# 第四节　晶格振动量子化，声子

从概念出发介绍两个问题:

(1)、晶格振动为什么要用量子力学来处理?

(2)、声子的性质

## 1、晶格振动是量子化的

根据量子力学，判定一个系统是经典系统还是量子系统的一个重要判据为**测不准关系。**

$$\Delta E \cdot \Delta t \sim \hbar$$

系统的粒子能量涨落与具有该能量的

时间涨落的乘积是否与 $\hbar$ 相当。

对于晶格振动，室温下获得的热激发平均能量为 $k_B T \approx 0.026eV$；晶格振动最高频率所对应的周期约为 $10^{-13}s$，

因此，对于晶格振动:

$$\Delta E = 0.026eV \qquad \Delta t \sim 10^{-13}s$$

$$\Delta E \cdot \Delta t \sim 2.6 \times 10^{-15} eV \cdot s$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \sim 1 \times 10^{-15} eV \cdot s$$

对于晶格振动，$\Delta E \cdot \Delta t$ 与 $\hbar$ 相当，

必须用量子力学处理。

## 2、声子

引入声子表征晶体中每个独立简谐振动的能量量子。

**声子 —— 晶格振动的能量量子。**

对于频率为 $\omega_q$ 的晶格振动，其声子的能量为 $\hbar\omega_q$

晶格振动的能量用声子表示：

$$E=\sum_q (n_q+\frac{1}{2})\hbar\omega_q$$

$n_q$ 表示声子数，$\frac{1}{2}\hbar\omega_q$ 为声子的零点能

## 3、声子的性质

(1)、声子数目越多，表示这种模式晶格振动越强烈。

(2)、声子是玻色子，自旋为0，服从Bose分布。

$$\bar{n}_q = \frac{1}{e^{\hbar\omega_q / k_B T} - 1}$$

对某一固定振动模式 $\omega_q$ ，$\bar{n}_q$ 只与温度有关。

(3)、声子数不守恒。声子与其他粒子碰撞时，声子既可以产生，也可以湮灭。

(4)、声子不是一种真实粒子，不携带任何物理动量。声子是一种赝粒子，其准动量为 $\hbar\vec{q}$

以一维单原子链为例:

根据动量的定义，声子的动量为:

$$p = m\sum_n \dot{x}_n$$

将 $x_n = Ae^{i(\omega t - qna)}$ 代入,得:

$$p = i\omega m A e^{i\omega t}\sum_{n=1}^{N} e^{-iqna}$$

而波矢 $q = \left(\frac{2\pi}{Na}\right) l$ （$l$ 为整数）

$$\Downarrow$$

$$p = i\omega m A e^{i\omega t}\sum_{n=1}^{N} e^{-i\frac{2\pi n}{N} l}$$

$$\sum_{n=1}^{N} e^{-i\frac{2\pi n}{N}l} = \frac{1-e^{-i2\pi l}}{e^{i\frac{2\pi l}{N}}-1} \equiv 0$$

$$p = i\omega m A e^{i\omega t}\sum_{n=1}^{N} e^{-i\frac{2\pi n}{N}l} \equiv 0$$

(5)、当声子与其他粒子发生弹性碰撞，

遵守能量守恒和准动量守恒。

# 课堂练习

1、已知一维单原子链色散关系为 $\omega=\omega_m\left|\sin(\frac{qa}{2})\right|$

$\omega_m=2\sqrt{\frac{\beta}{m}}$ ，求晶格振动的频率分布函数

2、已知某一维原子晶格的色散关系为 $\omega=vq^2$

求晶格振动的的频率分布函数

3、已知某二维晶格的色散关系为 $\omega=vq^2$

求晶格振动的的频率分布函数

4、已知某三维晶格的色散关系为 $\omega=vq^2$

求晶格振动的的频率分布函数

# 求 解

1、已知一维单原子晶格的色散关系为:

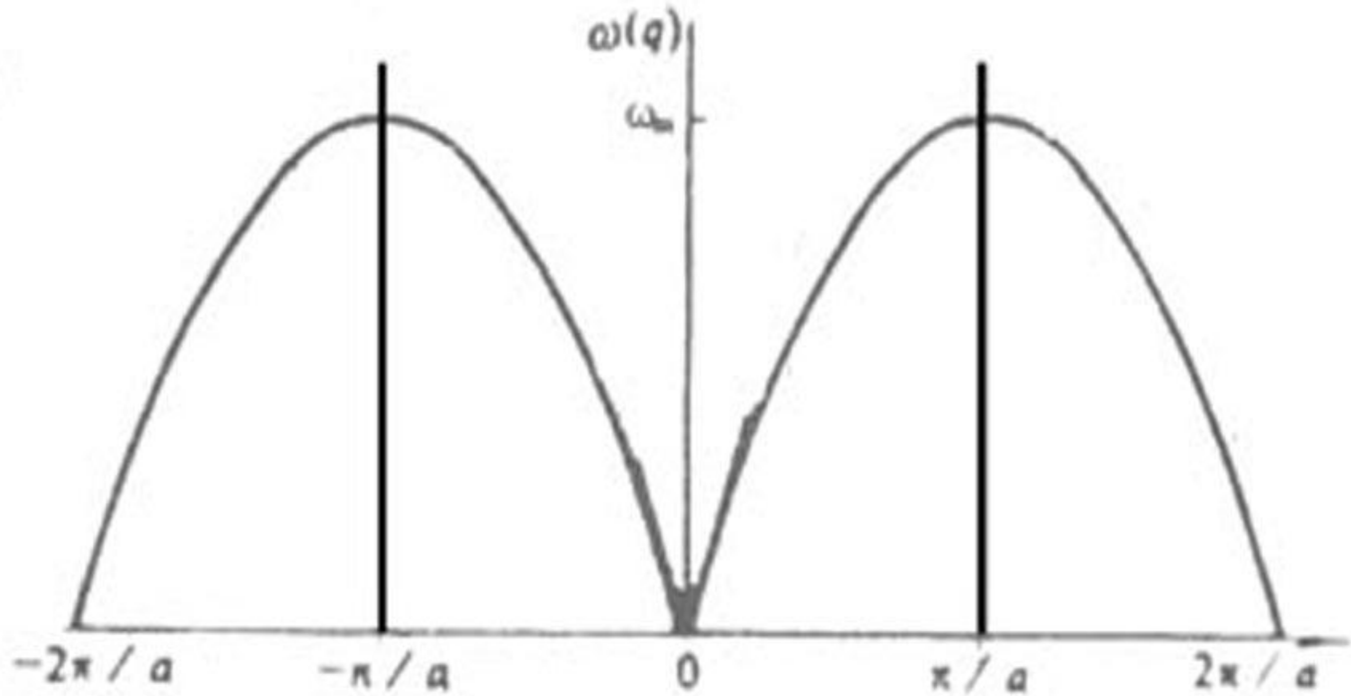
$$\omega = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}\left|\sin(\frac{qa}{2})\right| = \omega_m\left|\sin(\frac{qa}{2})\right|$$

$$\omega_m = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}$$

求晶格振动的频率分布函数.

# 一维

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



取q大于零的半支 $\omega_+ = \omega_m \sin(\frac{qa}{2})$

$$\frac{dq}{d\omega_+} = \left\{ \frac{a}{2} \left[ \omega_m^2 - \omega_m^2 \sin^2(\frac{qa}{2}) \right]^{\frac{1}{2}} \right\}^{-1} = \frac{2}{a} \left[ \omega_m^2 - \omega^2 \right]^{-\frac{1}{2}}$$

$$\rho(\omega) = \frac{2N}{\pi} \left[ \frac{4\beta}{m} - \omega^2 \right]^{-1/2}$$

2、已知某一维原子晶格的色散关系为 $\omega = vq^2$

求该原子链的频率分布函数

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

$$\Downarrow$$

$$\rho(\omega) = \frac{L}{\pi} \frac{dq}{d\omega} = \frac{L}{2\pi\sqrt{v}} \omega^{-1/2}$$

3、已知某二维晶格的色散关系为 $\omega = vq^2$ –

求该二维晶格的频率分布函数

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

$$\Downarrow$$

$$\rho_{(\omega)} = \frac{S}{2\pi} q \frac{dq}{d\omega} = \frac{S}{4\pi v}$$

4、已知某三维晶格的色散关系为 $\omega = vq^2$

求该三维晶格的频率分布函数

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

$$\rho_{(\omega)} = \frac{V_C}{2\pi^2} q^2 \frac{dq}{d\omega} = \frac{V_C}{4\pi^2 v^{3/2}} \omega^{1/2}$$