固体物理作业

2022 年 4 月 24 日

习题 1

对于 N 个原胞组成的一维双原子链 (其中原子等间距排列，相邻两个原子的间距为 a)，试证明：当 M=m 时，其 2N 个格波解与一维单原子链一一对应.

证：

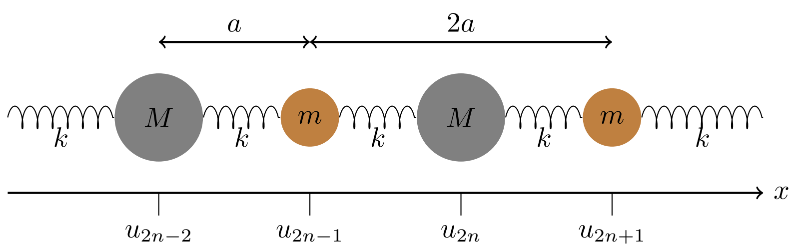

图 1: 1 维双原子链

考虑简谐近似，设谐振子的劲度系数为 k，设一个原子质量为 M，另一原子质量为 m，相邻原子间距 a，相邻同质量原子的间距为 $2a$，因此方程写为：

$$\begin{cases} M\ddot{u}_{2n} = k(u_{2n+1} - u_{2n}) - k(u_{2n} - u_{2n-1}) \\ m\ddot{u}_{2n-1} = k(u_{2n} - u_{2n-1}) - k(u_{2n-1} - u_{2n-2}) \end{cases}$$

由于相邻的同类原子间距为 $2a$，考虑行波解：

$$u_{2n} = Ae^{i(qn2a-\omega t)}, \quad u_{2n-1} = Be^{i(qn2a-\omega t)}$$

Footnotetext without footnote mark

代入方程后，化简得：

$$\begin{cases} (M\omega^2 - 2k)A + k(e^{iq2a} + 1)B = 0 \\ k(e^{-iq2a} + 1)A + (m\omega^2 - 2k)B = 0 \end{cases}$$

要求 A,B 有非零解，即要求系数行列式为 0，解方程：

$$\begin{vmatrix} M\omega^2 - 2k & k(e^{iq2a} + 1) \\ k(e^{-iq2a} + 1) & m\omega^2 - 2k \end{vmatrix} = 0$$

解得两支色散关系为：

$$\begin{cases} \omega_A^2 = \dfrac{k}{Mm}\left[(M+m) - \sqrt{(M+m)^2 - 4Mm\sin^2 qa}\right] \\ \omega_O^2 = \dfrac{k}{Mm}\left[(M+m) + \sqrt{(M+m)^2 - 4Mm\sin^2 qa}\right] \end{cases}$$

考虑当 $M = m$ 的情形，上式简化为：

$$\begin{cases} \omega_A^2 = \dfrac{2k}{m}(1 - \cos qa) \\ \omega_O^2 = \dfrac{2k}{m}(1 + \cos qa) \end{cases}$$

可以看到，由于 $-1 \le \cos qa \le 1$，因此光学支和声学支在这里的取值实际上是一致的，都符合一维晶格振动值，但相位恰好相差 π. 这种相位差产生的原因是布里渊区折叠，即在取晶格常数时计算取值比实际晶格常数大一倍，于是布里渊区的线度缩小一倍，光学支和声学支发生一个 π 的相位差.

习题 2

考虑一个全同的原子组成的平面正方格子，用 $u_{l,m}$ 表示第 l 行第 m 列的原子在垂直于与晶格平面方向的位移，每个原子质量为 M，最近邻原子之间的距离为 a，只考虑最近原子之间的相互作用，最近邻原子在垂直于晶格平面方向上的力常数为 β，

(1). 试求原子在垂直于晶体平面方向的振动方程.

(2). 设该振动方程的行波解的形式为：

$$u_{l,m} = u_0 e^{i(k_x la + k_y ma - \omega t)}$$

试求出其色散关系.

(3). 证明独立的行波解存在的 k 空间区域是一个边长为 $\frac{2\pi}{a}$ 的正方形，画出 $k=k_x$，$k_y=0$，以及 $k=k_x=k_y$ 时的色散关系.

(4). 对于 $k_x a \ll 1$，$k_y a \ll 1$，求出长波近似下的色散关系.

解：

(1). 考虑第 (l,m) 个原子的位移为 $u_{l,m}$，则振动方程是：

$$M\ddot{u}_{l,m} = \beta(u_{l+1,m} + u_{l-1,m} + u_{l,m+1} + u_{l,m-1} - 4u_{l,m})$$

(2). 将行波解 $u_{l,m} = u_0 e^{i(k_x la + k_y ma - \omega t)}$ 代入振动方程中，考虑：

$$u_{l+1,m} = e^{ik_x a}u_{l,m}, \quad u_{l-1,m} = e^{-ik_x a}u_{l,m}$$
$$u_{l,m+1} = e^{ik_y a}u_{l,m}, \quad u_{l,m-1} = e^{-ik_y a}u_{l,m}$$

代入方程求解，有色散关系：

$$\omega^2 = \frac{2\beta(2 - \cos k_x a - \cos k_y a)}{M}$$

(3). 将波矢数限制在一个周期内 $\omega\left(\vec{q} + \frac{2\pi}{a}(\vec{i} + \vec{j})\right) = \omega(\vec{q})$ 容易得到：

$$-\frac{\pi}{a} \le k_x \le \frac{\pi}{a}, \quad -\frac{\pi}{a} \le k_y \le \frac{\pi}{a}$$

当 $k=k_x$，$k_y=0$ 时，色散关系：$\omega^2 = \frac{4\beta}{M}\sin^2\frac{ka}{2}$，图像为：

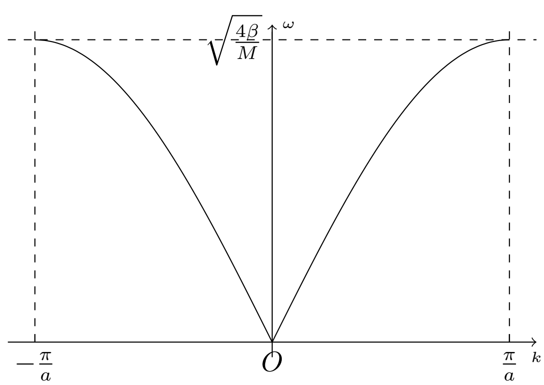

图 2: $k_x = k$，$k_y = 0$ 时色散关系图像

当 $k=k_x=k_y$ 时，色散关系：$\omega^2 = \frac{8\beta}{M}\sin^2\frac{ka}{2}$，图像为：

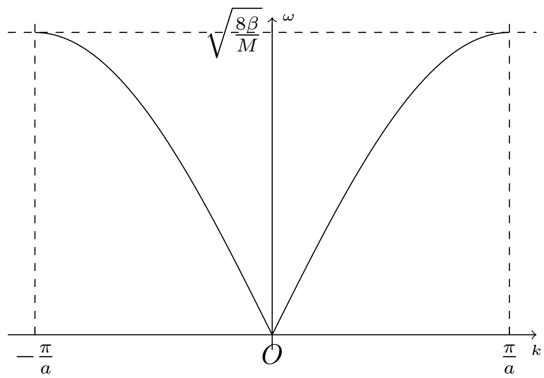

图 3: $k_x = k_y = k$ 时色散关系图像

(4). 对于 $k_x a \ll 1$, $k_y a \ll 1$，小量展开保留到二阶项：

$$\omega^2 \approx \frac{2\beta}{M}\left[2-\left(1-\frac{(k_x a)^2}{2}\right)-\left(1-\frac{(k_y a)^2}{2}\right)\right]=\frac{\beta}{M}\left[(k_x a)^2+(k_y a)^2\right]$$

习题 3

试从黄昆方程出发证明 LST 关系，即：$\frac{\omega_{LO}^2}{\omega_{TO}^2}=\frac{\varepsilon(0)}{\varepsilon(\infty)}$.

证：

考虑到 $\overrightarrow{W}$, $\overrightarrow{E}$, $\overrightarrow{P}$ 写成纵波和横波的形式.

$$\overrightarrow{W}=\overrightarrow{W_L}+\overrightarrow{W_T}$$

$$\overrightarrow{P}=\overrightarrow{P_L}+\overrightarrow{P_T}$$

$$\overrightarrow{E}=\overrightarrow{E_L}+\overrightarrow{E_T}$$

对于纵波，其振动方向平行于波矢方向，因此纵波分量的旋度为 0，即：

$$\nabla\times\overrightarrow{W_L}=\nabla\times\overrightarrow{P_L}=\nabla\times\overrightarrow{E_L}=0$$

对于横波，其振动方向垂直于波矢方向，因此横波分量的散度为 0，即：

$$\nabla\cdot\overrightarrow{W_T}=\nabla\cdot\overrightarrow{P_T}=\nabla\cdot\overrightarrow{E_T}=0$$

带入黄昆方程，写成分量形式有：

$$\begin{cases}\ddot{\overrightarrow{W_T}} = b_{11}\overrightarrow{W_T} + b_{12}\overrightarrow{E_T} \\ \ddot{\overrightarrow{W_L}} = b_{11}\overrightarrow{W_L} + b_{12}\overrightarrow{E_L}\end{cases}$$

对于横波，考虑 Maxwell 方程组，在无外加磁场的情况下，即：$\overrightarrow{B} = 0$，于是有 $\nabla \times \overrightarrow{E} = 0$，有：

$$\nabla \times \overrightarrow{E} = \nabla \times (\overrightarrow{E_T} + \overrightarrow{E_L}) = \nabla \times \overrightarrow{E_T} = 0$$

又因为：$\nabla \cdot \overrightarrow{E_T} = 0$，因此 $\overrightarrow{E_T}$ 是一个常矢量. $\because \omega_0^2 = -b_{11}$，$\therefore \omega_{TO} = \omega_0$

对于纵波，考虑 Maxwell 方程组，由于无自由电荷密度，故 $\nabla \cdot \overrightarrow{D} = 0$，于是：

$$\nabla \cdot \overrightarrow{D} = \nabla \cdot (\overrightarrow{E} + 4\pi \overrightarrow{P}) = \nabla \cdot (\overrightarrow{E_T} + \overrightarrow{E_L} + 4\pi \overrightarrow{P_T} + 4\pi \overrightarrow{P_L}) = \nabla \cdot (\overrightarrow{E_L} + 4\pi \overrightarrow{P_L}) = 0$$

$\because \nabla \times (\overrightarrow{E_L} + 4\pi\overrightarrow{P_L}) = 0$，因此 $\overrightarrow{E_L} + 4\pi\overrightarrow{P_L}$ 是一个常矢量. 考虑黄昆方程：

$$\overrightarrow{P_L} = b_{12}\overrightarrow{W_L} + b_{22}\overrightarrow{E_L}$$

有

$$\overrightarrow{E_L} = -\frac{4\pi b_{12}}{1 + 4\pi b_{22}}\overrightarrow{W_L}$$

联立黄昆方程第一项方程，得到：

$$\ddot{\overrightarrow{W_L}} = (b_{11} - \frac{4\pi b_{12}}{1 + 4\pi b_{22}})\overrightarrow{W_L} = -\omega_{LO}^2\overrightarrow{W_L}$$

考虑到：

$$\varepsilon(\omega) = 1 + 4\pi(b_{22} - \frac{b_{12}^2}{b_{11} + \omega^2})$$

取短波情况和长波情况，有：

$$\varepsilon(0) \approx 1 + 4\pi(b_{22} + \frac{b_{12}^2}{\omega_0^2}), \quad \varepsilon(\infty) \approx 1 + 4\pi b_{22}$$

联立有：

$$b_{12} = \sqrt{\frac{\varepsilon(0) - \varepsilon(\infty)}{4\pi}}\omega_{TO}, \quad b_{22} = \frac{\varepsilon(\infty) - 1}{4\pi}$$

于是有：

$$\frac{\omega_{LO}^2}{\omega_{TO}^2} = \frac{\varepsilon(0)}{\varepsilon(\infty)}$$

证毕.

习题 4

试求一维单原子晶格振动的模式密度 $D(\omega)$.

解:

一维原子链的波矢密度为：$\frac{L_c}{2\pi}\mathrm{d}q$
由于 $\omega(-q)=\omega(q)$，频率 $\mathrm{d}\omega$ 内的振动模式数：$\delta n=2\times\frac{L_c}{2\pi}\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}\omega}\mathrm{d}\omega$
考虑色散关系

$$\omega=2\left(\frac{\beta}{m}\right)^{\frac{1}{2}}\sin\left(\frac{qa}{2}\right)$$

故振动模式为：

$$D(\omega)=\frac{L_c}{\pi}\frac{1}{\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}q}}=\frac{2L_c}{a\pi\sqrt{\omega_0^2-\omega^2}}$$

习题 5

对于三维晶格的光学振动在长波极限下的色散关系为：

$$\omega(q)=\omega_0-Aq^2$$

证明：相应的晶格振动的模式密度为：

$$D(\omega)=\begin{cases}\dfrac{V_c}{4\pi^2}A^{-\frac{3}{2}}(\omega_0-\omega)^{-\frac{1}{2}}, & \omega<\omega_0\\ 0, & \omega>\omega_0\end{cases}$$

证:

考虑三维晶体中第 α 支格波的模式密度计算式：

$$D(\omega)=\frac{V_c}{(2\pi)^3}\int_{S_\alpha}\frac{\mathrm{d}S}{|\nabla_q\omega|}$$

S_α 是第 α 支格波的等频面，考虑光学支在长波近似的极限情况下，等频面是一个球面。考虑这里的色散关系：$\omega(q)=\omega_0-Aq^2$，于是有：$|\nabla_q\omega|=2Aq$，则：

$$D(\omega)=\frac{V_c}{(2\pi)^3}\frac{1}{2Aq}\int_{S_\alpha}\mathrm{d}S=\frac{V_c}{(2\pi)^3}\frac{4\pi q^2}{2Aq}=\frac{V_c(\omega_0-\omega)^{\frac{1}{2}}}{4A^{\frac{3}{2}}\pi^2}$$

其中 $q=\sqrt{\frac{\omega_0-\omega}{A}}$，于是上式成立的条件是 $\omega_0>\omega$.

对于 $\omega > \omega_0$ 的情况，发现 $q^2 = \frac{\omega_0 - \omega}{A}$，也就是这个色散关系下为复数波矢，这种情况下，近似不再适用，于是有：

$$D(\omega) = \begin{cases} \dfrac{V_c}{4\pi^2} A^{-\frac{3}{2}} (\omega_0 - \omega)^{-\frac{1}{2}}, & \omega < \omega_0 \\ 0, & \omega > \omega_0 \end{cases}$$

习题 6

有 N 个相同的原子组成的面积为 S 的二维晶格。试在德拜模型下计算：

(1). 晶格振动的比热，并论述在低温极限下比热与温度的关系.

(2). 平均声子数目，并论述在低温极限下平均声子数与温度的关系.

解：

(1). 二维格子的声子态密度为：$D(\omega) = \frac{S_c}{\pi v_p^2}\omega$ 其中：$\frac{1}{v_p^2} = \frac{1}{v_L^2} + \frac{1}{v_T^2}$ 考虑简单格子有 N 个原子，振动模式为 2N，且全为声学支振动. 则：

$$\int_{\omega_{min}}^{\omega_{max}} D(\omega)\mathrm{d}\omega = 2N$$

由于声学支色散关系：$\omega = vq$，长波近似下 $q \to 0$，故 $\omega_{min} \to 0$. 设 $\omega_{max} = \omega_D$，则根据积分式得到：

$$\omega_D = \sqrt{\frac{4\pi N}{S_c}} v_p$$

计算热容为：

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

作变量代换 $x = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$，有 $\Theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B}$，于是：

$$C_V = \frac{S_c k_B}{\pi v_p^2} \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^2 \int_0^{\frac{\Theta_D}{T}} \frac{e^x x^3}{(e^x - 1)^2} \mathrm{d}x$$

低温近似下，有 $\frac{\Theta_D}{T} \to \infty$，积分：

$$\int_0^{\infty} \frac{e^x x^3}{(e^x - 1)^2} \mathrm{d}x$$

可以计算出，结果由 ζ 函数表示，于是：

$$C_V = \frac{6\zeta(3)S_c k_B^3}{\pi v_p^2 \hbar^2}T^2$$

即：极低温度下热容与温度的二次方成正比.

(2). 平均声子数目：

$$\overline{N} = \frac{S_c}{\pi v_p^2}\int_0^{\omega_D}\frac{\omega \mathrm{d}\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}-1}$$

作变量代换 $x = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$，得：

$$\overline{N} = \frac{4NT^2}{\Theta_D}\int_0^{\frac{\Theta_D}{T}}\frac{x\mathrm{d}x}{e^x-1}$$

在极低温度下，有 $\frac{\Theta_D}{T} \to \infty$，于是：

$$\overline{N} = \frac{2\pi N T^2}{3\Theta}$$