

Chapter 3.1: 课后作业



考虑一维双原子链(1D diatomic chain):

- 1) 计算长波极限($q \rightarrow 0$)下声学支和光学支格波的色散关系 $\omega \sim q$;
- 2) 分析第一布里渊区边界处的振动特点;
- 3) 当 $m = M$ 时, 画出第一布里渊区内的色散关系 $\omega \sim q$, 并与一维单原子链(1D monoatomic chain) 的情形进行比较.

提交时间：3月19日之前

提交方式：手写（写明姓名学号）并拍照，通过本班课代表统一提交

Chapter 3.1: 课后作业-答案



考虑一维双原子链(1D diatomic chain):

1) 计算长波极限($q \rightarrow 0$)下声学支和光学支格波的色散关系 $\omega \sim q$;

$$\omega^2 = \begin{cases} \omega_+^2 = \frac{K}{\mu} \left[1 + \sqrt{1 - \frac{4\mu^2}{mM} \sin^2(aq)} \right] \xrightarrow{q \rightarrow 0} \omega_+^2 \rightarrow \frac{2K}{\mu} \\ \omega_-^2 = \frac{K}{\mu} \left[1 - \sqrt{1 - \frac{4\mu^2}{mM} \sin^2(aq)} \right] \xrightarrow{q \rightarrow 0} \omega_-^2 \rightarrow 0 \end{cases}$$

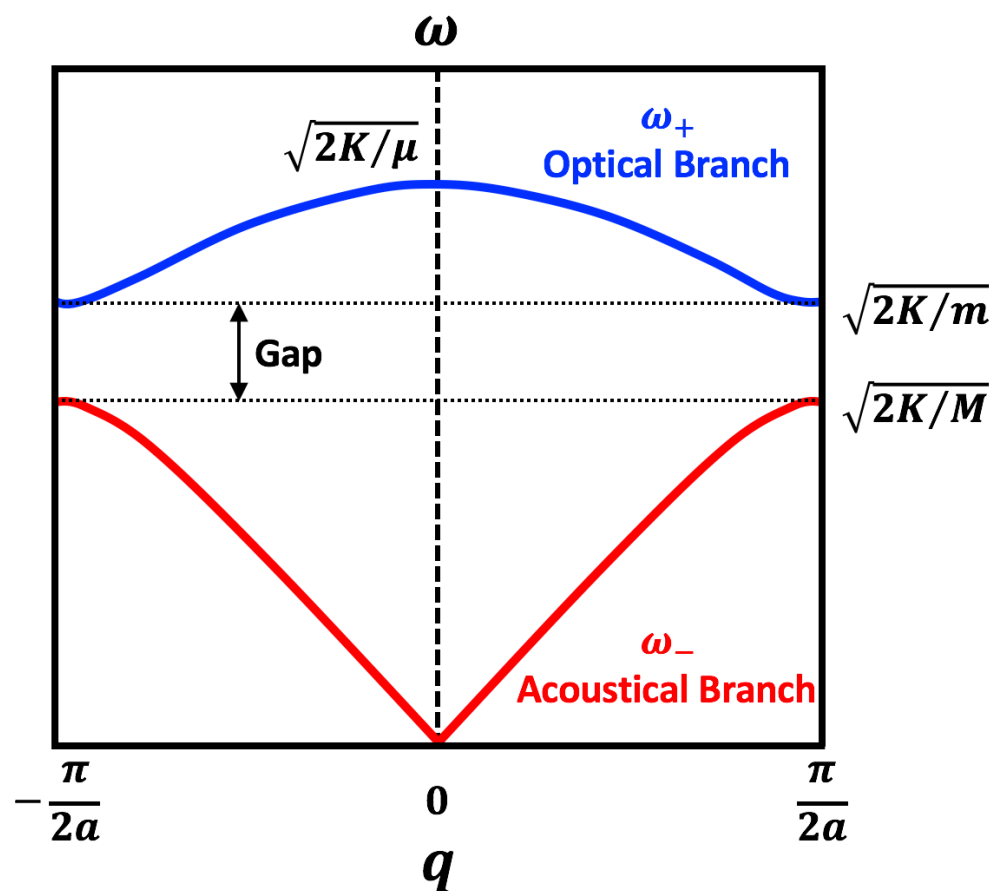
注意对比一维单原子链: $\omega = 2\sqrt{\frac{K}{m}} \left| \sin\left(\frac{1}{2}aq\right) \right| \xrightarrow{q \rightarrow 0} \omega \rightarrow a\sqrt{\frac{K}{m}}|q|$

Chapter 3.1: 课后作业-答案



考虑一维双原子链(1D diatomic chain):

1) 计算长波极限($q \rightarrow 0$)下声学支和光学支格波的色散关系 $\omega \sim q$;



Chapter 3.1: 课后作业-答案



考虑一维双原子链(1D diatomic chain):

2) 分析第一布里渊区边界处的振动特点;

$$q = \pm \frac{\pi}{2a} \longrightarrow \omega_+^2 \rightarrow \frac{2K}{m} \quad \omega_-^2 \rightarrow \frac{2K}{M}$$

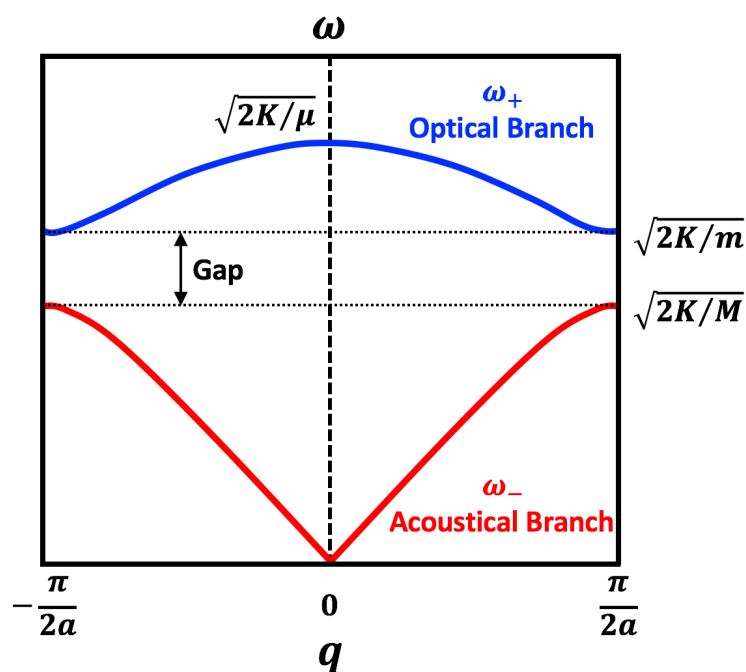
$$\left. \begin{aligned} (m\omega^2 - 2K)A + 2K \cos(aq) B &= 0 \\ 2K \cos(aq) A + (M\omega^2 - 2K)B &= 0 \end{aligned} \right\} \longrightarrow \left\{ \begin{aligned} A_+ \text{ 为任意值, } B_+ &= 0 \\ A_- = 0, B_- \text{ 为任意值} \end{aligned} \right.$$

Chapter 3.1: 课后作业-答案

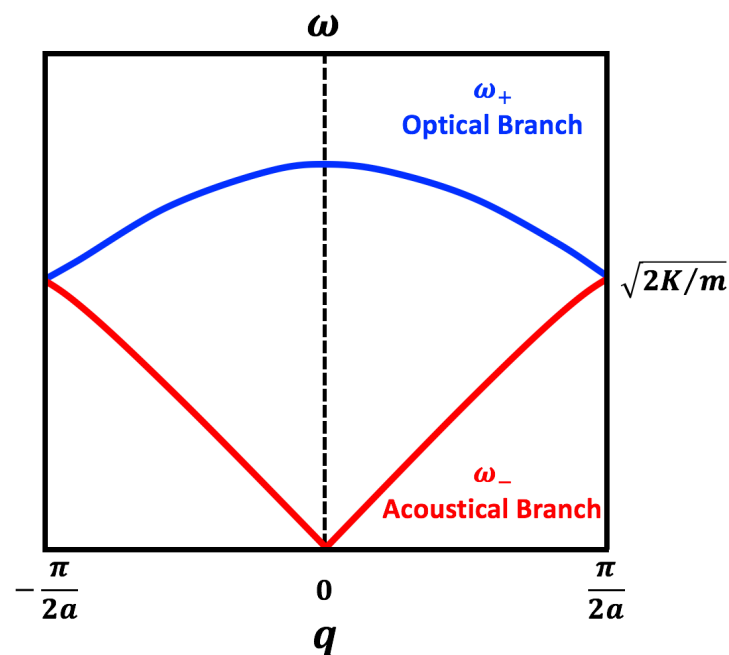


考虑一维双原子链(1D diatomic chain):

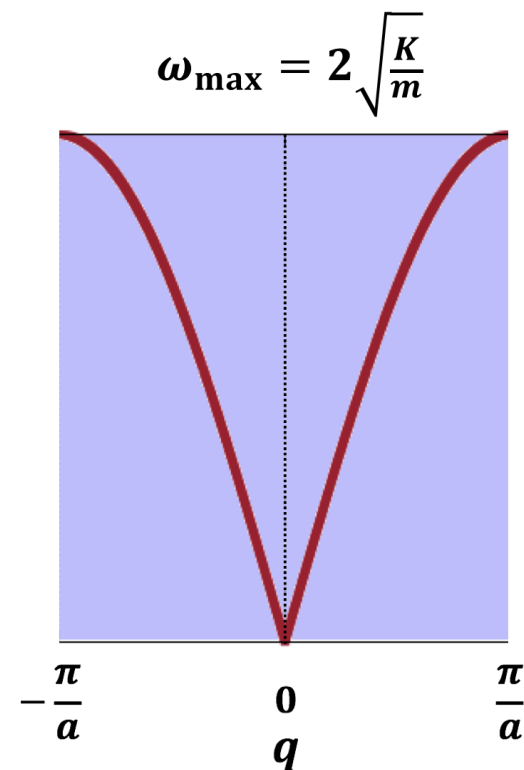
3) 当 $m = M$ 时, 画出第一布里渊区内的色散关系 $\omega \sim q$, 并与一维单原子链(1D monoatomic chain)的情形进行比较.



1D双原子链



1D双原子链 ($m = M$)



1D单原子链

Chapter 3.2: 课后作业



考虑一维量子谐振子 $\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2$,

$$\text{令 } \hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) \text{ 和 } \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right)$$

证明:

- 1) $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$
- 2) $[\hat{a}^+ \hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+$
- 3) $[\hat{a}^+ \hat{a}, \hat{a}] = -\hat{a}$
- 4) $\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right)$

提交时间：3月19日之前

提交方式：手写（写明姓名学号）并拍照，通过本班课代表统一提交

Chapter 3.2: 课后作业-答案



证明要点: 利用 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) \quad \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right)$$

证明: 1) $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{a} \hat{a}^+ - \hat{a}^+ \hat{a}$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) - \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right)$$

$$= -\frac{i}{\hbar} (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})$$

$$= 1$$

Chapter 3.2: 课后作业-答案



证明要点: 利用 $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$ 即 $\hat{a} \hat{a}^+ - \hat{a}^+ \hat{a} = 1$

证明: 2) $[\hat{a}^+ \hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+$

$$[\hat{a}^+ \hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a}^+ - \hat{a}^+ \hat{a}^+ \hat{a} = \hat{a}^+ (1 + \hat{a}^+ \hat{a}) - \hat{a}^+ \hat{a}^+ \hat{a} = \hat{a}^+$$

证明: 3) $[\hat{a}^+ \hat{a}, \hat{a}] = -\hat{a}$

$$[\hat{a}^+ \hat{a}, \hat{a}] = \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a} - \hat{a} \hat{a}^+ \hat{a} = (\hat{a} \hat{a}^+ - 1) \hat{a} - \hat{a} \hat{a}^+ \hat{a} = -\hat{a}$$

Chapter 3.2: 课后作业-答案



证明要点: 利用 $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^+ + \hat{a})$ $\hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar}{2}m\omega}(\hat{a}^+ - \hat{a})$ $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$

证明: 4) $\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right)$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 = -\frac{\hbar\omega}{4}(\hat{a}^+ - \hat{a})(\hat{a}^+ - \hat{a}) + \frac{\hbar\omega}{4}(\hat{a}^+ + \hat{a})(\hat{a}^+ + \hat{a})$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+)$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a} + 1)$$

$$= \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right)$$



设晶体中每个振动模的零点振动能为 $\frac{1}{2}\hbar\omega$ ，使用德拜模型和爱因斯坦模型分别求晶体的零点振动能。

提交时间：3月19日之前

提交方式：手写（写明姓名学号）并拍照，通过本班课代表统一提交

Chapter 3.3: 课后作业-答案



解题要点：充分理解态密度 $g(\omega)$ 的物理意思，并利用态密度将“求和”化为“积分”

解：

$$E = \sum_j^{3N} \frac{1}{2} \hbar \omega_j = \int_0^\omega \frac{1}{2} \hbar \omega g(\omega) d\omega \quad \text{设 } N \text{ 为原胞个数, 每个原胞 1 个原子}$$

德拜模型:

$$g(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2 \bar{c}^3} \omega^2 \quad \omega_D = \bar{c} \left[6\pi^2 \left(\frac{N}{V} \right) \right]^{1/3}$$

$$\longrightarrow E_{\text{Debye}} = \int_0^{\omega_D} \frac{1}{2} \hbar \omega g(\omega) d\omega = \frac{9}{8} N \hbar \omega_D$$

Chapter 3.3: 课后作业-答案



解题要点：充分理解态密度 $g(\omega)$ 的物理意思，并利用态密度将“求和”化为“积分”

解：

$$E = \sum_j^{3N} \frac{1}{2} \hbar \omega_j = \int_0^\omega \frac{1}{2} \hbar \omega g(\omega) d\omega$$

设 N 为原胞个数，每个原胞1个原子

爱因斯坦模型：

$$g(\omega) = 3N\delta(\omega - \omega_E)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x - x_0) = f(x_0)$$

$$\longrightarrow E_{\text{Einstein}} = \int_0^{+\infty} \frac{1}{2} \hbar \omega g(\omega) d\omega = \frac{3}{2} N \hbar \omega_E$$