第二节　一维双原子链的晶格振动

一、模型

A、B两种原子构成一维复式格子，相邻同种原子距离为2a，A原子和B原子之间的距离和力常数分别为a、β

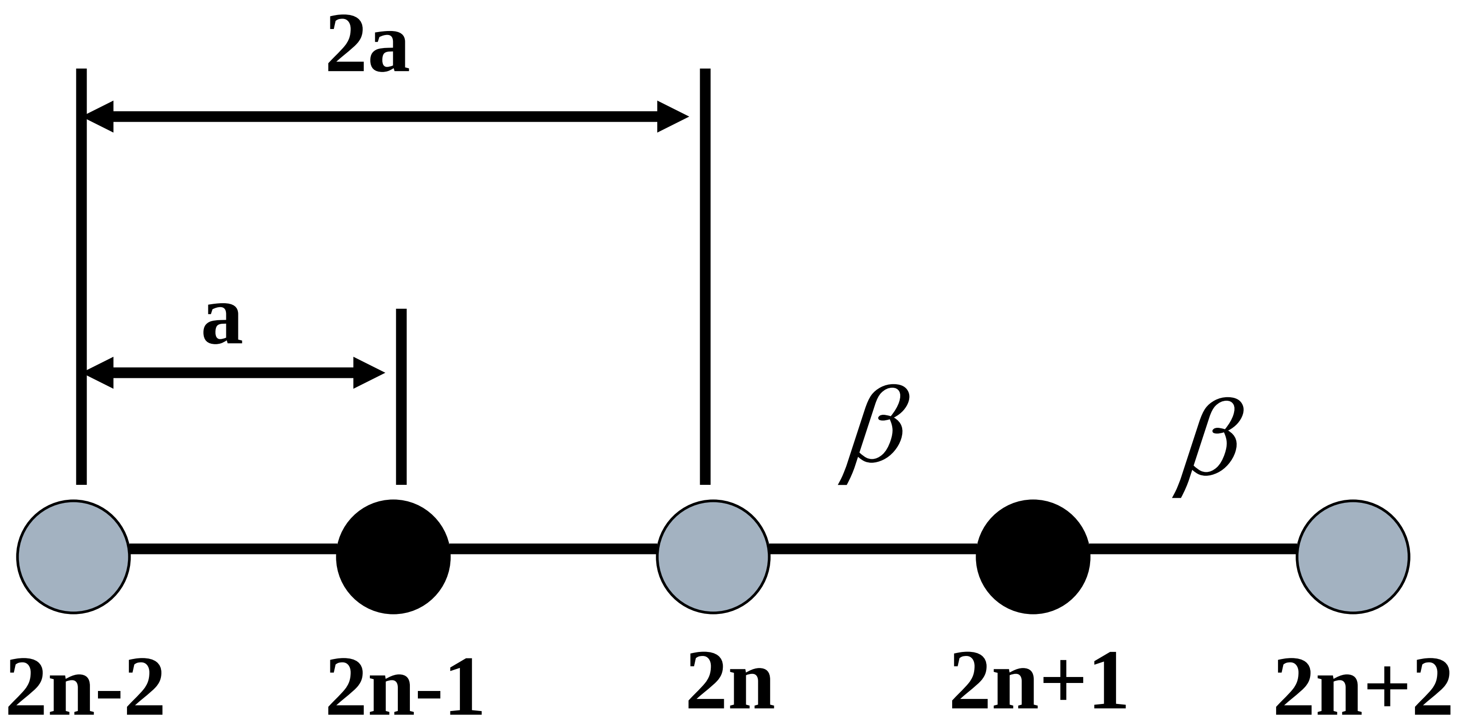
A原子质量为m，原子平衡位置标记为:

……2n-1，2n+1，2n+3，……..

B原子质量为M，原子平衡位置标记为:

……2n-2，2n，2n+2，………

且$M > m$



模型

二、一维双原子链的晶格振动

第2n个原子所受的力为:

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

第2n+1个原子所受的力为:

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

运动方程:

$$\begin{cases} M\ddot{x}_{2n} = \beta(x_{2n+1} + x_{2n-1} - 2x_{2n}) \\ m\ddot{x}_{2n+1} = \beta(x_{2n+2} + x_{2n} - 2x_{2n+1}) \end{cases}$$

试探解:

$$\begin{cases} x_{2n} = Be^{i(\omega t - 2qna)} \\ \\ x_{2n+1} = Ae^{i[\omega t - q(2n+1)a]} \end{cases} \Rightarrow$$

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

整理，得:

$$\begin{cases}(2\beta - m\omega^2)A - 2\beta\cos(qa)B = 0\\[2em] -2\beta\cos(qa)A + (2\beta - M\omega^2)B = 0\end{cases}$$

要使A、B有非平凡解，其系数行列式必须等于0

$$\begin{vmatrix} 2\beta - m\omega^2 & -2\beta\cos(qa) \\ -2\beta\cos(qa) & 2\beta - M\omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

解此方程，得:

$$\omega^2 = \frac{\beta}{Mm}\left\{(m+M) \pm \left[m^2 + M^2 + 2mM\cos(2qa)\right]^{1/2}\right\}$$

一个q值对应着两个ω值，也就是说:

一维双原子链存在两支独立格波。

两支格波的色散关系为:

$$\omega_-^2 = \frac{\beta}{Mm}\left\{\begin{aligned}&(m+M)-\\&\left[m^2+M^2+2mM\cos(2qa)\right]^{1/2}\end{aligned}\right\}$$

-----声学支

$$\omega_+^2 = \frac{\beta}{Mm}\left\{\begin{aligned}&(m+M)+\\&\left[m^2+M^2+2mM\cos(2qa)\right]^{1/2}\end{aligned}\right\}$$

-----光学支

波矢q仍在第一布里渊区取值

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

根据周期性边界条件，得:

$$q = \frac{2\pi}{2Na} l \qquad \left(-\frac{N}{2} < l \le \frac{N}{2}\right)$$ **N为原胞数**

对于一维双原子链:

晶格振动的波矢数 = N

= 晶体的原胞数

晶格振动的频率数 = 2N

= 晶体的自由度数

三、讨论

1、频率特性

(1)、光学支与声学支之间存在频隙

$$\omega_{-}^{2}=\frac{\beta}{Mm}\left\{\begin{array}{l}(m+M)-\\ \left[m^{2}+M^{2}+2mM\cos(2qa)\right]^{1/2}\end{array}\right\}$$

q的取值范围为 $\left(-\frac{\pi}{2a},\frac{\pi}{2a}\right)$

ω_{-} **的最大值为：**

$$(\omega_{-})_{\max}=(\frac{\beta}{Mm})^{1/2}\{(M+m)-(M-m)\}^{1/2}$$

$$=(\frac{2\beta}{M})^{1/2}$$

而 ω_+ 的最小值为:

$$(\omega_+)_{\min} = \left(\frac{\beta}{Mm}\right)^{1/2} \left\{(M+m)+(M-m)\right\}^{1/2}$$

$$= \left(\frac{2\beta}{m}\right)^{1/2}$$

$$(\omega_-)_{\max} = \left(\frac{2\beta}{M}\right)^{1/2} \qquad (\omega_+)_{\min} = \left(\frac{2\beta}{m}\right)^{1/2}$$

因为M > m $\longrightarrow$ $(\omega_-)_{\max} < (\omega_+)_{\min}$

声学支支与光学支之间存在一个频隙，

其大小等于 $\omega_{+最小} - \omega_{-最大}$，M和m

相差越大，频隙越宽。

(2)、长波极限

对 ω_- 支色散关系进行改写

$$\omega_-^2=\frac{\beta}{Mm}\left\{\begin{array}{l}(m+M)\\-\left[m^2+M^2+2mM\cos(2qa)\right]^{1/2}\end{array}\right\}$$

$$\omega_-^2 = \frac{\beta}{Mm}\left\{\begin{aligned}&(m+M)-\\&\left[(m+M)^2-2mM(1-\cos(2qa))\right]^{1/2}\end{aligned}\right\}$$

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

由于 $\dfrac{4Mm}{(M+m)^2} < 1$

长波近似下，$\dfrac{4Mm}{(M+m)^2}\sin^2(qa) << 1$ 成立

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

ω_- 支的色散关系变为：

$$\omega_- = \left(\frac{2\beta}{M+m}\right)^{1/2} \left|\sin(qa)\right|$$

与一维单原子链色散关系形式上相同

当 $q \to 0$ 时，$\omega_- \to 0$ (最小值)

对 ω_+ 支色散关系进行改写

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

长波近似下，$\dfrac{4Mm}{(M+m)^2}\sin^2(qa) << 1$ 成立

$$\Downarrow$$

对 $\left[1-\dfrac{4Mm}{(M+m)^2}\sin^2(qa)\right]^{1/2}$ 按 $(1-x)^{1/2}$ 进行级数展开

↓

$$\omega_+^2=\frac{2\beta}{Mm}(M+m)\left\{1-\frac{Mm}{(M+m)^2}\sin^2(qa)\right\}$$

- 当 $q \to 0$，光学支的频率具有极大值:

$$\omega_{+\max} = \left(\frac{2\beta}{\mu}\right)^{1/2}$$

$\mu = \dfrac{Mm}{M+m}$ 为两种原子的折合质量

小结

当 $q \to 0$ 时， $\omega_{-} \to 0$ ，为最小值，声学支近似于连续介质弹性波；而光学支 $\omega_{+} \to \omega_{+\max}$ ，正好可与红外光波耦合。

2、相邻原子的振动方向

一维双原子链的基本方程:

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

(1)、声学支:

对于声学支，由方程

$$(2\beta - m\omega^2)A - 2\beta\cos(qa)B = 0$$ 变换得:

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

对于声学支，由于 $(\omega_-)_{\max} = (\frac{2\beta}{M})^{1/2}$ ，

所以 $\omega_-^2 \le \frac{2\beta}{M}$

$$\Downarrow$$

$$2\beta - M\omega_-^2 \ge 0$$

$$2\beta - M\omega_{-}^{2} \geq 0$$

而 $M > m \longrightarrow M\omega_{-}^{2} > m\omega_{-}^{2}$

$$\Big\downarrow$$

$$2\beta - m\omega_{-}^{2} \geq 0$$

$$2\beta - m\omega_-^2 \geq 0$$

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

$$\left(\frac{B}{A}\right)_- > 0$$

$\boxed{\text{相邻原子同向振动}}$

在极端情况下，

(a)、当 $q \to 0$ 时，$\omega_{-}^{2} \to 0$，则 $\left(\frac{B}{A}\right)_{-} \to 1$

相邻原子以同样的振幅同向振动，可将两相邻原子的振动看成是整个原胞质心运动。

(b)、当 $q \to \pm \dfrac{\pi}{2a}$ 时 (布里渊区边界),

$$\left(\frac{B}{A}\right)_{-} = \frac{2\beta - m\omega^{2}}{2\beta\cos(qa)}$$ 的分母为零，而分子不等于零，因此:

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

A类原子静止

B类原子运动

(2)、光学支

对于光学支，由方程

$$-2\beta\cos(qa)A+(2\beta-M\omega^2)B=0$$

变换得 $$\left(\frac{A}{B}\right)_+=\frac{2\beta-M\omega_+^2}{2\beta\cos(qa)}$$

对于光学支，由于 $(\omega_{+})_{\min}=(\frac{2\beta}{m})^{1/2}$，

所以 $\omega_{+}^{2}\geq\frac{2\beta}{m}$

$$\Downarrow$$

$$\frac{2\beta}{m}-\omega_{+}^{2}\leq 0$$

$$\frac{2\beta}{m}-\omega_+^2\le 0 \longrightarrow \text{而 } M>m$$

$$\downarrow$$

$$\frac{2\beta}{M}-\omega_+^2\le 0$$

$$\downarrow$$

$$2\beta-M\omega_+^2\le 0$$

q 的取值范围为 $\left(-\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a}\right)$

$$\downarrow$$

$$2\beta\cos(qa) \quad + \quad 2\beta - M\omega_+^2 \le 0$$

$$\downarrow$$

$$\left(\frac{A}{B}\right)_+ = \frac{2\beta - M\omega_+^2}{2\beta\cos(qa)} < 0$$

相邻原子反向振动

极端情况下，

(a)、当 $q \to 0$ ，则 $\omega_+ = \sqrt{2\beta / \mu}$

$$\left(\frac{A}{B}\right)_+ = -\frac{M}{m} \longrightarrow mA + MB = 0$$

原胞质心不动，原子相对于质心作运动

(b)、当 $q \to \pm\dfrac{\pi}{2a}$ **时，** $\left(\dfrac{A}{B}\right)_{+} \to \infty$ **，**

B类原子静止，A类原子运动。