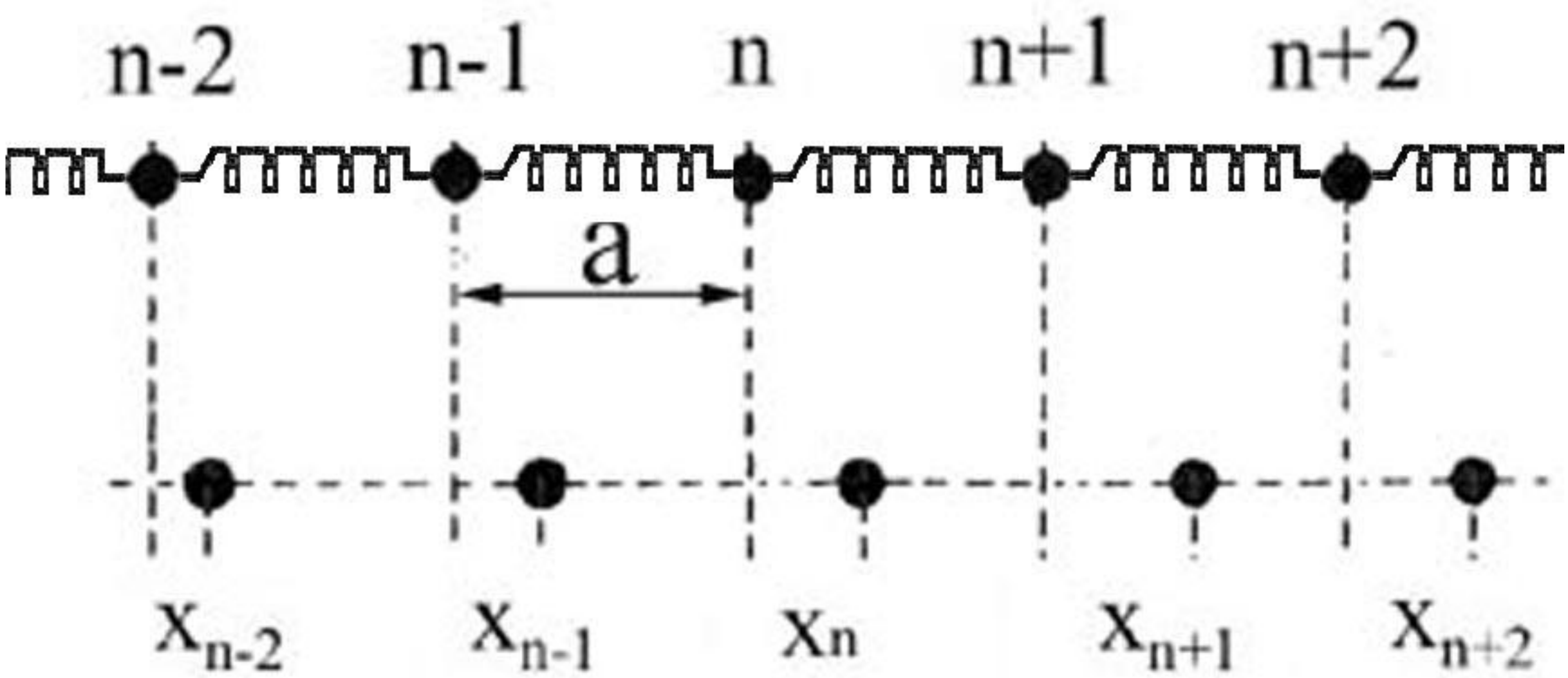
1、分析第n个原子的受力

设平衡位置时两个原子间的互作用势为U(a)，若原子间产生相对位移δ后，相互作用势能变为U(a+δ)，当位移δ很小，将U(a+δ)在平衡位置位置附近展开

$$U(a+\delta)=U(a)+[(\frac{dU}{dx})|x=a)]\delta+\frac{1}{2}\left[(\frac{d^2U}{d^2x})|x=a\right]\delta^2+\cdots$$

$$f(x) = -\frac{dU}{d\delta} = -(\frac{d^2U}{d^2x}\Big|x = a)\delta = -\beta\delta$$

$$\beta = \left(\frac{d^2U}{d^2x}\right)\Big\|_{x=a}$$ 为力常数



等效模型

只考虑相邻原子间的相互作用，第**n**个原子所受的力为:

$$\beta(x_{n+1}-x_n)-\beta(x_n-x_{n-1})$$

$$=\beta(x_{n+1}+x_{n-1}-2x_n)$$

2、列出运动方程

第n个原子的运动方程为:

$$m\ddot{x}_n = \beta(x_{n+1} + x_{n-1} - 2x_n)$$

其中，(n=1,2,……N)

对每个原子都有一个类似的运动方程

3、试探解

假设方程的解为:

$$x_n = Ae^{i(\omega t - qna)}$$

A------振幅　　　ω-----振动的角频率

qna----第n个原子振动的位相因子

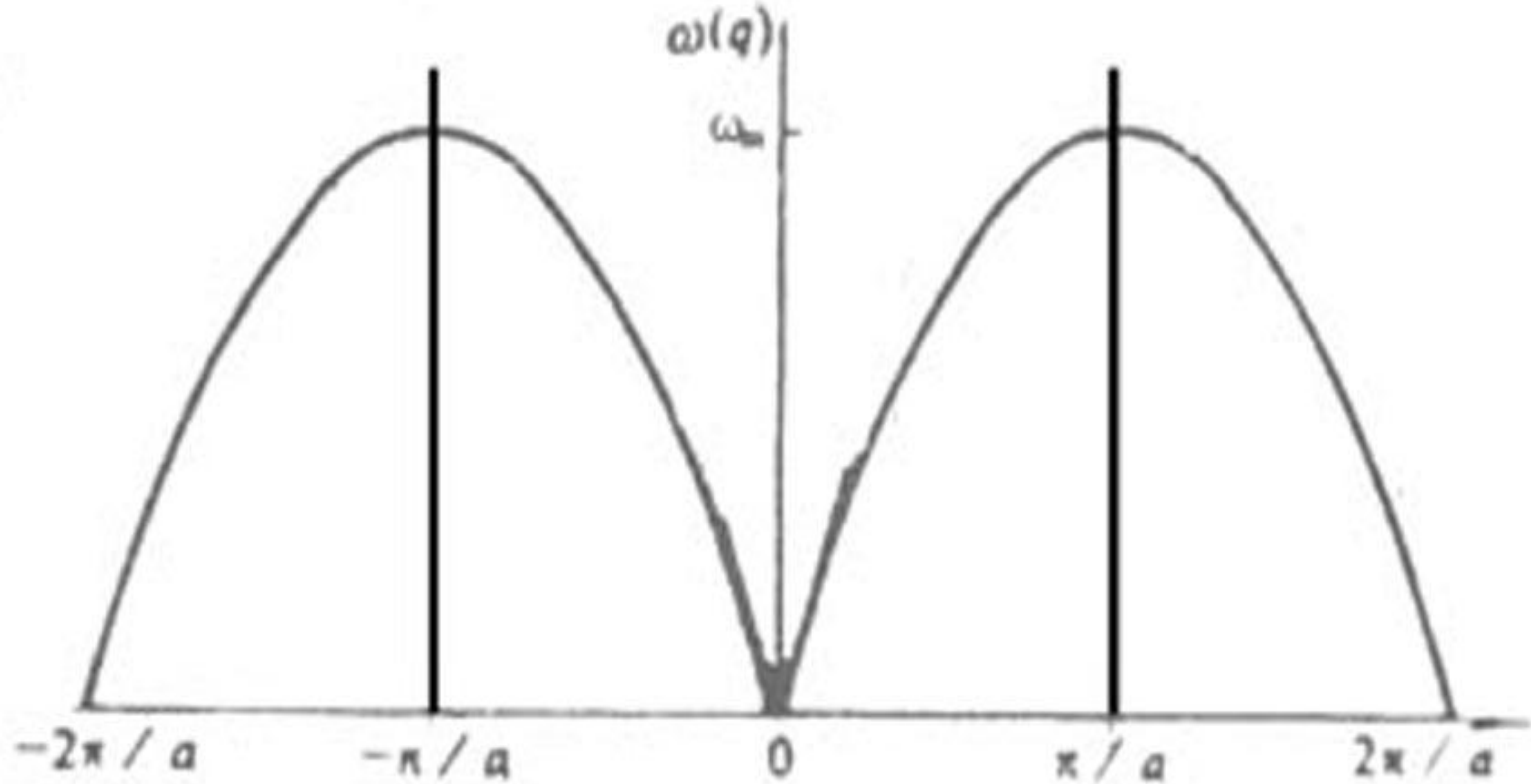
4、色散关系

将试探解代入运动方程，得:

$$\omega^2 = \frac{2\beta}{m}[1 - \cos(qa)]$$

$$\Downarrow$$

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}\left|\sin\left(\frac{qa}{2}\right)\right|$$ -----色散关系



一维单原子链的色散关系

三、讨论

第n个原子 $\begin{cases} \text{运动方程(振动方程)} \\ \text{色散关系} \end{cases}$

对每个原子，都有一个类似的运动方程

↓

晶体中原子的运动具有传递性

晶格中存在角频率为ω的平面波，

这种平面波代表了晶格振动的传播

------格波

格波 ---- 晶格振动在晶体中的传播

- 格波的波长---- $\lambda = 2\pi / q$

格波的波矢---- $\vec{q} = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{n}$

$\vec{n}$ 为格波传播方向上的单位矢量

格波的相速---- $v = \frac{\omega}{q}$

晶格振动模式指晶格本征振动模式，

在特定条件下，晶体中所激发出的具体振动模式是本征模式中的一种。

1、格波波矢的取值范围

考察两相邻原子在时刻t的位移比:

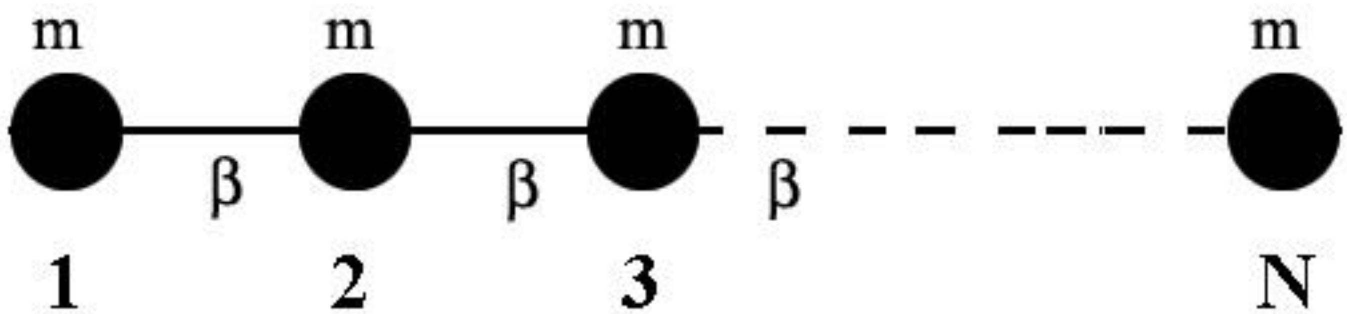
$$\frac{x_{n+1}}{x_n}=\frac{Ae^{-i(qna+qa-\omega t)}}{Ae^{-i(qna-\omega t)}}=e^{-iqa}$$

有意义的 qa 取值范围为 $(-\pi,\pi)$，也就是说，两相邻原子的位相差大于 π 是没有物理意义的，因此，独立的q的取值区间为：

$$-\frac{\pi}{a} \le q \le \frac{\pi}{a}$$ -----第一布里渊区内

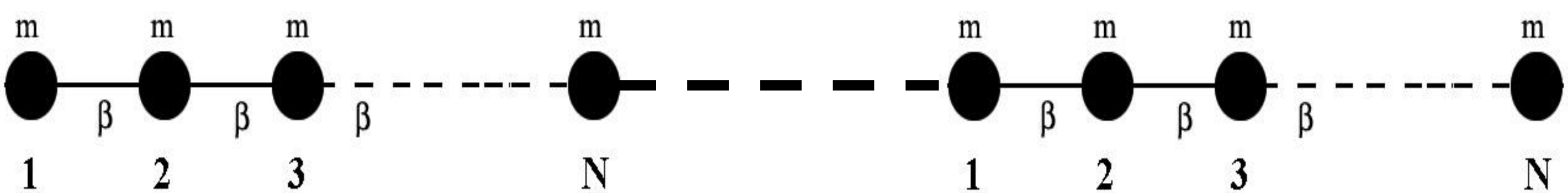
2.周期性边界条件

对于有限长一维原子链，必须考虑边界的影响



Born-Karman周期性边界条件:

在有限晶格外，还有无限个完全相同的晶格，且各晶格内对应原子完全相同，即：第原子j和原子 tN+j 完全相同。



第1条链　　　　第N条链

在周期性边界条件下，对于由N个原子构成的一维有限长度单原子链，由于:

$$x_n = x_{n+N}$$

而 $$x_n = Ae^{-i(qna-\omega t)}$$

$$x_{n+N} = Ae^{-i(qna+qNa-\omega t)}$$

则 $e^{iqNa}=1 \longrightarrow qNa=2\pi l$

$$q=\frac{2\pi}{Na}l$$

（l 为整数）

描写晶格振动状态的波矢q只能在第一布里渊区内取分离的值。

由于 $-\dfrac{\pi}{a} \le q \le \dfrac{\pi}{a}$

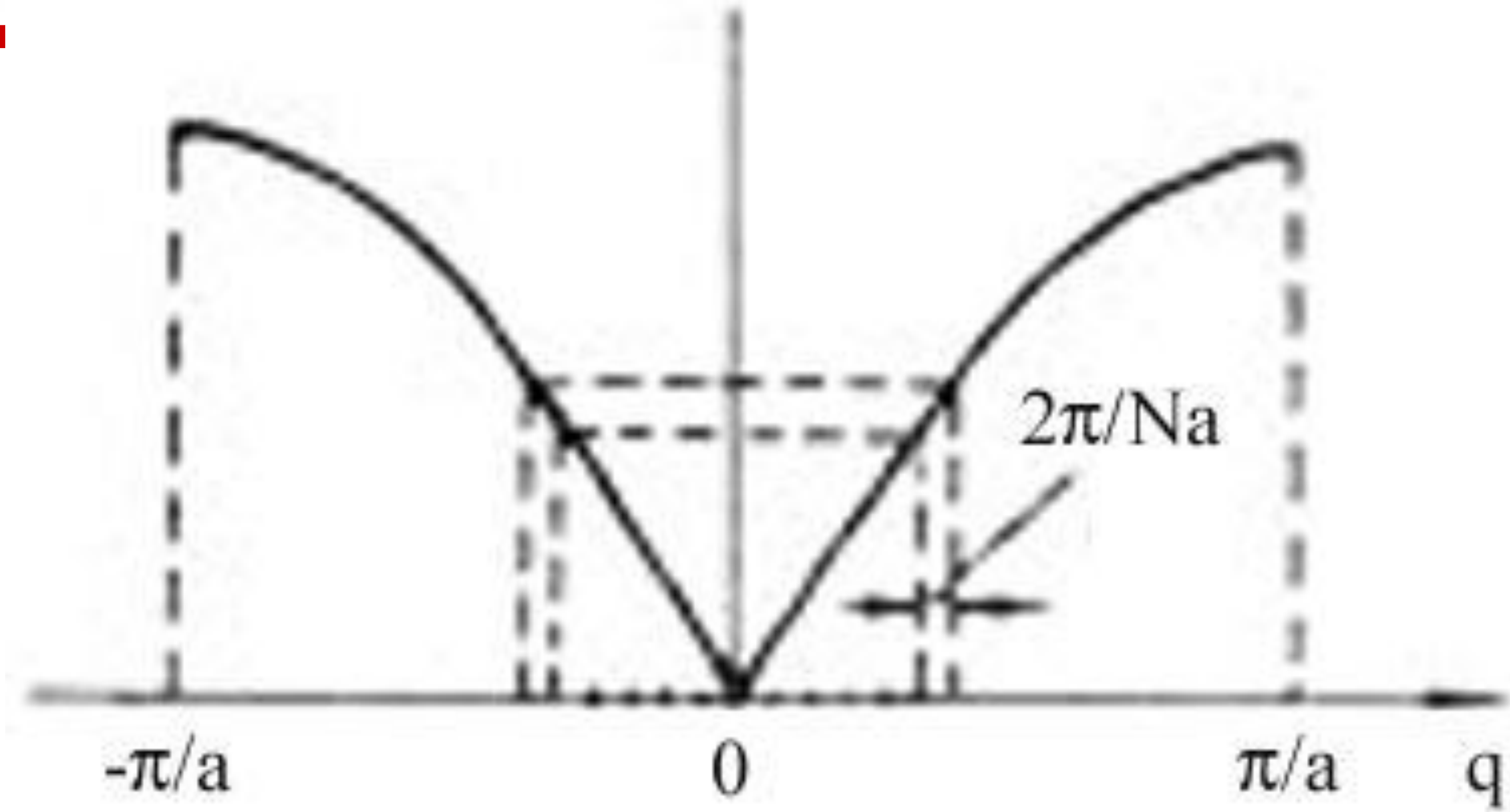
而 $q = \dfrac{2\pi}{Na} l$　　（l 为整数）

所以 $-\dfrac{N}{2} < l \le \dfrac{N}{2}$

l 只能取N个分离的值

q 只能取N个不同的分离值

波矢的取值个数 = 晶体原胞数



一维单原子链的波矢 q 的取值

3.格波与连续介质弹性波比较

格波	连续介质弹性波
$x_n = Ae^{i(\omega t - qna)}$ 由于na不是连续变化的，位相差不是连续变化的。	$y = Ae^{i(\omega t - qx)}$ 位移量连续变化， 位相差也连续变化

格波	连续介质弹性波
$v_{相速} = {}^{\omega}\!/_{q}$ $= 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}\left\vert\sin(\frac{qa}{2})\right\vert\frac{1}{q}$ $\neq const.$	$\omega = \left(\sqrt{{}^{K}\!/_{\rho}}\right)q$ $v_{相速} = {}^{\omega}\!/_{q} = \sqrt{{}^{K}\!/_{\rho}}$ $= const.$ K 为体积弹性模量 ρ 为体密度

格波	连续介质弹性波
$q = \frac{2\pi}{Na} l$ $(-\frac{N}{2} \le l \le \frac{l}{2})$ q在 $-\frac{\pi}{a} \sim \frac{\pi}{a}$ 之间取N个分离值	波矢 q 的取值不受任何限制

格波	连续介质弹性波
格波的长波极限可以被处理为 连续介质弹性波	

长波极限：$q \to 0$

当 $q \to 0$ 时 $\longrightarrow$ $\sin(\frac{qa}{2}) \approx \frac{qa}{2}$

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

$$v_{相速} = \sqrt{\frac{\beta}{m}}a = const.$$

格波的长波极限可被处理为连续介质弹