一、填空

1、由 N 个 Na 离子和 N 个 Cl 离子组成的 NaCl 晶体，

其初基原胞内的原子数为 2 ，初基原胞内的自由度数为 6 ，

波矢的取值个数为 N ，

格波的支数为 6 ，声学波支数为 3 ，光学波支数为 3 。

2、由 N 个 Cs 离子和 N 个 Cl 离子组成的 CsCl 晶体，

其初基原胞内的原子数为 2 ，初基原胞内的自由度数为 6 ，

波矢的取值个数为 N ，

格波的支数为 6 ，声学波支数为 3 ，光学波支数为 3 。

3、对于金刚石晶体，其初基原胞内的原子数为_2_，

初基原胞内的自由度数为_6_，

格波的支数为_6_，声学波支数为_3_，光学波支数为_3_。

4、对于立方 ZnS 晶体，其初基原胞内的原子数为_2_，

初基原胞内的自由度数为_6_，

格波的支数为_6_，声学波支数为_3_，光学波支数为_3_。

5、对于 Si 晶体，其初基原胞内的原子数为 2 ，

初基原胞内的自由度数为 6 ，

格波的支数为 6 ，声学波支数为 3 ，光学波支数为 3 。

6、对于 $BaTiO_3$ 晶体，其初基原胞内的原子数为 5 ，

初基原胞内的自由度数为 15 ，

格波的支数为 15 ，声学波支数为 3 ，光学波支数为 12 。

二、简述

1、格波的概念

晶格振动在晶格中的传播称为格波；

注：

不是晶体振动，而是晶格振动，晶体振动可以是整个晶体在外场作用下的整体运动（如：手摇动）。

2、格波与连续介质弹性波的异同

见课件

3、波矢 $\vec{q}$ 和倒格矢 $\vec{K}_h$ 同属倒空间，它们的关系如何？

晶格振动量子化是指 $\vec{q}$ 不连续吗？

波矢 $\vec{q}$

方向：波的传播方向；　　　　模量：$|\vec{q}| = \frac{2\pi}{\lambda}$

倒格矢 $\vec{K}_h$

方向：晶面$(\mathbf{h_1 h_2 h_3})$的法线方向；　　　　模量：$\vec{K}_h = \frac{2\pi}{d_{h_1 h_2 h_3}}$

波矢 $\vec{q}$ 与倒格矢 $\vec{K}_h$ 具有相同的量纲，m^{-1}

晶格振动量子化是指晶格振动的能量是量子化的，

即：$E=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$

波矢$|\bar{q}|$取值的不连续不是晶格振动量子化的结果，

而是周期性边界条件所导

致的必然结果。

4、在描述格波时，波矢$\vec{q}$与$\vec{q}+\vec{K}_h$是等价的，其根源是什么？

$\vec{q}$与$\vec{q}+\vec{K}_h$等价起源于布里渊区的性质，即：

高阶布里渊区可以通过平移一个或多个倒格

矢$\vec{K}_h$到第一布里渊区的相应位置。

5、声子的概念是怎样引入的？声子是否为真实粒子？

在热平衡的晶体中，说声子从一处跑到另一处有无意义？

既然，晶格振动是量子化的，因此，

引入声子来表示晶格振动的能量量子。

声子------晶格振动的能量量子。

声子不是真实粒子，它不是客观实在。

在热平衡的晶体中，说声子从一处跑到另一处无意义。

因为，声子数不守恒，声子不断地产生和湮灭，

在热平衡态下，达到一种动态平衡。

6、声子可以有多少种？为什么说声子是玻色子？

只有一种声子，即自旋为 0 的声子。

声子的自旋为 0，所以，声子为玻色子。

7．声子的性质

（1）声子数目越多说明晶格振动越强；

（2）2 声子是玻色子，自旋为 0 服从波色分布；

（3）声子数目不守恒，当与其他粒子碰撞时
可以产生也可以消失

（4）声子不是真是粒子不带任何物理动量，
而是准粒子，准动量为 $\hbar\vec{q}$

8、声子碰撞时的准动量守恒是什么意思？

为什么不同于普通粒子碰撞时的动量守恒定律？

声子不是客观存在，是赝粒子，它本身不携带物理动量，

因此，就不可能有动量守恒的问题。

声子作为晶格振动的能量量子，与其他能量量子相同，

$\hbar\bar{q}$ 具有动量量纲，因此，称 $\hbar\bar{q}$ 为晶格振动的准动量。

9、用测不准关系简要说明晶格振动是量子化的。

见课件

10、简要说明经典比热理论在处理固体比热时遇到的困难。

按经典的能量均分定理，原子的每个自由度的平均能量为$k_B T$，

若固体总自由度为 **3N**，总能量为$3Nk_B T$，热容为$3Nk_B$，

与温度无关，称为杜隆珀替定律，

高温下与实验结果相符，但低温时，实验值与此定律相差甚远，

经典理论不再实用。

11、简要说明晶格振动比热的量子力学处理方法。

见课件

12、晶格振动 **Einstein** 模型和 **Debye** 模型基本假设、成功与不足之处

晶体热容的爱因斯坦模型假设：晶体中所有原子都以相同的频率振动，即：所有声子频率都相同，为 ω_E。

根据爱因斯坦模型，晶体的高温比热规律与实验符合较好，而晶体的低温比热与实验符合较差，实验表明：晶体的低温比热按T^3规律趋于 0，而根据爱因斯坦模型得到的规律为：晶体的低温比热按指数规律趋于 0。

德拜模型假设：晶格振动的格波可以处理成连续介质弹性波。根据德拜模型，不仅晶体的高温比热规律与实验符合较好，而且，晶体的低温比热也与实验符合较好，但忽略了高频光学声子对比热的贡献。

三、综合

1、今有一维复式格子，由 **A**、**B** 两种原子组成，假设：这两种原子的质量相等，均为 **m**，**A** 原子与其最近邻 **B** 原子之间的距离为 **b**，两个最近邻 **A** 原子之间的距离为 **a**，该原子链的力常数分别为 **β** 和 **2β** 交替排列，计算该原子链振动的色散关系。

解：

此题实际是一双原子分子链，由题可知，一个分子内

A、B 两原子力常数 $\beta_1=\beta$，间距为 b；相邻分子间两原子

的力常数为 $\beta_2=2\beta_1=2\beta$；晶格常数为 a；第 **n-1**、**n**、**n+1**、

n+2 个原子的位移分别为 $u_{n-1},u_n,u_{n+1},u_{n+2}$，

第 **n-1** 与第 **n+1** 个原子属于同一原子，

第 **n** 与第 **n+2** 个原子属于同一个原子，

于是第 **n** 和第 **n+1** 个原子受的力分别为：

$$f_n = \beta_2(u_{n+1} - u_n) - \beta_1(u_n - u_{n-1})$$

$$f_{n+1} = \beta_1(u_{n+2} - u_{n+1}) - \beta_2(u_{n+1} - u_n).$$

其运动方程分别为

$$m\frac{d^2u_n}{dt^2}=\beta_2(u_{n+1}-u_n)-\beta_1(u_n-u_{n-1})$$

$$m\frac{d^2u_{n+1}}{dt^2}=\beta_1(u_{n+2}-u_{n+1})-\beta_2(u_{n+1}-u_n)$$

设格波的解分别为

$$u_n = Ae^{i\left[q(\frac{n}{2})a-\varpi t\right]} = Ae^{i\left[\frac{1}{2}qna-\varpi t\right]}$$

$$u_{n+1} = B'Ae^{i\left[q(\frac{n}{2})a+qb-\varpi t\right]} = Be^{i\left[\frac{1}{2}qna-\varpi t\right]}.$$

代入运动方程，得

$$-m\omega^2 A = \beta_2(B-A) - \beta_1(A - Be^{-iqa})$$

$$-m\omega^2 B = \beta_1(Ae^{iqa} - B) - \beta_2(B-A)$$

整理得

$$(\beta_1 + \beta_2 - m\omega^2)A - (\beta_2 \beta e^{-iqa})B = 0$$

$$-(\beta_2 \beta e^{iqa})A + (\beta_1 + \beta_2 - m\omega^2)B = 0$$

因 ***A*** 和 ***B*** 不可能同时为零，则其系数行列式必定为零，即：

$$\begin{vmatrix} (\beta_1+\beta_2-m\omega^2) & -(\beta_2+\beta_1 e^{-iqa}) \\ -(\beta_2+\beta_1 e^{iqa}) & (\beta_1+\beta_2-m\omega^2) \end{vmatrix} = 0 .$$

解上式可得

$$\omega^2 = \frac{(\beta_1+\beta_2)}{2m^2}\left\{2m \pm \left[4m^2 - \frac{16m^2\beta_1\beta_2}{(\beta_1+\beta_2)^2}\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)\right]^{1/2}\right\}$$

$$= \frac{(\beta_1+\beta_2)}{m}\left\{1 \pm \left[1 - \frac{4\beta_1\beta_2}{(\beta_1+\beta_2)^2}\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)\right]^{1/2}\right\}$$

由上式知，存在两种独立的格波，声学格波的色散关系为

$$\omega_A^2 = \frac{(\beta_1+\beta_2)}{m}\left\{1-\left[1-\frac{4\beta_1\beta_2}{(\beta_1+\beta_2)^2}\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)\right]^{1/2}\right\}$$

$$= \frac{3\beta}{m}\left\{1-\left[1-\frac{8}{9}\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)\right]^{1/2}\right\}$$

，

光学格波的色散关系为:

$$\omega_0^2 = \frac{3\beta}{m}\left\{1-\left[1-\frac{8}{9}\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)\right]^{1/2}\right\}.$$

2、已知一维单原子链晶格振动的色散关系为

$$\omega=\omega_m\left|\sin\left(\frac{qa}{2}\right)\right|，\text{其中，}\omega_m=\left(\frac{4\beta}{m}\right)^{1/2}，$$

求其格波态密度函数，并写出其比热的表达式，

并证明：在极低温度下一维单式晶格的比热正比于 **T**。

由一维简单晶格色散曲线对称性可知，$d\omega$ 区间对应两个同样大小的波矢区间 dq，

$\frac{2\pi}{a}$ 区间对应有 $\frac{L}{a}$ 个振动模式，

单位波矢区间对应有 $\frac{L}{2\pi}$ 个振动模式，

$d\omega$ 范围则包含 $\frac{2dqL}{2\pi}=\frac{dqL}{\pi}$ 个振动模式

单位频率区间包含的模式数目定义为模式密度（态密度）

根据这一定义可得模式密度为 $\dfrac{L}{\pi}\dfrac{dq}{d\omega}$.

由色散关系得

$$d\omega = a\left(\frac{\beta}{m}\right)^{1/2}\cos\left(\frac{qa}{2}\right)dq \,.$$

格波态密度

$$D(\omega)=\frac{L}{\pi a}\left(\frac{m}{\beta}\right)^{1/2}\frac{1}{\sqrt{1-\sin^2(\frac{qa}{2})}}$$

$$=\frac{2L}{a\pi\sqrt{\omega^2{}_m-\omega^2}}$$

又： $$E=\int_0^{\varpi_m}\frac{\hbar\omega D(\omega)d\omega}{e^{\hbar\varpi_A/k_BT}-1}$$

$$C_V=\frac{2L}{\pi a}\times k_B\int_0^{\omega_m}\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right)^2\frac{e^{\hbar\omega/k_BT}}{\left[e^{\hbar\omega/k_BT}-1\right]^2}\left(\omega_m^2-\omega^2\right)^{-\frac{1}{2}}d\omega$$

令： $$x=\frac{\hbar\omega}{k_BT},\quad dx=\frac{\hbar}{k_BT}d\omega$$

$$\hbar\omega_m = k_B\theta_D \qquad \frac{\omega}{\omega_m} = \frac{T}{\theta_D}x$$

当 $\omega = \omega_m$ 时, $x_m = \dfrac{\theta_D}{T}$

$$C_V = \frac{2L}{\pi a} \times k_B \int_0^{\theta_D/T} x^2 \frac{e^x}{\left[e^x - 1\right]^2} \frac{1}{\left[1 - \left(\frac{\omega}{\omega_m}\right)^2\right]^{1/2}} \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega_m}\right) dx$$

$$= \frac{2L}{\pi a} \times k_B \int_0^{\theta_D/T} x^2 \frac{e^x}{\left[e^x - 1\right]^2} \frac{1}{\left[1 - \left(\frac{T}{\theta_D} x\right)^2\right]^{1/2}} \left(\frac{T}{\theta_D}\right) dx$$

$$C_V = \frac{2L}{\pi a} \times k_B \int_0^{\theta_D/T} x^2 \frac{e^x}{\left[e^x - 1\right]^2} \frac{1}{\left[1 - \left(\frac{\omega}{\omega_m}\right)^2\right]^{1/2}} \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega_m}\right) dx$$

$$= \frac{2Lk_B}{\pi a} \times \frac{T}{\theta_D} \int_0^{\theta_D/T} x^2 \frac{e^x}{\left[e^x - 1\right]^2} \frac{1}{\left[1 - \left(\frac{T}{\theta_D} x\right)^2\right]^{1/2}} dx$$

$$= \frac{2Lk_B}{\pi a} \times \frac{T}{\theta_D} \int_0^{\theta_D/T} x^2 \frac{e^x}{\left[e^x - 1\right]^2} \frac{1}{\left[1 - \left(\frac{T}{\theta_D} x\right)^2\right]^{1/2}} dx$$

在极低温度下，$T << \theta_D$，积分上限趋于无穷大

$$C_V = \frac{2Lk_B}{\pi a} \frac{T}{\theta_D} \int_0^{\infty} x^2 \frac{e^x}{\left[e^x - 1\right]^2} dx$$

由于$\int_0^\infty x^2 \frac{e^x}{\left[e^x - 1\right]^2} dx$为定积分，

$$\int_0^\infty x^2 \frac{e^x}{\left[e^x - 1\right]^2} dx = const.$$

所以，$C_V \propto T$

3、用德拜模型，求一维单原子链的零点能。

Debye 模型： $\omega = v_p q$

对于一维单原子链，只有一支格波

$$\rho(\omega) = \frac{dZ}{d\omega} = \frac{dZ}{dq}\frac{dq}{d\omega}$$

$$\rho(\omega) = \frac{dZ}{d\omega} = \frac{dZ}{dq}\frac{dq}{d\omega}$$

$$= 2\frac{L}{2\pi}\frac{1}{v_p} = \frac{L}{\pi v_p}$$

由 $N=\int_0^{\omega_m}\rho(\omega)d\omega$ 求出：

$$\omega_m=\frac{N\pi v_p}{L}=\frac{\pi v_p}{a}$$

零点能:

$$\overline{E}_0 = \int_0^{\omega_m} \frac{1}{2} \hbar \omega \rho(\omega) d\omega$$

$$= \frac{L\hbar}{2\pi v_p} \int_0^{\omega_m} \omega d\omega = \frac{\hbar L}{4\pi v_p} \omega_m^2$$

$$= \frac{\hbar N \pi}{4a} v_p$$

4、采用 Debye 模型求二维晶体的晶格比热。

德拜模型考虑的格波是弹性波，波速为 v 的格波

的色散关系是 $\omega = vq$，

在二维波矢空间内，格波的等频线是一个个圆周，

在 $q \to (q + dq)$ 区间内波速为 v 的格波数目

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

式中 S 是二维晶格的总面积,由此可得波速

为 v 的格波的模式密度

$$D(\omega) = \frac{dz}{d\omega} = \frac{S\omega}{2\pi v^2}$$

考虑到二维介质有两支格波，一支纵波，一支横波，所以，格波总的模式密度（可以假设他们相同）

$$D(\omega)=\frac{S\omega}{\pi v_p^2},$$

式中 $\frac{2}{v_p^2}=\left(\frac{1}{v_L^2}+\frac{1}{v_T^2}\right)$，其中，$v_L$ 是纵波速度，

v_T 是横波速度，

格波的振动能

$$E = \int_0^{\varpi_m} \frac{S\hbar\omega^2 d\omega}{\pi v_p^2\left(e^{\hbar\omega/k_B T} - 1\right)}.$$

晶格的热容量:

$$C_V = \frac{S}{\pi v_p^2} \int_0^{\omega_m} k_B \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 \frac{e^{\hbar\omega/k_B T}\omega d\omega}{\left(e^{\hbar\omega/k_B T} - 1\right)^2}$$

积分上限 ω_m 由下式

$$\int_0^{\omega} D(\omega) d\omega = \int_0^{\omega_m} \frac{S\omega}{\pi v_p^2} d\omega = 2N$$

求出,由此得到： $\omega_m = \left(4\pi \frac{N}{S}\right)^{1/2} v_p$,

式中 N 为原子个数。

做变量变换 $x = \dfrac{\hbar\omega}{k_B T}$，

晶格热容量：

$$C_V = \frac{Sk_B}{\pi v_p^2}\left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^2 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^2 e^x dx}{(e^x - 1)^2}$$

其中，$\Theta_D = \dfrac{\hbar\omega_m}{k_B}$.

5、采用 Einstein 模型求二维晶体的晶格比热。

爱因斯坦模型是指对于有 N 个原子构成的晶体，

晶体中所有原子都以相同的频率 ω_E 振动。

在二维波矢空间，认为 **2N** 个谐振子是全同的，则：

$$E=\frac{2N\hbar\omega_E}{e^{\hbar\omega_E/k_BT}-1}$$

$$C_V = \frac{dE}{dT} = 2Nk_B\left(\frac{\hbar\varpi_E}{k_B T}\right)^2 \frac{e^{\hbar\omega_E / k_B T}}{\left(e^{\hbar\omega_E / k_B T} - 1\right)^2}$$

引入爱因斯坦温度 $\Theta_E = \dfrac{\hbar\omega_E}{k_B}$

$$C_V == 2Nk_B\left(\frac{\Theta_E}{T}\right)^2 \frac{e^{\Theta_E / T}}{\left(e^{\Theta_E / T} - 1\right)^2}$$