

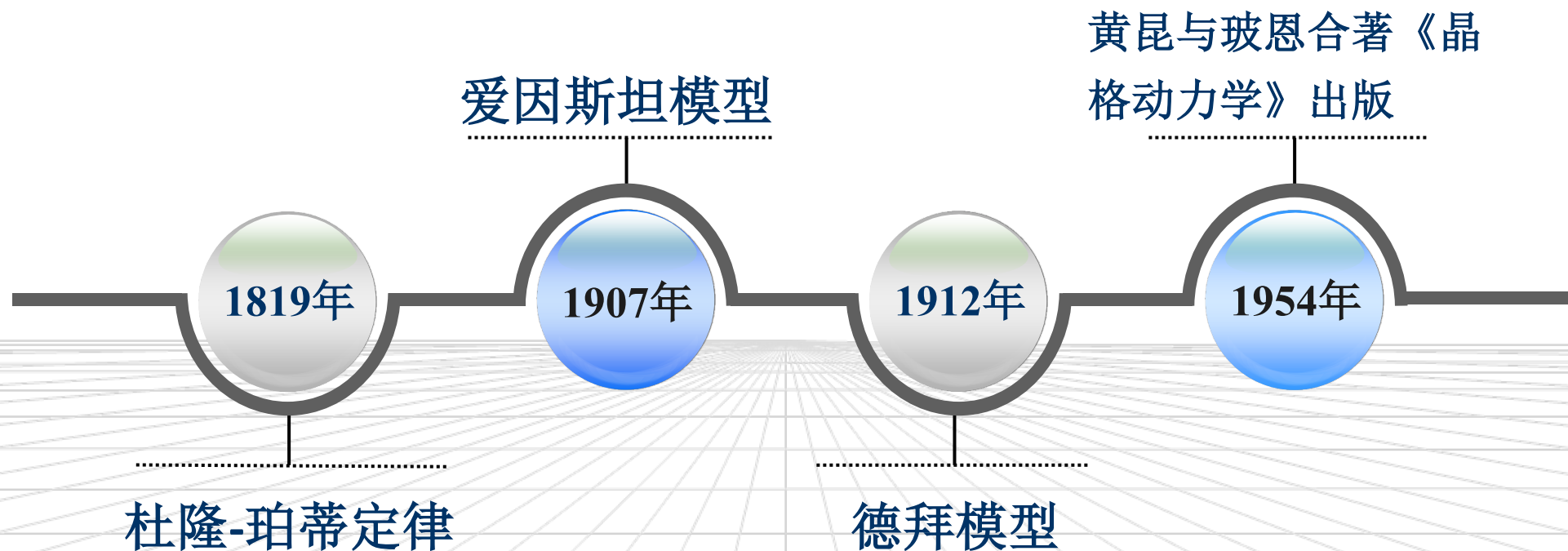
第3章 晶格振动

本章动机：探讨宏观性质背后的物理本质

- 一、理解和掌握经典力学分析晶格微小振动的思想和重要结论.
- 二、理解晶格振动的量子化处理及声子概念.
- 三、理解晶格振动谱的实验测定方法.
- 四、理解和掌握晶体热容的经典理论和量子理论.
- 五、掌握模式密度的概念.

引言：晶格振动发展脉络

晶格振动的研究始于固体热容研究：



§ 3.1 一维晶格振动

一、一维单原子链：运动方程

设相邻原子间的平衡距离为 a . μ_n 表示第 n 原子在 t 时刻偏离平衡位置的位移,第 n 原子和第 $n+1$ 原子间的相对位移为:

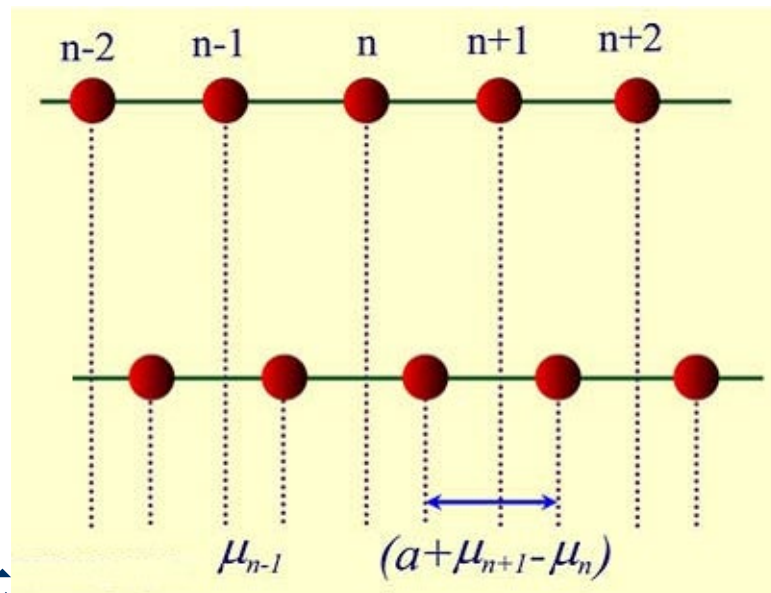
$$r = a + \mu_{n+1} - \mu_n = a + \delta$$

相互作用势能变成 $U(a + \delta)$, 将其在平衡位置附近展开

$$U(a + \delta) = U(a) + \left. \frac{dU}{dr} \right|_a \delta + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2U}{dr^2} \right|_a \delta^2 + \text{High items}$$

$$\approx U(a) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2U}{dr^2} \right|_a \delta^2$$

——简谐近似



一、一维单原子链：运动方程

第 n 原子和第 $n + 1$ 原子间的相互作用力为：

$$f = -\frac{dU}{d\delta} \approx -\frac{d^2U}{dr^2}\bigg|_a \delta = -\beta\delta$$

只考虑近邻原子之间的相互作用，第 n 原子所受到的总作用力：

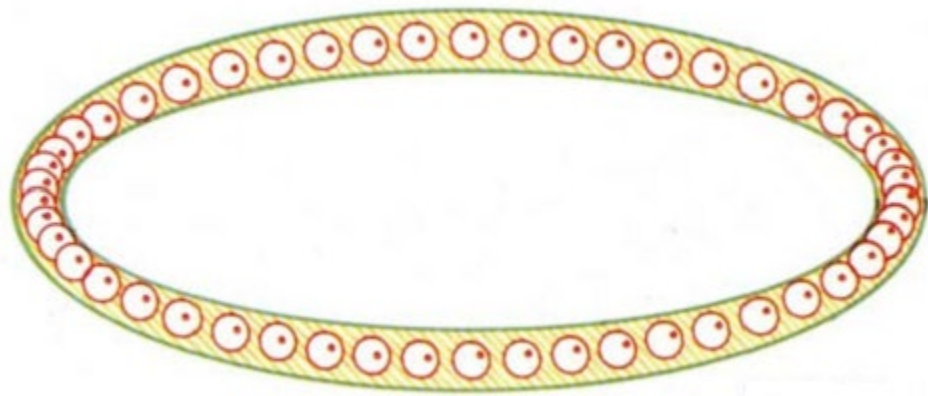
$$\beta(\mu_{n+1} - \mu_n) - \beta(\mu_n - \mu_{n-1}) = \beta(\mu_{n+1} + \mu_{n-1} - 2\mu_n)$$

■ 第 n 原子的运动方程

$$m \frac{d^2\mu_n}{dt^2} = \beta(\mu_{n+1} + \mu_{n-1} - 2\mu_n), \quad (n = 1, 2, \dots, N)$$

一、一维单原子链：色散关系

- 周期性边界条件(也称为玻恩-卡曼边界条件): $\mu_{N+1} = \mu_1$



- 运动方程的通解: $\mu_n = A \exp[i(qna - \omega t)]$, 将通解代入运动方程可得

$$-m\omega^2 \mu_n = \beta(e^{iqa} \mu_n + e^{-iqa} \mu_n - 2\mu_n)$$

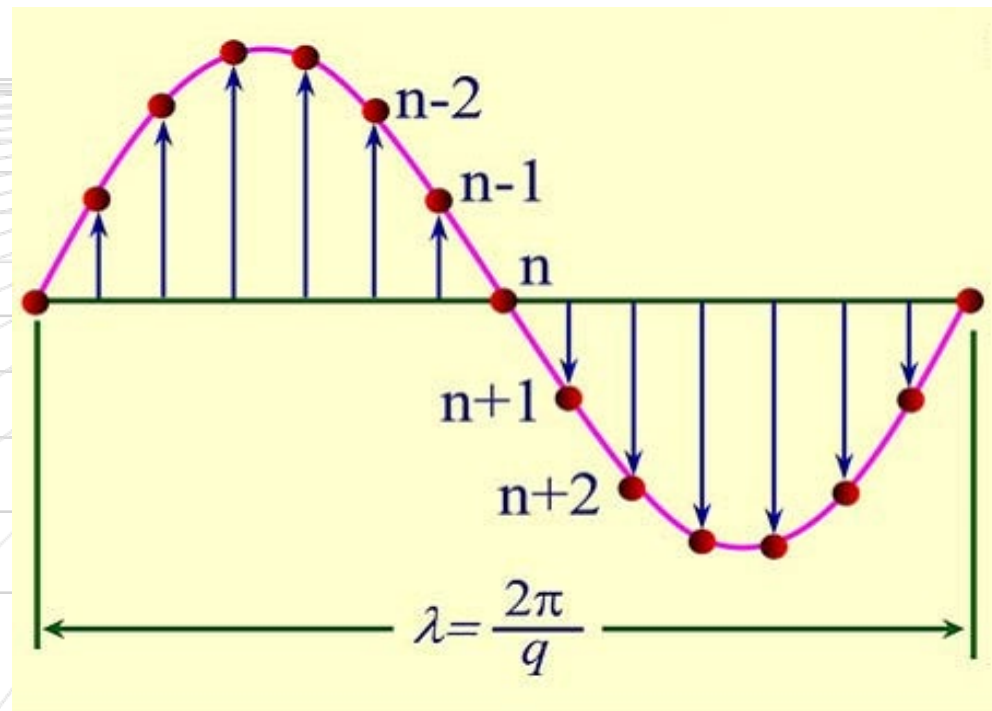
- 色散关系:

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

一、一维单原子链：几点说明

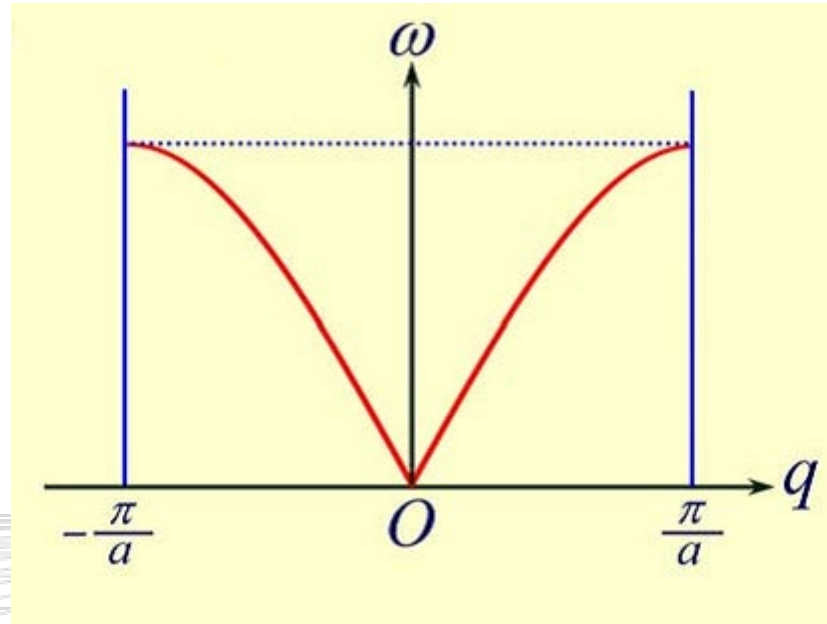
■ 几点说明：

□ 式 $\mu_n = A \exp[i(qna - \omega t)]$ 所描述的物理图形：原子围绕平衡位置的振动是以行波的形式在晶体中传播，是晶体中原子的一种集体运动形式(所有原子参与的集体运动)，这种行波称为格波。



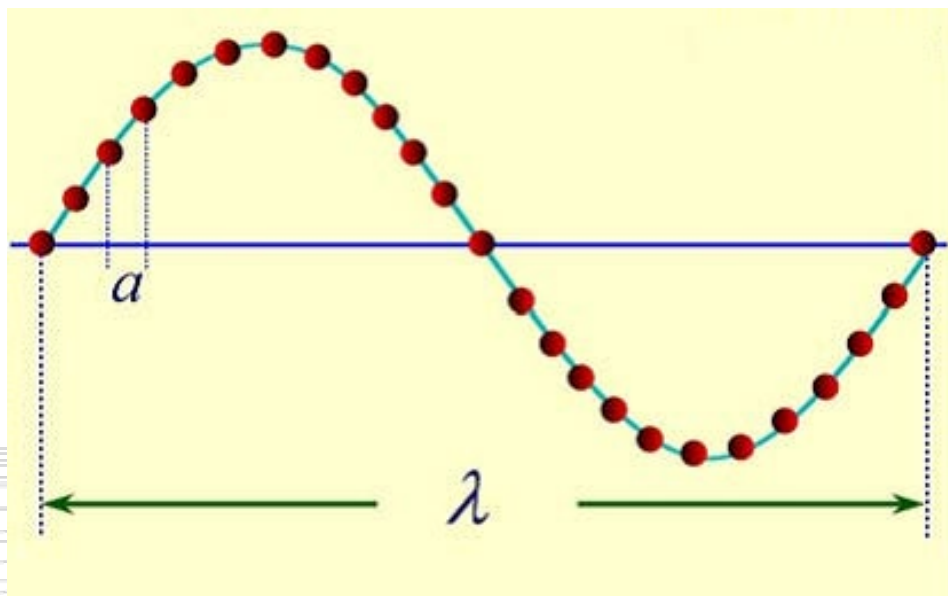
一、一维单原子链：几点说明

□ 色散关系：格波的频率与波矢的函数关系。

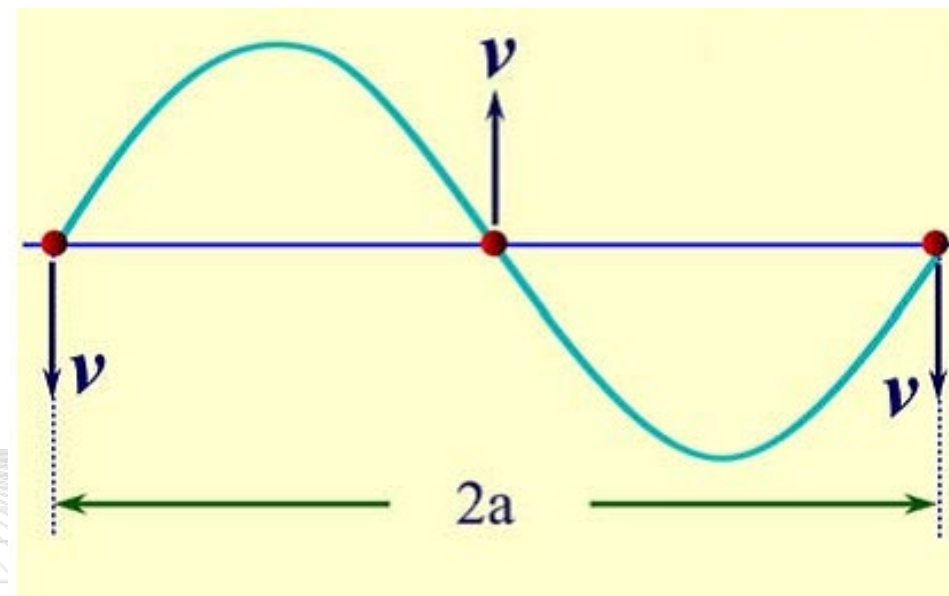


- i) 色散关系具有周期性和反射对称性。
- ii) 长波长极限区($q \rightarrow 0$), 格波的色散关系近似为线性, 表现出弹性波特征。随着 q 的增长, 色散关系逐渐偏离线性关系, 变得平缓. 在布里渊区边界, 格波频率达到极大值。

一、一维单原子链：几点说明



长波极限



短波极限

一、一维单原子链：几点说明

□ 相速度与群速度

- 相速度：单色波单位时间内一定的振动位相所传播的距离。

$$v_p = \frac{\omega}{q} = a \sqrt{\frac{\beta}{m}} \frac{\sin\left(\frac{qa}{2}\right)}{\frac{qa}{2}}$$

- 群速度：平均频率为 ω ，平均波矢为 q 的波包的传播速度，它是合成波能量和动量的传播速度。

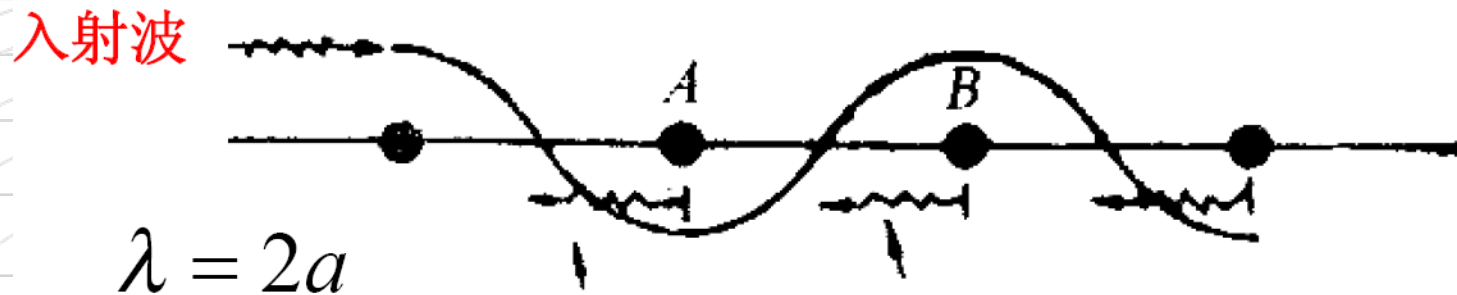
$$v_g = \frac{d\omega}{dq} = a \sqrt{\frac{\beta}{m}} \cos\left(\frac{qa}{2}\right)$$

- 长波极限下： $v_p = v_g = a\sqrt{\beta/m}$

一、一维单原子链：几点说明

- 短波极限： $v_g = a \sqrt{\frac{\beta}{m}} \cos\left(\frac{qa}{2}\right) = 0$

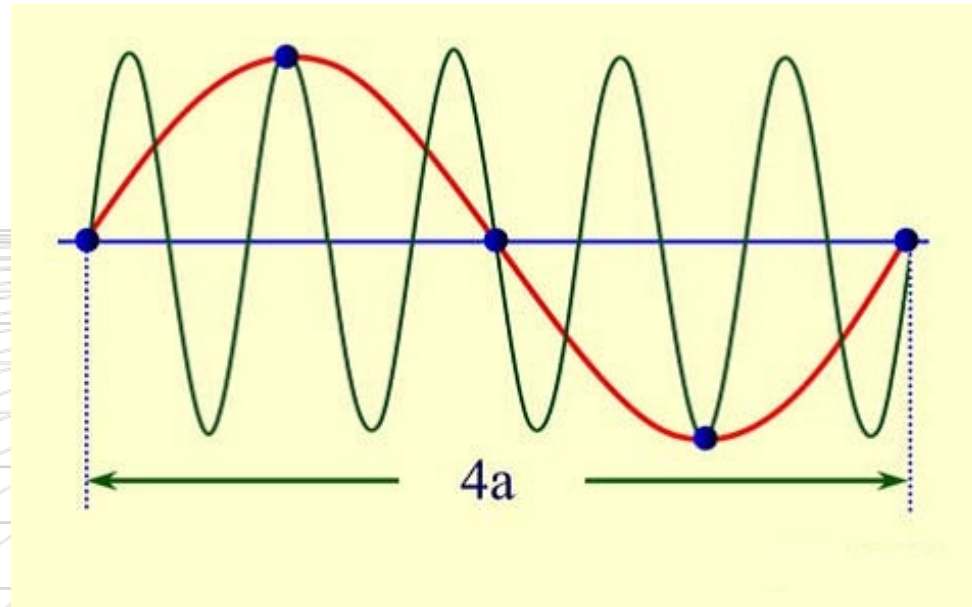
原因分析：近邻原子散射的子波与入射波位相相差 π ，由B原子反射的子波到达近邻A原子处时恰好和A原子反射的子波同位相，对所有原子的散射波都满足上述条件，所以当时，散射子波之间发生相长干涉，结果反射达到最大值，并与入射波相结合，形成驻波，群速度为零。



一、一维单原子链：几点说明

□ 格波波矢 q 的取值

- 取值范围的确定原则：相邻原子相位差 $aq \rightarrow aq + 2\pi$ 时，所有原子的振动没有任何改变：



$$-\pi < qa \leq \pi \quad \text{or} \quad -\frac{\pi}{a} < q \leq \frac{\pi}{a}$$

一、一维单原子链：几点说明

- 波矢的取值：

由周期性边界条件

$$\mu_{N+1} = A \exp[iqa(N + 1) - i\omega t] = \mu_1 = A \exp(iqa - i\omega t)$$

即

$$\exp(iqNa) = 1 \rightarrow q = \frac{2\pi l}{Na}, \quad l = \text{整数}.$$

l 的取值范围： $-\frac{N}{2} < l \leq \frac{N}{2}$

- 波矢密度： $\rho(q) = \frac{Na}{2\pi} = \frac{L}{2\pi}$

- 波矢的取值数目： N 是否有什么内在联系？

一、一维单原子链：几点说明

□ 态密度 $g(\omega)$ ：单位频率间隔内的状态数.

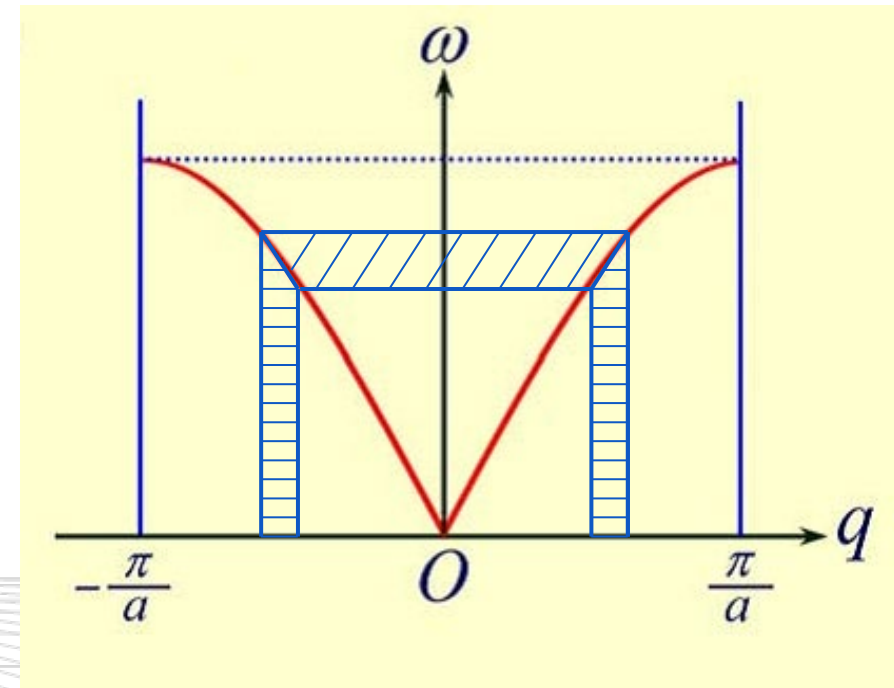
$$g(\omega) = \frac{dN}{d\omega}$$

以一维单原子链为例：

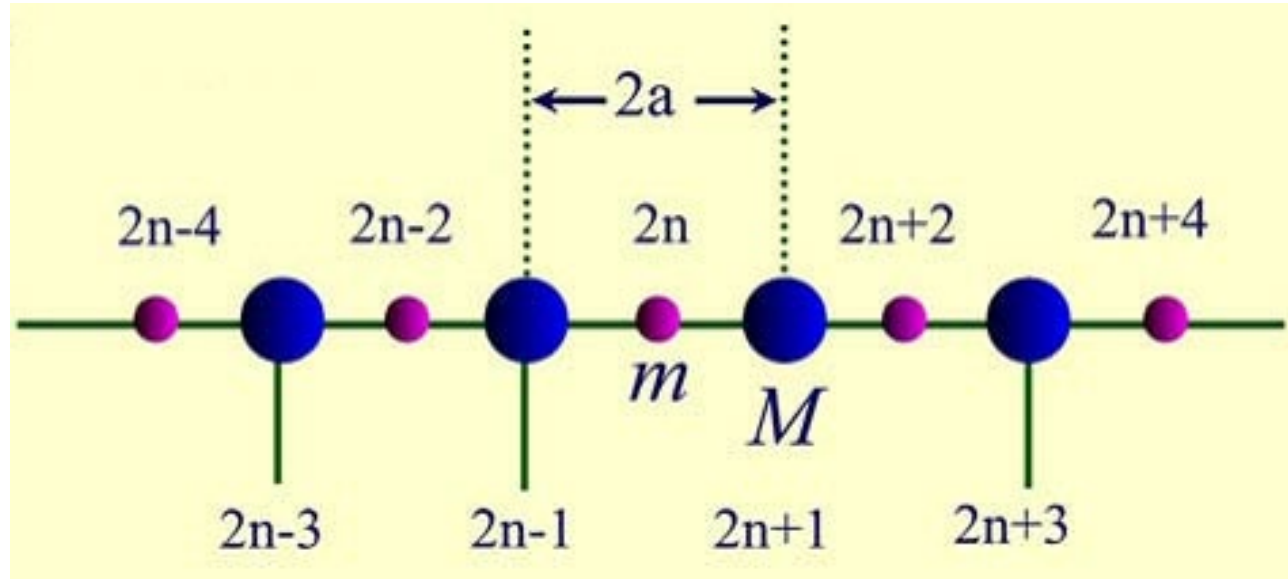
$$dN = g(\omega)d\omega = 2 \times \frac{L}{2\pi} dq$$

所以：

$$g(\omega) = \frac{L}{\pi} \frac{dq}{d\omega} = \frac{2N}{\pi} \cos^{-1} \left(\frac{qa}{2} \right)$$



一、一维双原子链(一维复式晶格): 运动方程



■ 第 $2n$ 原子和第 $2n + 1$ 原子的运动方程

$$\begin{cases} m \frac{d^2 \mu_{2n}}{dt^2} = \beta (\mu_{2n+1} + \mu_{2n-1} - 2\mu_{2n}) \\ M \frac{d^2 \mu_{2n+1}}{dt^2} = \beta (\mu_{2n+2} + \mu_{2n} - 2\mu_{2n+1}) \end{cases}$$

方程数=晶体的自由度

一、一维双原子链(一维复式晶格): 色散关系

■ 方程的形式解:

$$\begin{cases} \mu_{2n} &= A e^{i[q(2n)a - \omega t]} \\ \mu_{2n+1} &= B e^{i[q(2n+1)a - \omega t]} \end{cases}$$

将形式解代入运动方程:

$$\left. \begin{aligned} -m\omega^2 A &= \beta(e^{iqa} + e^{-iqa})B - 2\beta A \\ -M\omega^2 B &= \beta(e^{iqa} + e^{-iqa})A - 2\beta B \end{aligned} \right\} \Rightarrow \left. \begin{aligned} (2\beta - m\omega^2)A - (2\beta \cos qa)B &= 0 \\ -(2\beta \cos qa)A + (2\beta - M\omega^2)B &= 0 \end{aligned} \right\}$$

如何得到色散关系?

一、一维双原子链(一维复式晶格): 色散关系

■ 色散关系:

要使 A, B 有非零解, 则需满足:

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

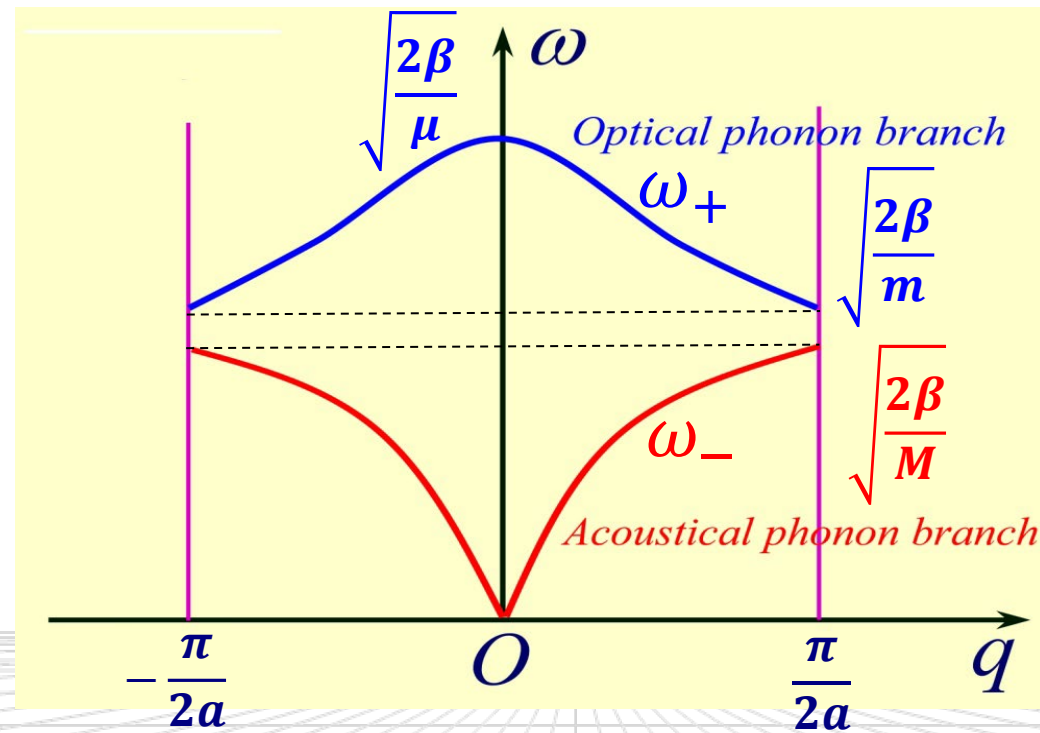
解得

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

“+” 光学支
“-” 声学支

——一维双原子链格波的色散关系

一、一维双原子链(一维复式晶格): 色散关系



长波极限: $\omega_- = \left(\frac{2\beta}{m+M} \right)^{1/2} |\sin(qa)| \approx \left(\frac{2\beta}{m+M} \right)^{1/2} a|q|$

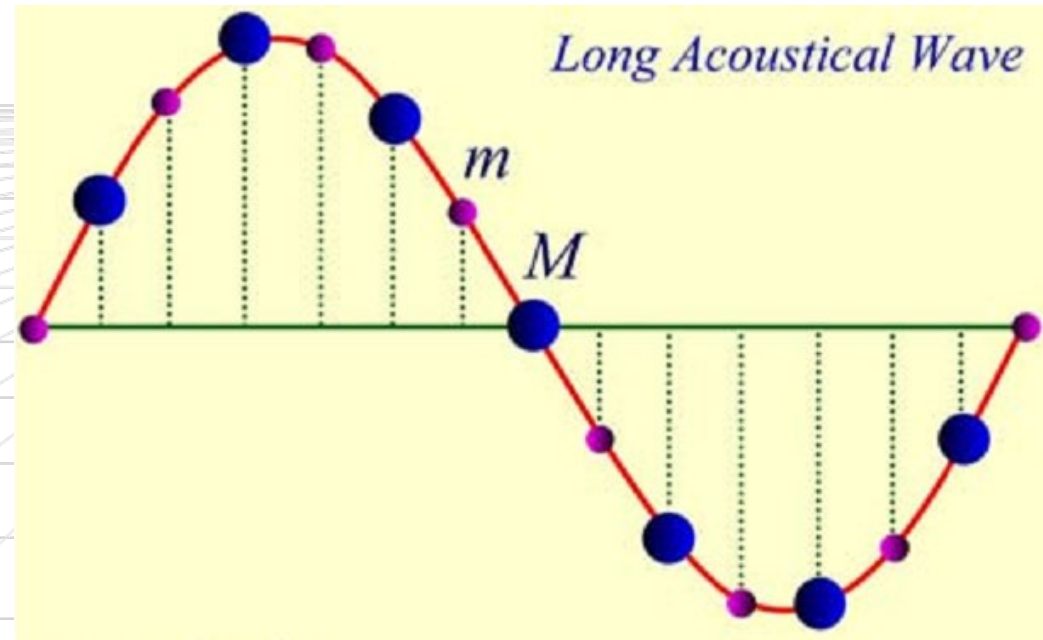
$$\omega_+ = \left(\frac{2\beta}{\mu} \right)^{\frac{1}{2}} \left\{ 1 - \frac{mM}{(m+M)^2} \sin^2(qa) \right\}^{\frac{1}{2}} \approx \left(\frac{2\beta}{\mu} \right)^{\frac{1}{2}}$$

一、一维双原子链(一维复式晶格): 长波极限

■ 长波极限下相邻原子运动情况分析

- 声学波: 当 $q \rightarrow 0$ 时, $\omega_- \rightarrow 0$, 相邻原子的振幅比为:

$$\left. \begin{aligned} (2\beta - m\omega^2)A - (2\beta \cos qa)B &= 0 \\ -(2\beta \cos qa)A + (2\beta - M\omega^2)B &= 0 \end{aligned} \right\} \rightarrow \frac{A}{B} = \frac{2\beta \cos(qa)}{2\beta - m\omega_-^2} \approx 1$$

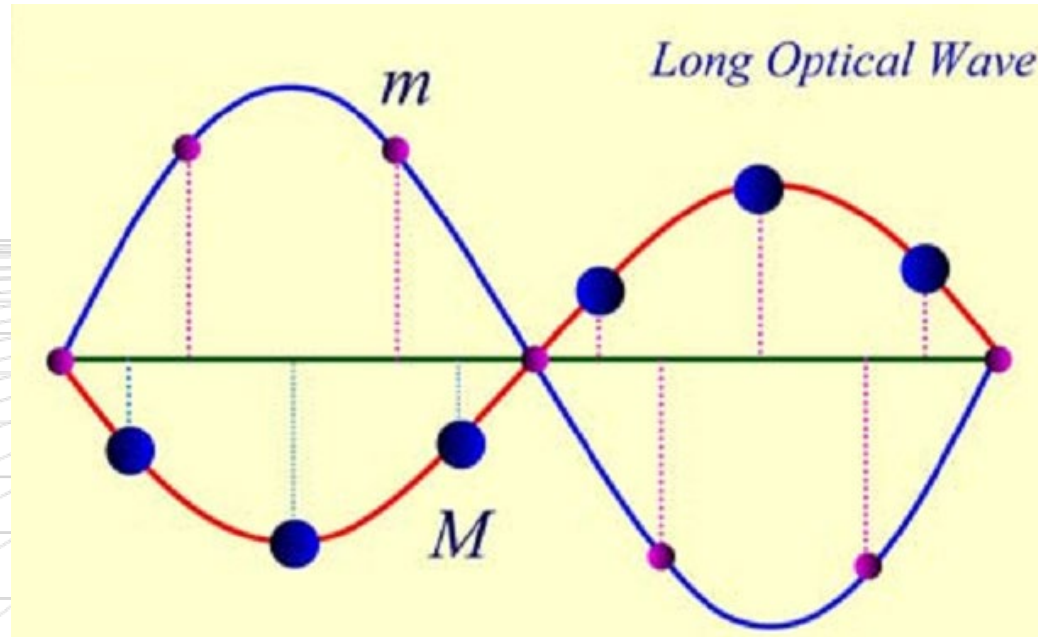


➔长声学波的相邻原子振动方向相同, 它描述的是原胞质心的运动.

一、一维双原子链(一维复式晶格): 长波极限

- 光学波: 当 $q \rightarrow 0$ 时, $\omega_+ \rightarrow \sqrt{2\beta/\mu}$, 相邻原子的振幅比为:

$$\frac{A}{B} = \frac{2\beta - M\omega_+^2}{2\beta \cos(qa)} = -\frac{M}{m}$$



➔ 同一原胞中的两个原子的振动方向相反, 质心保持不动, 即长光学波描述的是原胞中原子的相对运动。

一、一维双原子链(一维复式晶格): 波矢的取值

- 波矢的取值:

由周期性边界条件

$$\mu_{2n} = Ae^{i[q(2n)a - \omega t]} = \mu_{2N+2n} = Ae^{i[q(2n+2N)a - \omega t]}$$

即

$$\exp(i2qNa) = 1 \rightarrow q = \frac{2\pi l}{2Na}, \quad l = \text{整数}.$$

- 波矢密度: $\rho(q) = \frac{2Na}{2\pi} = \frac{L}{2\pi}$

- 波矢的取值数目: $\rho(q) \frac{\pi}{a} = \frac{Na}{\pi} \frac{\pi}{a} = N.$

结论:

q 的取值总数=晶体链原胞的数目

§ 3.2 三维晶格振动

一、三维简单晶格

类比一维晶格分析思路

运动方程:

$$M\ddot{u}_l^\alpha = -\frac{\partial U}{\partial u_l^\alpha} = -\sum_{l',\beta} \Phi_{\alpha\beta}(l, l') u_{l'}^\beta, \alpha, \beta = x, y, z$$

形式解:

$$u_l^\alpha = A_\alpha \exp[i(\vec{q} \cdot \vec{R}_l - \omega t)]$$

\vec{q} 波矢, 表征波长及格波的传播方向

A_α 振幅, 表征原子的振动方向及波的偏振

将形式解代入运动方程可得3支色散关系, 且均为声学波. 为什么?

二、三维复式晶格：运动方程

对于由 $N = N_1 \times N_2 \times N_3$ 个原胞组成的晶体，若每个原胞内有 n 个原子，每个原子均可做三维运动， n 个原子的质量分别是： $m_1, m_2, m_3, \dots, m_n$ ，

则第 l 个原胞的位置为： $\vec{R}(l) = l_1 \vec{a}_1 + l_2 \vec{a}_2 + l_3 \vec{a}_3$

原胞中各原子的位置： $\vec{R} \begin{pmatrix} l \\ 1 \end{pmatrix}, \vec{R} \begin{pmatrix} l \\ 2 \end{pmatrix}, \vec{R} \begin{pmatrix} l \\ 3 \end{pmatrix} \dots \vec{R} \begin{pmatrix} l \\ n \end{pmatrix}$

原胞中各原子偏离平衡位置的位移： $\vec{\mu} \begin{pmatrix} l \\ 1 \end{pmatrix}, \vec{\mu} \begin{pmatrix} l \\ 2 \end{pmatrix}, \vec{\mu} \begin{pmatrix} l \\ 3 \end{pmatrix} \dots \vec{\mu} \begin{pmatrix} l \\ n \end{pmatrix}$

第 p 个原子在 α ($\alpha = x, y, z$) 方向的运动方程为：

$$m_p \ddot{\mu}_\alpha \begin{pmatrix} l \\ p \end{pmatrix} = -\beta \mu_\alpha \begin{pmatrix} l \\ p \end{pmatrix} + \dots$$

——共有 $3n$ 个类似方程

二、三维复式晶格：色散关系

在简谐近似下, 运动方程的形式解为

$$\vec{\mu} \begin{pmatrix} l \\ p \end{pmatrix} = \vec{A}_p \exp i \left[\omega t - \vec{R}_l \begin{pmatrix} l \\ p \end{pmatrix} \cdot \vec{q} \right]$$

将方程代回运动方程可得到 $3n$ 个线性齐次方程

$$m_p \omega^2 A_{p\alpha} = \sum_{k, \beta=x,y,z} C_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} \vec{q} \\ k, p \end{pmatrix} A_{k\beta}$$

根据系数行列式为零条件, 得到 $3n$ 支色散关系。

可以证明: 在长波极限下, 3支频率对应的格波为声学波即描述的是不同原胞间的相对运动. 另有 $3n - 3$ 支频率对应的格波为光学, 即描述的是一个原胞中各原子间的相对运动。

二、三维复式晶格：波矢的取值

根据玻恩-卡曼边界条件：

$$\begin{cases} \vec{\mu} \begin{pmatrix} l \\ p \end{pmatrix} = \vec{\mu} \begin{pmatrix} l_1, l_2, l_3 \\ p \end{pmatrix} = \vec{\mu} \begin{pmatrix} l_1 + N_1, l_2, l_3 \\ p \end{pmatrix} \\ \vec{\mu} \begin{pmatrix} l \\ p \end{pmatrix} = \vec{\mu} \begin{pmatrix} l_1, l_2, l_3 \\ p \end{pmatrix} = \vec{\mu} \begin{pmatrix} l_1, l_2 + N_2, l_3 \\ p \end{pmatrix} \\ \vec{\mu} \begin{pmatrix} l \\ p \end{pmatrix} = \vec{\mu} \begin{pmatrix} l_1, l_2, l_3 \\ p \end{pmatrix} = \vec{\mu} \begin{pmatrix} l_1, l_2, l_3 + N_3 \\ p \end{pmatrix} \end{cases}$$

$$\rightarrow \begin{cases} \exp i [\vec{q} \cdot \vec{R}_l - \omega t] = \exp i [\vec{q} \cdot (\vec{R}_l + N_1 \vec{a}_1) - \omega t] \\ \exp i [\vec{q} \cdot \vec{R}_l - \omega t] = \exp i [\vec{q} \cdot (\vec{R}_l + N_2 \vec{a}_2) - \omega t] \\ \exp i [\vec{q} \cdot \vec{R}_l - \omega t] = \exp i [\vec{q} \cdot (\vec{R}_l + N_3 \vec{a}_3) - \omega t] \end{cases}$$

二、三维复式晶格：波矢的取值

■ 波矢的取值表达式为：

$$\left. \begin{aligned} \vec{q} \cdot N_1 \vec{a}_1 &= 2\pi h_1, \\ \vec{q} \cdot N_2 \vec{a}_2 &= 2\pi h_2, \\ \vec{q} \cdot N_3 \vec{a}_3 &= 2\pi h_3. \end{aligned} \right\} \Rightarrow \vec{q} = \frac{h_1}{N_1} \vec{b}_1 + \frac{h_2}{N_2} \vec{b}_2 + \frac{h_3}{N_3} \vec{b}_3$$

■ 波矢的密度：

每个波矢所占的空间体积： $V^* = \frac{\vec{b}_1}{N_1} \cdot \left(\frac{\vec{b}_2}{N_2} \times \frac{\vec{b}_3}{N_3} \right) = \frac{\Omega^*}{N} = \frac{(2\pi)^3}{N\Omega} = \frac{(2\pi)^3}{V_C}$

波矢密度(三维)： $\rho(q) = \frac{V_C}{(2\pi)^3}$

二、三维复式晶格：波矢的取值

- 波矢的取值范围： q 的取值限制在一个倒格子原胞中

$$\exp \left[-i \vec{R}_l \begin{pmatrix} l \\ p \end{pmatrix} \cdot \vec{q} \right] = \exp \left[-i \vec{R}_l \begin{pmatrix} l \\ p \end{pmatrix} \cdot (\vec{G}_n + \vec{q}) \right]$$

可得

$$\begin{cases} -\frac{b_1}{2} < q_x \leq \frac{b_1}{2} \\ -\frac{b_2}{2} < q_y \leq \frac{b_2}{2} \\ -\frac{b_3}{2} < q_z \leq \frac{b_3}{2} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} -\frac{N_1}{2} < h_1 \leq \frac{N_1}{2} \\ -\frac{N_2}{2} < h_2 \leq \frac{N_2}{2} \\ -\frac{N_3}{2} < h_3 \leq \frac{N_3}{2} \end{cases}$$

- q 的取值个数： $\frac{V_C}{(2\pi)^3} \cdot |\vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3)| = N_1 \times N_2 \times N_3 = N$

二、三维复式晶格：结论

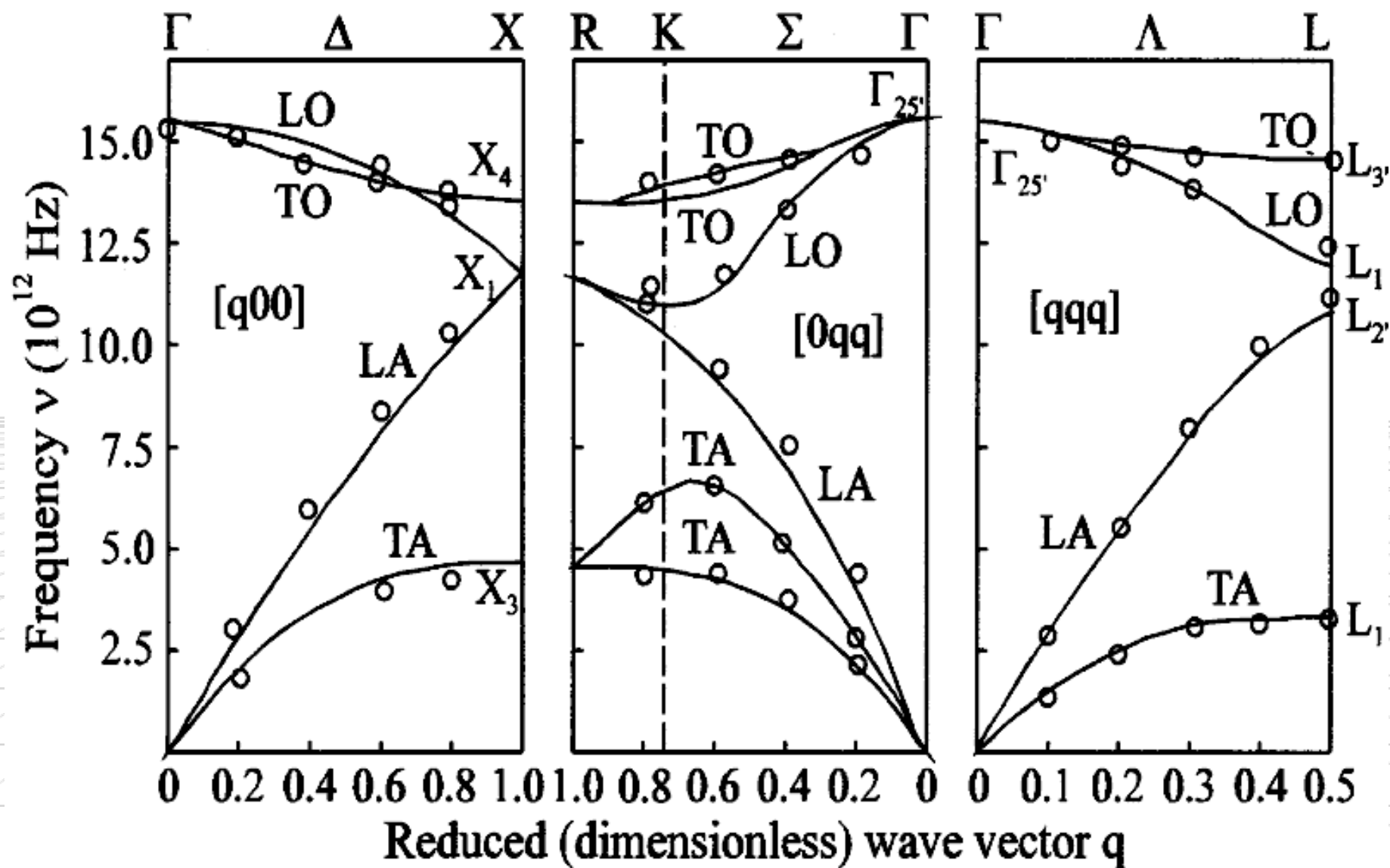
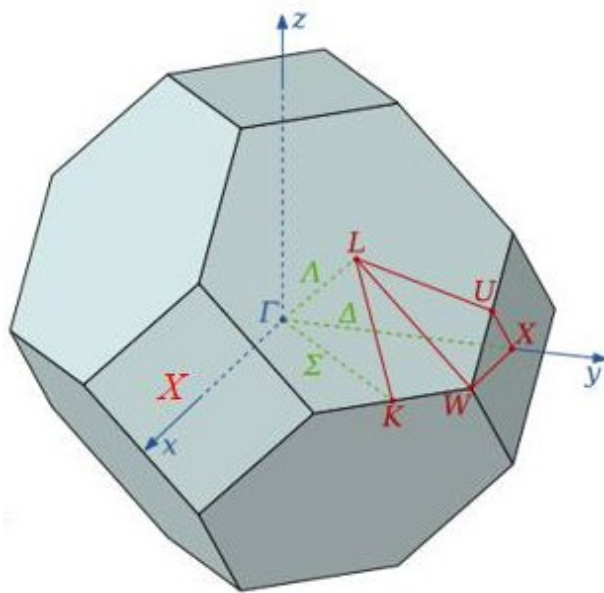
若晶体有 $3nN$ 个自由度. 在简谐近似下, 晶体的独立状态(格波)数等于晶体的自由度数. 这 $3nN$ 个状态(格波)分成 $3n$ 支, 每支含有 N 个独立的振动状态. 其中声学波有3支, 描述原胞质心的运动, 包含一个纵波和二个横波. 其余 $3(n-1)$ 支是光学支, 描述原胞内原子之间的相对运动. 如Si晶体, 每个原胞中包含2个原子, 共有6支格波, 其中3支是声学波, 3支是光学波.

由于周期性条件, q 取值是分立的, 在第一布里渊区内存在有限个允许的 q 值:

晶格振动的波矢数=晶体的原胞数

晶格振动的频率数=晶体的自由度数

二、三维复式晶格：结论



§ 3.3 简正振动 声子

一、简正振动

晶体的原子数为 N , 在 t 时刻偏第 l 原子离平衡位置矢量为 $\vec{u}_l(t)$.

$$\vec{u}_l(t) \rightarrow (u_{3l-2}, u_{3l-1}, u_{3l})$$

对于 N 个原子位移矢量共有 $3N$ 个分量:

$$(u_1, u_2, u_3), (u_4, u_5, u_6), \dots, (u_{3N-2}, u_{3N-1}, u_{3N})$$

系统的势能:

$$U = U_0 + \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial U}{\partial u_i} \right)_0 u_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{3N} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial u_i \partial u_j} \right)_0 u_i u_j + \text{High items}$$

系统的振动动能:

$$T = \frac{1}{2} \sum_i^{3N} m_i \dot{u}_i^2$$

一、简正振动

系统总能量

$$H = T + U = \frac{1}{2} \sum_i^{3N} m_i \dot{u}_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{3N} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial u_i \partial u_j} \right)_0 u_i u_j$$

引入简正坐标: Q_j ($j = 1, 2, 3, \dots, 3N$)

$$\sqrt{m_i} u_i = \sum_{j=1}^{3N} a_{ij} Q_j$$

系统的哈密顿量为:

$$H = \frac{1}{2} \sum_i^{3N} \dot{Q}_i^2 + \frac{1}{2} \sum_i^{3N} \omega_i^2 Q_i^2 \quad \text{—} 3N \text{ 个独立的简谐振子}$$

一、简正振动

由正则方程:

$$\ddot{Q}_i + \omega_i^2 Q_i = 0, \quad i = 1, 2, \dots, 3N$$

任意简正坐标的解: $Q_i = A \sin(\omega_i t + \phi)$

简正振动: 整个晶体所有原子都参与的振动, 且振动频率相同.

振动模: 由见证的坐标所代表的所有原子一起参与的共同振动, 称为一个振动模.

原子的位移宗量: $\mu_i = \frac{a_{ij}}{\sqrt{m_i}} Q_j = \frac{a_{ij}}{\sqrt{m_i}} A \sin(\omega_j t + \phi)$ (一个振动模)

$$\mu_i = \sum_j \frac{a_{ij}}{\sqrt{m_i}} Q_j = \sum_j \frac{a_{ij}}{\sqrt{m_i}} A \sin(\omega_j t + \phi) \quad (\text{多个振动模})$$

一、简正振动

$$k = 6\pi/6a \quad \lambda = 2.00a \quad \omega_k = 2.00\omega$$



$$k = 5\pi/6a \quad \lambda = 2.40a \quad \omega_k = 1.93\omega$$



$$k = 4\pi/6a \quad \lambda = 3.00a \quad \omega_k = 1.73\omega$$



$$k = 3\pi/6a \quad \lambda = 4.00a \quad \omega_k = 1.41\omega$$



$$k = 2\pi/6a \quad \lambda = 6.00a \quad \omega_k = 1.00\omega$$



$$k = 1\pi/6a \quad \lambda = 12.00a \quad \omega_k = 0.52\omega$$



一、简正振动

■ 几点说明

1. 晶体中原子间的耦合振动, 在简谐近似下也可以用 $3nN$ 个简正坐标下的谐振子运动来描述. 由于简正坐标 Q_i 是各原子位移量的某种线性组合, 所以一个简正振动并不是表示一个原子的振动, 而是整个晶体所有原子都参与的运动.
2. 由简正坐标所代表的体系中所有原子一起参与的共同振动常被称作晶体的一个振动模. N 个原胞, 每个原胞 n 个原子的晶体总共有 $3nN$ 种振动模. 或说可以用 $3nN$ 种简谐振子的运动来表述.
3. 引入简正坐标后, 我们可以方便地转入用量子力学的观点来理解晶格振动问题.

二、简正振动量子化

系统哈密顿量:

$$H = \frac{1}{2} \sum_i^{3N} \dot{Q}_i^2 + \frac{1}{2} \sum_i^{3N} \omega_i^2 Q_i^2 \xrightarrow{\hat{P}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial Q_i}} H = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial Q_i^2} + \omega_i^2 Q_i^2 \right)$$

对于其中一个简正坐标:

$$\frac{1}{2} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial Q_i^2} + \omega_i^2 Q_i^2 \right) \varphi(Q_i) = E_i \varphi(Q_i)$$

谐振子的能量本征值: $E_i = (n_i + 1/2)\hbar\omega_i$

谐振子的本征态函数: $\varphi_n(Q_i) = \sqrt{\frac{\omega_i}{\hbar}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) H_{ni}(\xi), \quad \xi = \sqrt{\frac{\omega_i}{\hbar}} Q_i$

二、简正振动量子化

系统的薛定谔方程:

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial Q_i^2} + \omega_i^2 Q_i^2 \right) \psi(Q_1, Q_2, \dots, Q_{3N}) = E \psi(Q_1, Q_2, \dots, Q_{3N})$$

系统能量本征值: $E = \sum_{i=1}^{3N} E_i = \sum_{i=1}^{3N} \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_i$

系统本征态函数: $\psi(Q_1, Q_2, \dots, Q_{3N}) = \prod_{i=1}^{3N} \varphi_n(Q_i)$

从量子力学的观点看, 表征原子集体运动的简谐振子的能量是量子化的, 每个振动模式能量的最小单位被称为声子。

二、声子

■ 几点说明：

- 声子是晶格振动的能量量子, $\hbar\omega_i$.
- 声子具有能量 $\hbar\omega_i$, 也具有准动量 $\hbar q_i$, 它的行为类似于电子或光子, 具有粒子的性质. 但它不能脱离固体而单独存在, 因此不是一种真实的粒子. 我们将这种具有粒子性质, 但又不是真实物理实体的概念称为准粒子.
- 一种格波即一种振动模式称为一种声子, 对于由 N 个原子组成的三维晶体, 有 $3N$ 种格波, 即有 $3N$ 种声子. 当一种振动模式处于其能量本征态时, 称这种振动模有 n_j 个声子.

二、声子

- 声子与声子相互作用, 或声子与其他粒子(电子或光子)相互作用时, 遵从能量守恒和准动量守恒, 但声子数目不守恒.
- 声子可以产生, 也可以湮灭. 当电子或光子与晶格振动相互作用时, 总是以 $\hbar\omega_i$ 为单元交换能量, 若电子交给晶格 $\hbar\omega_i$ 的能量, 称为产生一个声子; 若电子从晶格获得 $\hbar\omega_i$ 的能量, 则称为湮灭一个声子.
- 声子为玻色子系统, 服从Bose-Einstein统计, 当系统处于热平衡状态时, 频率为 ω_i 的格波的平均声子数为:

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

二、声子

温度为 T 时声子平均能量为：

子体系的能量本征值为： $E_j = (n_j + \frac{1}{2})\hbar\omega_j$

子体系处于概率：

$$P_{n_j} = C e^{-E_j/k_B T} = \frac{e^{-E_j/k_B T}}{\sum_{n_j} e^{-E_j/k_B T}} = e^{-n_j \hbar\omega_j/k_B T} (1 - e^{-\hbar\omega_j/k_B T})$$

所以能量为 E_j 的平均能量为：

$$\bar{E}_j = \sum_{n_j} P_{n_j} \left(n_j + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_j = \frac{1}{2} \hbar\omega_j + \frac{\hbar\omega_j}{e^{\hbar\omega_j/k_B T} - 1}$$

三、晶格振动小结

晶体中原子的热运动

使用牛顿力学处理

在简谐近似下, 任何运动都可以看成是 $3nN$ 种简谐平面波的线性叠加.

给出原子集体运动的方式, 确定色散关系和态密度.

使用拉格朗日方程处理

在简谐近似下, 原子间的耦合运动也可以用 $3nN$ 个简正坐标下的独立谐振子运动来描述.

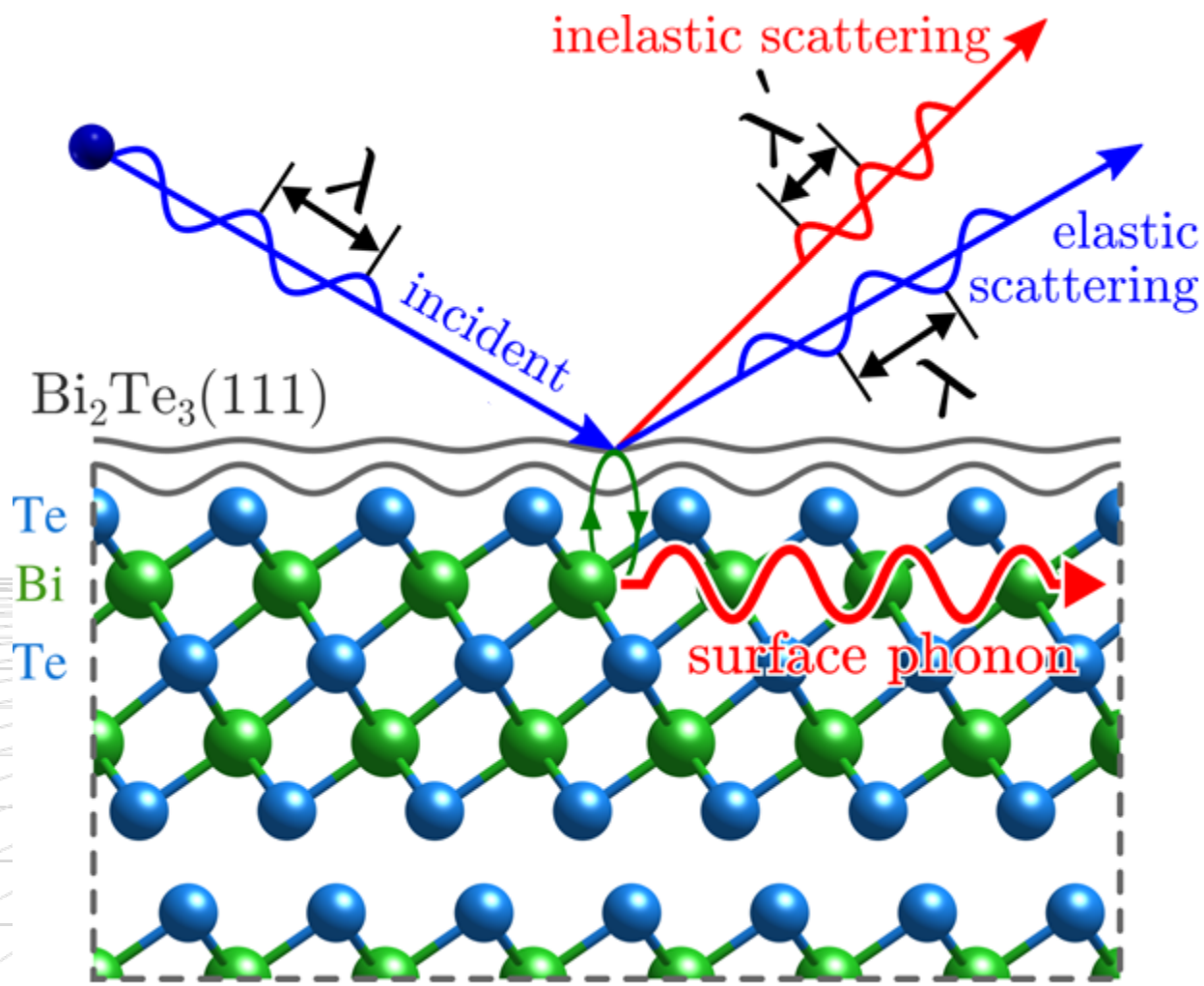
量子力学处理

在简谐近似下, 可以当作是 $3nN$ 种无相互作用的声子的运动.

揭示了原子热运动的本质表现: 能量量子化

§ 3. 4 晶格振动谱的实验测定

一、实验测定方案



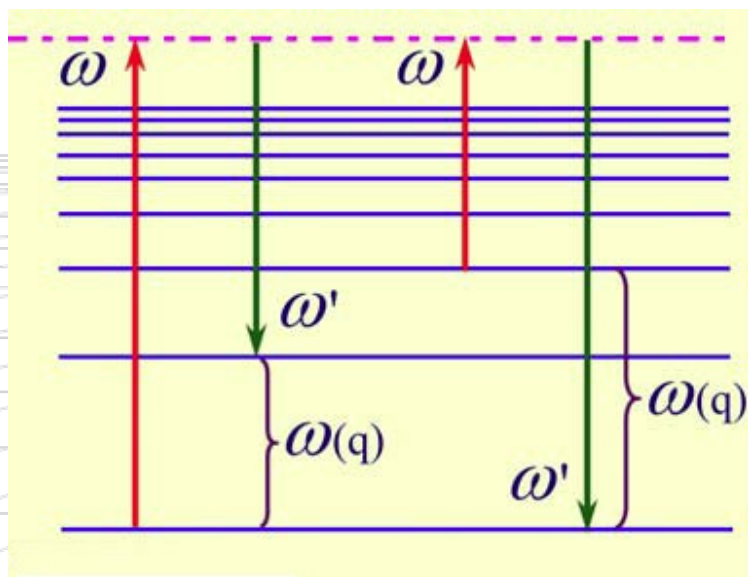
常用的实验方法：中子的非弹性散射、X射线衍射、光的散射等。

二、理论依据

能量守恒:

$$(\text{光子}) \quad \hbar\omega' - \hbar\omega = \pm\hbar\omega(q)$$

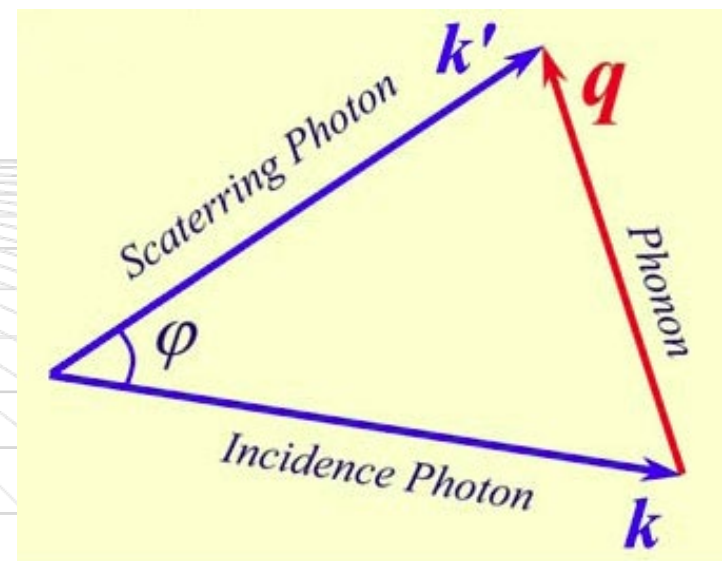
$$(\text{中子}) \quad \frac{p'^2}{2m} - \frac{p^2}{2m} = \pm\hbar\omega(q)$$



动量守恒:

$$(\text{光子}) \quad \hbar\vec{k}' - \hbar\vec{k} = \pm\hbar\vec{q} \pm \hbar\vec{G}_n$$

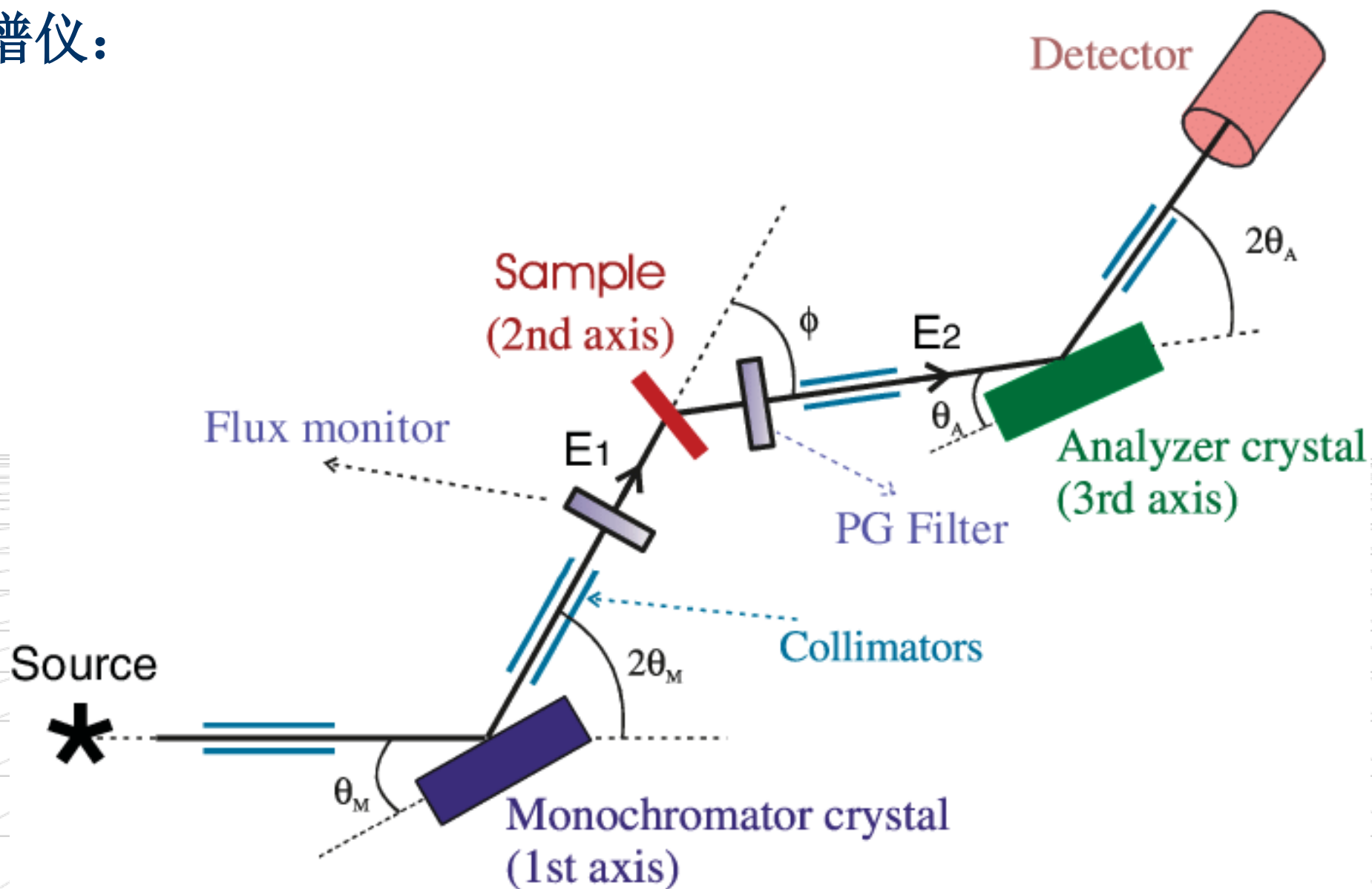
$$(\text{中子}) \quad \vec{p}' - \vec{p} = \pm\hbar\vec{q} \pm \hbar\vec{G}_n$$



固定入射光的频率(ω)和入射方向(k), 测量不同方向的散射光的频率, 可以得到声子的振动谱。

三、实验装置

中子三轴谱仪:



§ 3.5 长波近似

一、长声学波：以一维双原子链为例

运动方程：

$$m \frac{d^2 \mu_{2n}}{dt^2} = \beta (\mu_{2n+1} + \mu_{2n-1} - 2\mu_{2n})$$
$$M \frac{d^2 \mu_{2n+1}}{dt^2} = \beta (\mu_{2n+2} + \mu_{2n} - 2\mu_{2n+1})$$

色散关系：

$$\omega_{-}^2 = \beta \frac{(m+M)}{mM} \left\{ 1 - \left[1 - \frac{4mM}{(m+M)^2} \sin^2 q a \right]^{1/2} \right\}$$
$$\xrightarrow{q \rightarrow 0} \omega_{-}^2 \approx \frac{2\beta}{m+M} (qa)^2$$

一、长声学波：以一维双原子链为例

振幅关系：

$$\left. \begin{aligned} (2\beta - m\omega^2)A - (2\beta \cos qa)B &= 0 \\ -(2\beta \cos qa)A + (2\beta - M\omega^2)B &= 0 \end{aligned} \right\} \xrightarrow{q \rightarrow 0} \frac{A}{B} = \frac{2\beta \cos(qa)}{2\beta - m\omega_-^2}$$

考察：

$$\mu_{2n+1} = B e^{i[q(2n+1)a - \omega t]} = A e^{i[q(2n)a - \omega t]} \frac{2\beta - m\omega_-^2}{2\beta \cos(qa)} e^{iqa}$$

$$= \frac{2\beta - m\omega_-^2}{2\beta \cos(qa)} e^{iqa} \mu_{2n}$$

$$\mu_{2n+2} = A e^{i[q(2n+2)a - \omega t]} = B e^{i[q(2n+1)a - \omega t]} \frac{2\beta - M\omega_-^2}{2\beta \cos(qa)} e^{iqa}$$

$$= \frac{2\beta - M\omega_-^2}{2\beta \cos(qa)} e^{iqa} \mu_{2n+1}$$

一、长声学波：以一维双原子链为例

考察运动方程：

$$m \frac{d^2 \mu_{2n}}{dt^2} = - \frac{2m\beta(qa)^2}{(M+m)} \mu_{2n}$$

$$M \frac{d^2 \mu_{2n+1}}{dt^2} = - \frac{2M\beta(qa)^2}{(M+m)} \mu_{2n+1}$$

$$\rightarrow \frac{d^2 \mu_{2n+1}}{dt^2} = - \frac{2\beta(qa)^2}{(M+m)} \mu_{2n+1}$$

一、长声学波：以一维双原子链为例

$$\left. \begin{aligned} \frac{d^2 \mu_{2n+1}}{dt^2} &= -\frac{2\beta(qa)^2}{(M+m)} \mu_{2n+1} \\ \frac{d^2 \mu_{2n}}{dt^2} &= -\frac{2\beta(qa)^2}{(M+m)} \mu_{2n} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{d^2 \mu_{2n+l}}{dt^2} = -\frac{2\beta(qa)^2}{(M+m)} \mu_{2n+l}$$

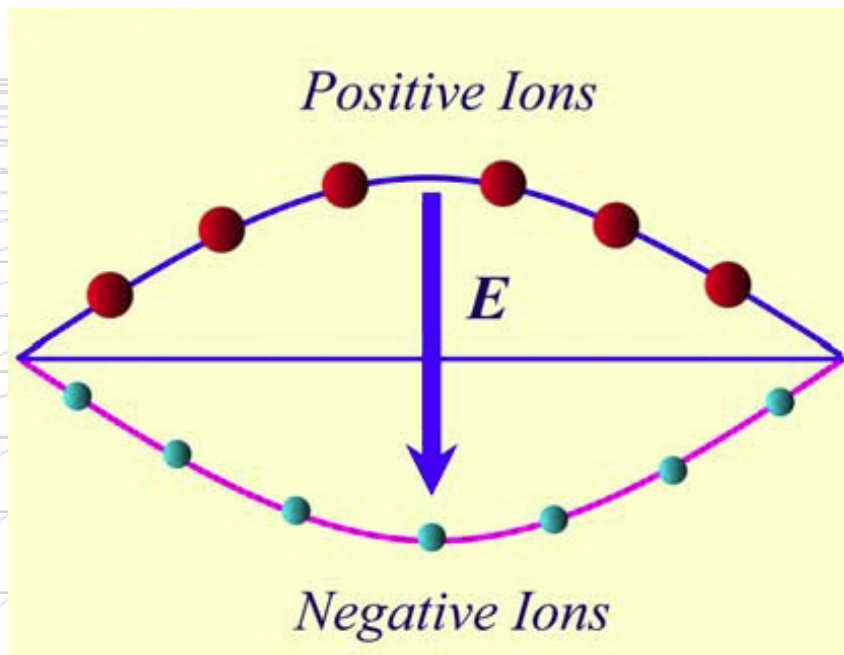
$$\mu_{2n+l} = A e^{i[q(2n+l)a - \omega t]} = A e^{i[qx - \omega t]}$$

$$\frac{\partial^2 \mu_{2n+l}}{\partial t^2} = \frac{2\beta a^2}{(M+m)} \frac{\partial^2 \mu_{2n+l}}{\partial x^2}$$

——与宏观弹性波的波动方程一致

二、离子晶体长光学波特点

离子晶体的长光学波描述的是原胞内正负离子之间的相对运动，半个波长范围内可以包含许多个原胞，在两个波节之间同种电荷的离子位移方向相同，异性电荷离子位移方向相反，因此波节面就将晶体分成许多薄层，在每个薄层里由于异性电荷离子位移方向相反而形成了退极化场



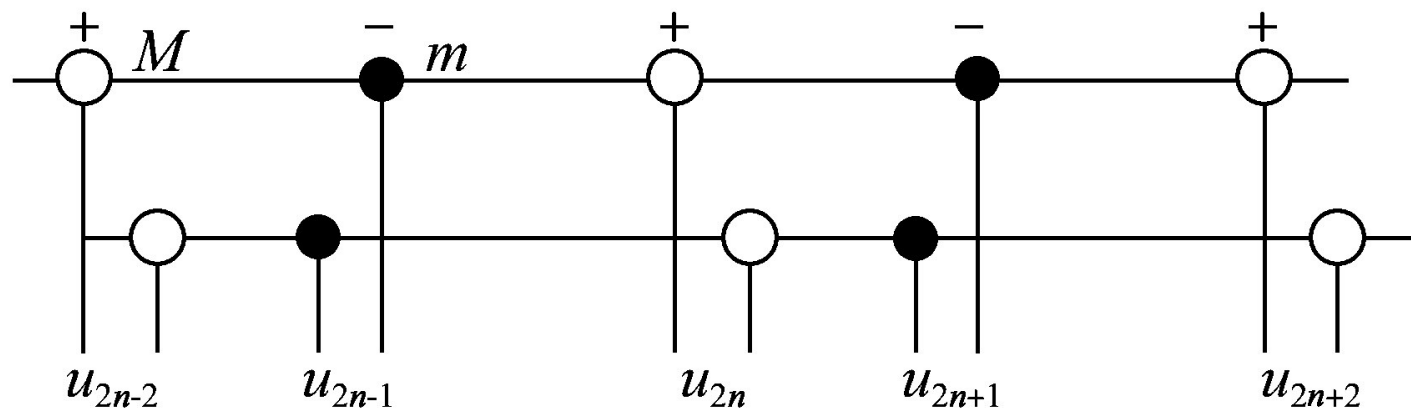
$$\vec{E}_{\text{eff}} = \vec{E} + \frac{1}{3\epsilon_0} \vec{P}$$

\vec{E} : 外加电场

$\vec{P} = \vec{P}_a + \vec{P}_e$: 宏观极化强度

二、位移极化强度

原胞内的电偶极矩:



$$\left. \begin{aligned} \vec{p}_{2n-1,2n} &= \frac{1}{2} q^* (a\vec{i} + \vec{u}_{2n} - \vec{u}_{2n-1}) \\ \vec{p}_{2n+1,2n} &= \frac{1}{2} q^* (a\vec{i} + \vec{u}_{2n+1} - \vec{u}_{2n}) \end{aligned} \right\} \rightarrow \vec{p}_a \approx q^* (\vec{u}_+ - \vec{u}_-)$$

离子位移极化强度: $\vec{P}_a = \frac{\vec{p}_a}{\Delta V} = \frac{q^*}{\Omega} (\vec{u}_+ - \vec{u}_-)$

二、位移极化强度

一个原胞内正负离子受到有效场的作用, 产生的电子位移偶极矩

$$\vec{p}_e = \alpha_+ \vec{E}_{\text{eff}} + \alpha_- \vec{E}_{\text{eff}} = \alpha \vec{E}_{\text{eff}}$$

电子位移极化强度为: $\vec{P}_e = \frac{\alpha}{\Omega} \vec{E}_{\text{eff}}$

综上:

$$\vec{P} = \vec{P}_a + \vec{P}_e = \frac{q^*}{\Omega} (\vec{u}_+ - \vec{u}_-) + \frac{\alpha}{\Omega} \vec{E}_{\text{eff}} \xrightarrow{\vec{E}_{\text{eff}} = \vec{E} + \frac{1}{3\epsilon_0} \vec{P}} \vec{P} = \frac{q^*}{\Omega} (\vec{u}_+ - \vec{u}_-) + \frac{\alpha}{\Omega} \vec{E} + \frac{\alpha}{3\epsilon_0 \Omega} \vec{P}$$

即:

$$\vec{P} = \frac{1}{\Omega} \frac{1}{1 - \frac{\alpha}{3\epsilon_0 \Omega}} (q^* \vec{u} + \alpha \vec{E})$$

二、离子晶体长光学波：运动方程

正离子运动方程：

$$M\ddot{\vec{\mu}}_+ = -2\beta(\vec{\mu}_+ - \vec{\mu}_-) + q^*\vec{E}_{\text{eff}}$$

负离子运动方程：

$$m\ddot{\vec{\mu}}_- = 2\beta(\vec{\mu}_+ - \vec{\mu}_-) - q^*\vec{E}_{\text{eff}}$$

引入有效质量 $\mu = Mm/(M + m)$ 整合上两式：

$$\mu\ddot{\vec{u}} = -2\beta\vec{u} + q^*\vec{E}_{\text{eff}} = \left(-2\beta + \frac{\frac{(q^*)^2}{3\varepsilon_0\Omega}}{1 - \frac{\alpha}{3\varepsilon_0\Omega}} \right) \vec{u} + \frac{q^*}{1 - \frac{\alpha}{3\varepsilon_0\Omega}} \vec{E}$$

二、离子晶体长光学波：运动方程

引入位移变量： $\vec{W} = \sqrt{\frac{\mu}{\Omega}} \vec{u}$

$$\mu \ddot{\vec{u}} = \left(-2\beta + \frac{\frac{(q^*)^2}{3\varepsilon_0\Omega}}{1 - \frac{\alpha}{3\varepsilon_0\Omega}} \right) \vec{u} + \frac{q^*}{1 - \frac{\alpha}{3\varepsilon_0\Omega}} \vec{E} \rightarrow \ddot{\vec{W}} = b_{11} \vec{W} + b_{12} \vec{E}$$

离子振动方程，方程右边第一项是准弹性力，第二项是宏观电场的驱动力。

$$\vec{P} = \frac{1}{\Omega} \frac{1}{1 - \frac{\alpha}{3\varepsilon_0\Omega}} (q^* \vec{u} + \alpha \vec{E}) \rightarrow \vec{P} = b_{21} \vec{W} + b_{22} \vec{E}$$

晶体的极化强度，方程右边第一项表示离子位移引起的极化，第二项是电场附加的极化。

二、离子晶体长光学波：运动方程

发展历史：1950年，黄昆提出了一对既简洁、漂亮又严格的方程，用来描写由正负离子组成的所谓极性晶体或离子晶体的光学振动问题。在离子晶体中，由于正负离子的光学振动涉及离子的电子云极化和畸变，还要考虑长程库仑力对振动的影响，是个非常复杂的微观物理问题，因此在这个问题上，当时学术界未能正确认识和处理长程库仑作用的影响，常常得出错误的结论。由于黄昆提出的方程十分有效地解决了这个固体物理基本问题，该方程也用黄昆的名字命名，称为“黄昆方程”。

从黄昆方程出发可求出离子晶体中光学模的横波和纵波频率，并且诸系数 b_{ij} 均与宏观测量有关。

固体物理先驱：黄昆先生

1945-1948年，在英国布列斯托大学物理系学习，获哲学博士学位。

1948-1951年，任英国利物浦大学理论物理系博士后研究期间建立了“黄方程”，提出了声子极化激元的概念。

1947-1952年，与当代物理学大师、诺贝尔奖获得者M.玻恩合作，共同撰写《晶格动力学理论》专著。

1951年，黄昆回到北京大学任教，历任物理系教授、副主任，半导体教研室主任。

1977年，调任中国科学院半导体研究所所长。



黄昆
(1919—2005)

§ 3. 6 晶格振动热容理论

一、固体的比热容

固体物理学中的比热容一般是指定容比热容

$$C_V(T) = \left(\frac{\partial \bar{E}(T)}{\partial T} \right)_V = C_{Vc}(T) + C_{Ve}(T)$$

实验结果:

- 在室温和更高的温度下, 几乎全部单原子固体的热容接近 $3R$;
- 低温下, 金属的热容与温度的关系为:

$$C_V = \gamma T + AT^3$$

温度不是太低的情况, 忽略电子对比热的贡献。

二、经典理论的困难

■ 杜隆-珀蒂定律：1819年法国科学家P.-L.杜隆和A.T.珀替测定了许多单质的比热容之后，发现大多数固体常温下的定体热容差不多都等于一个与材料和温度无关的常数值 $3R$ 。

■ 理论解释：根据经典统计中的能量均分定理，受简谐力作用的原子像一组谐振子，每个自由度的平均能量为 $k_B T$ ，一摩尔固体中有 N_A 个原子，所以每摩尔晶体晶格的振动动能为

$$\bar{E} = 3N_A k_B T \Rightarrow C_V = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} = 3N_A k_B = 3R$$

困难：无法解释低温下热容随温度的降低而降低。

三、量子论下晶格热容的计算

根据晶格振动的量子理论，子体系的能量本征值：

$$E_j = (n_j + \frac{1}{2})\hbar\omega_j$$

子体系处于概率： $P_{n_j} = e^{-n_j\hbar\omega_j/k_B T} (1 - e^{-\hbar\omega_j/k_B T})$

该子体系的平均能量：

$$\bar{E}_j = \frac{1}{2}\hbar\omega_j + \frac{\hbar\omega_j}{e^{\hbar\omega_j/k_B T} - 1}$$

所有振动模式的平均能量：

$$\bar{E} = \sum_{j=1}^{3N} \frac{1}{2}\hbar\omega_j + \frac{\hbar\omega_j}{e^{\hbar\omega_j/k_B T} - 1}$$

三、量子论下晶格热容的计算

■ 晶体的热容：

$$C_V = \frac{\partial}{\partial T} \sum_{j=1}^{3N} \frac{\hbar \omega_j}{e^{\hbar \omega_j / k_B T} - 1} = k_B \sum_{j=1}^{3N} \left(\frac{\hbar \omega_j}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar \omega_j / k_B T}}{(e^{\hbar \omega_j / k_B T} - 1)^2}$$

对于具体晶体计算出 $3N$ 个简正频率往往是十分复杂的. 在一般讨论时常采用这样两个模型：爱因斯坦模型和德拜模型.

四、爱因斯坦模型

■ 模型要点:

- 忽略色散关系，晶体中所有原子都以相同的频率振动，设为 ω_0 .
- 晶格振动能量是量子化的.
- N 个原子组成，共有 $3N$ 个频率为 ω_0 的振动.

$$C_V = k_B \sum_{j=1}^{3N} \left(\frac{\hbar \omega_0}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar \omega_0 / k_B T}}{(e^{\hbar \omega_0 / k_B T} - 1)^2} = 3N k_B \left(\frac{\hbar \omega_0}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar \omega_0 / k_B T}}{(e^{\hbar \omega_0 / k_B T} - 1)^2}$$

定义爱因斯坦温度： $\hbar \omega_0 = \Theta_E k_B$

$$C_V = 3N k_B \left(\frac{\Theta_E}{T} \right)^2 \frac{e^{\Theta_E / T}}{(e^{\Theta_E / T} - 1)^2}$$

四、爱因斯坦模型

■ 讨论:

- 高温情况 $\theta_E \ll T$: $e^{\theta_E/2T} \approx 1 + \frac{\theta_E}{2T}$

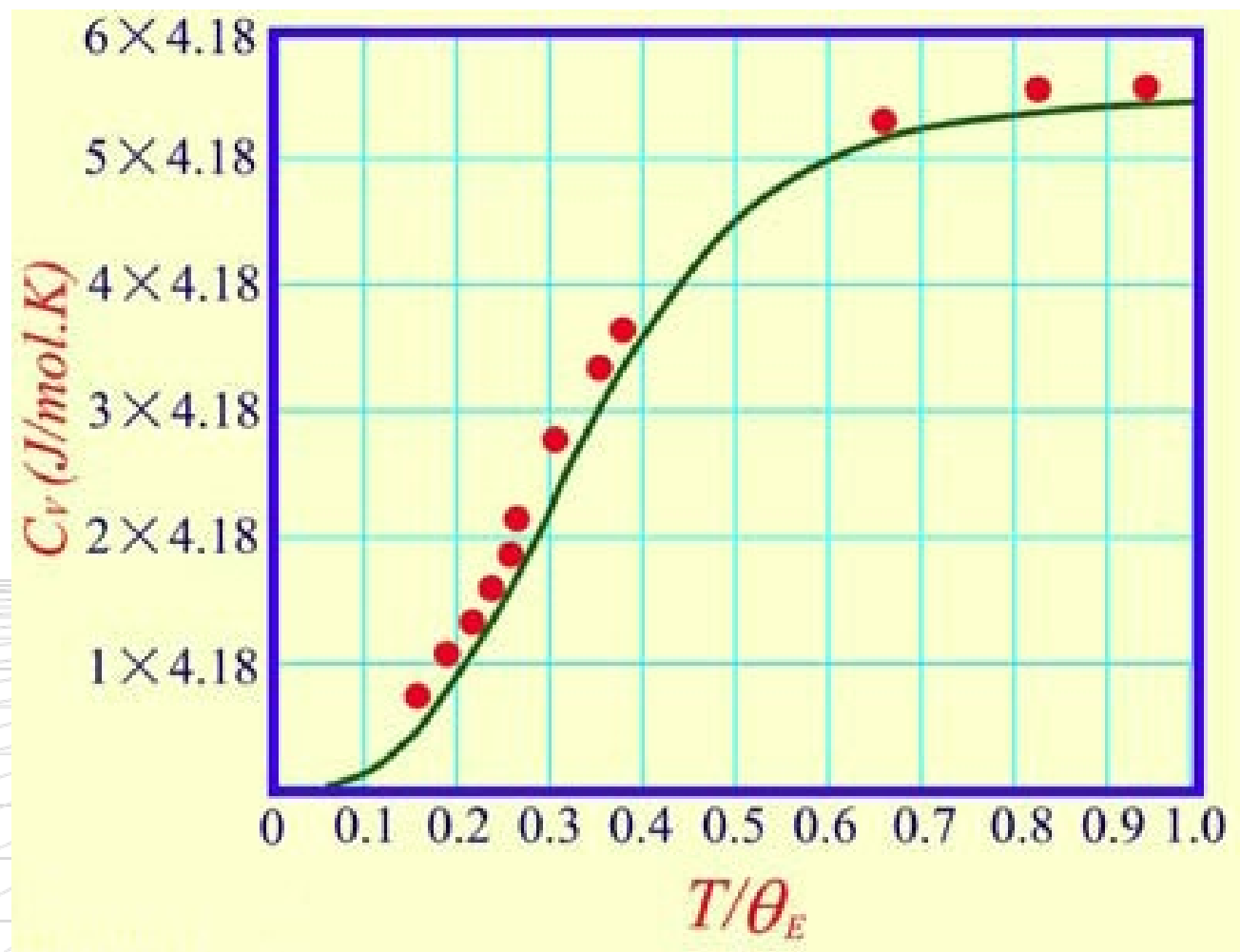
$$\frac{e^{\theta_E/T}}{(e^{\theta_E/T} - 1)^2} = \frac{1}{(e^{\theta_E/2T} - e^{-\theta_E/2T})^2} \approx \frac{1}{\left(\frac{\theta_E}{2T} + \frac{\theta_E}{2T}\right)^2} = \left(\frac{T}{\theta_E}\right)^2$$

$\Rightarrow C_V \approx 3Nk_B$ ——与杜隆—帕替定律一致

- 低温情况 $\theta_E \gg T$: $e^{\theta_E/2T} \gg 1$

$$C_V \approx 3Nk_B \left(\frac{\theta_E}{T}\right)^2 e^{-\theta_E/T}$$

四、爱因斯坦模型



热容按指数形式衰减为零，与实验结果不符。原因：忽略了各格波对热容贡献差异。

五、德拜模型

1912年，德拜改进了爱因斯坦模型，考虑热容应是原子的各种频率振动贡献的总和。他假设晶体是各向同性的连续弹性介质，原子的热运动以弹性波的形式发生，每一个弹性波振动模式等价于一个谐振子，能量是量子化的，并规定了一个弹性波频率上限 ω_D ，称之为德拜频率。

■ 模型要点：

- 用色散关系 $\omega = vq$ 替代晶格格波的色散关系；
- 弹性固体能够以不同的速度传播纵、横两种波。对于每一个振动频率，纵波只有在传播方向的一种振动，横波有两种垂直于传播方向的振动，共三个振动模式。

五、德拜模型

■ 模式密度：单位频率间隔内的振动模式数或状态数，记作 $g(\omega)$ 。

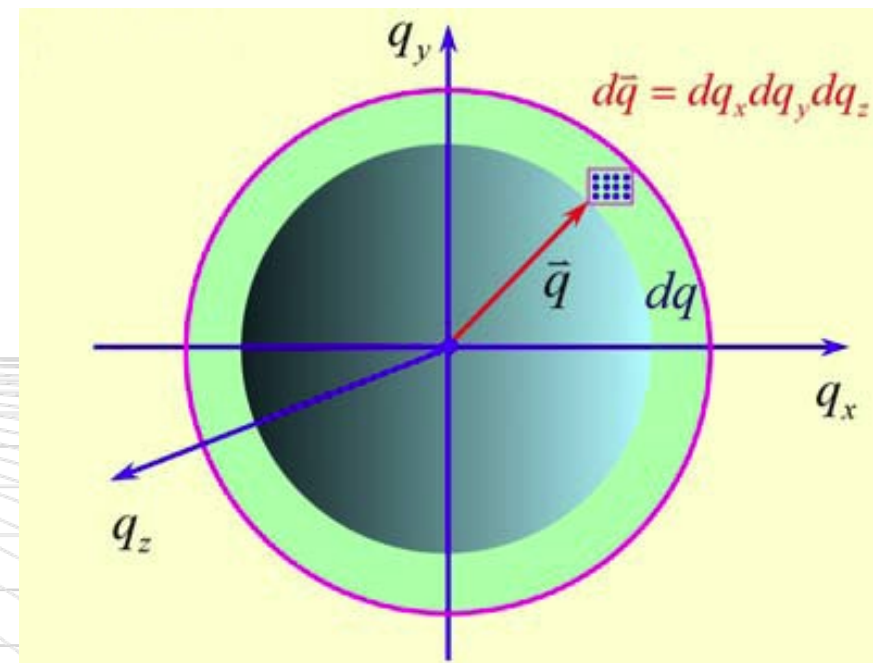
$$g(\omega) = \frac{dn}{d\omega}$$

对于线性色散关系： q 到 $q + dq$ 范围模式总数为

$$dn = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi q^2 dq = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi q^2 \frac{d\omega}{v}$$

纵波的模式密度为：

$$g(\omega) = \frac{dn}{d\omega} = \frac{V\omega^2}{2\pi^2 v^3}$$



五、德拜模型

纵波的模式密度为:

$$g_l(\omega) = \frac{dn_l}{d\omega} = \frac{V\omega^2}{2\pi^2 v_l^3}$$

横波的模式密度为:

$$g_t(\omega) = \frac{dn_t}{d\omega} = \frac{V\omega^2}{2\pi^2 v_t^3}$$

总模式密度为:

$$g_D(\omega) = g_l(\omega) + 2g_t(\omega) = \frac{V\omega^2}{2\pi^2} \left(\frac{1}{v_l^3} + \frac{2}{v_t^3} \right) = \frac{V\omega^2}{2\pi^2} \cdot \frac{3}{v_p^3}$$

五、德拜模型

$$C_V = k_B \sum_{j=1}^{3N} \left(\frac{\hbar \omega_j}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar \omega_j / k_B T}}{(e^{\hbar \omega_j / k_B T} - 1)^2} = \int_0^\infty k_B \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar \omega / k_B T}}{(e^{\hbar \omega / k_B T} - 1)^2} g_D(\omega) d\omega$$

——变换求和为对频率的积分！

确定积分上限：假定频率大于 ω_D 的波不存在。

$$C_V = \int_0^{\omega_D} k_B \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar \omega / k_B T}}{(e^{\hbar \omega / k_B T} - 1)^2} g_D(\omega) d\omega$$

问题： ω_D 如何确定？是否有条件限制？

五、德拜模型

$$C_V = \int_0^{\omega_D} k_B \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar \omega / k_B T}}{(e^{\hbar \omega / k_B T} - 1)^2} \frac{V \omega^2}{2\pi^2} \cdot \frac{3}{v_p^3} d\omega$$

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

$$C_V = \frac{3V k_B^4 T^3}{2\pi^2 \hbar^3 v_p^3} \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$

五、德拜模型

■ 讨论:

- 高温情况 $\theta_D \ll T$: $e^x \approx 1 + x$

$$C_V = \frac{3V k_B^4 T^3}{2\pi^2 \hbar^3 v_p^3} \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^4}{(e^{x/2} - e^{-x/2})^2} dx \approx 9Nk_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \int_0^{\theta_D/T} x^2 dx = 3Nk_B$$

- 低温情况 $\theta_D \gg T$: $e^x \approx 1 + x$

$$C_V = 9Nk_B \cdot \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \cdot \int_0^\infty \frac{x^4 \cdot e^x}{(e^x - 1)^2} dx = \frac{12\pi^4 Nk_B}{5} \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3$$

—德拜 T^3 定律

五、德拜模型

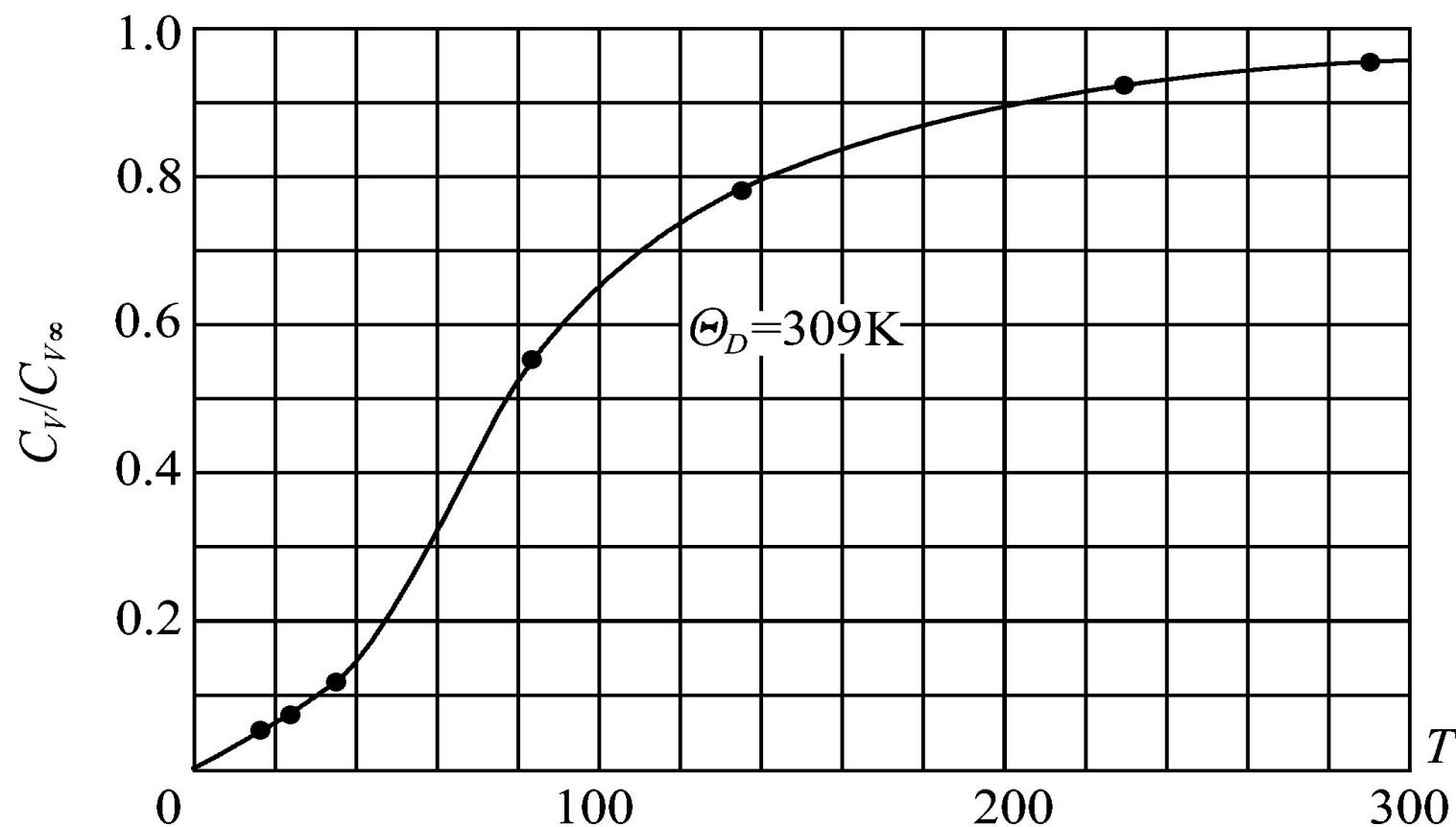
格波总数:

$$\int_0^{\omega_D} g_D(\omega) d\omega = \int_0^{\omega_D} \frac{3V\omega^2}{2\pi^2 v_p^3} d\omega = 3N$$

截止频率:

$$\omega_D = (6\pi^2 N/V)^{1/3} v_p$$

五、德拜模型

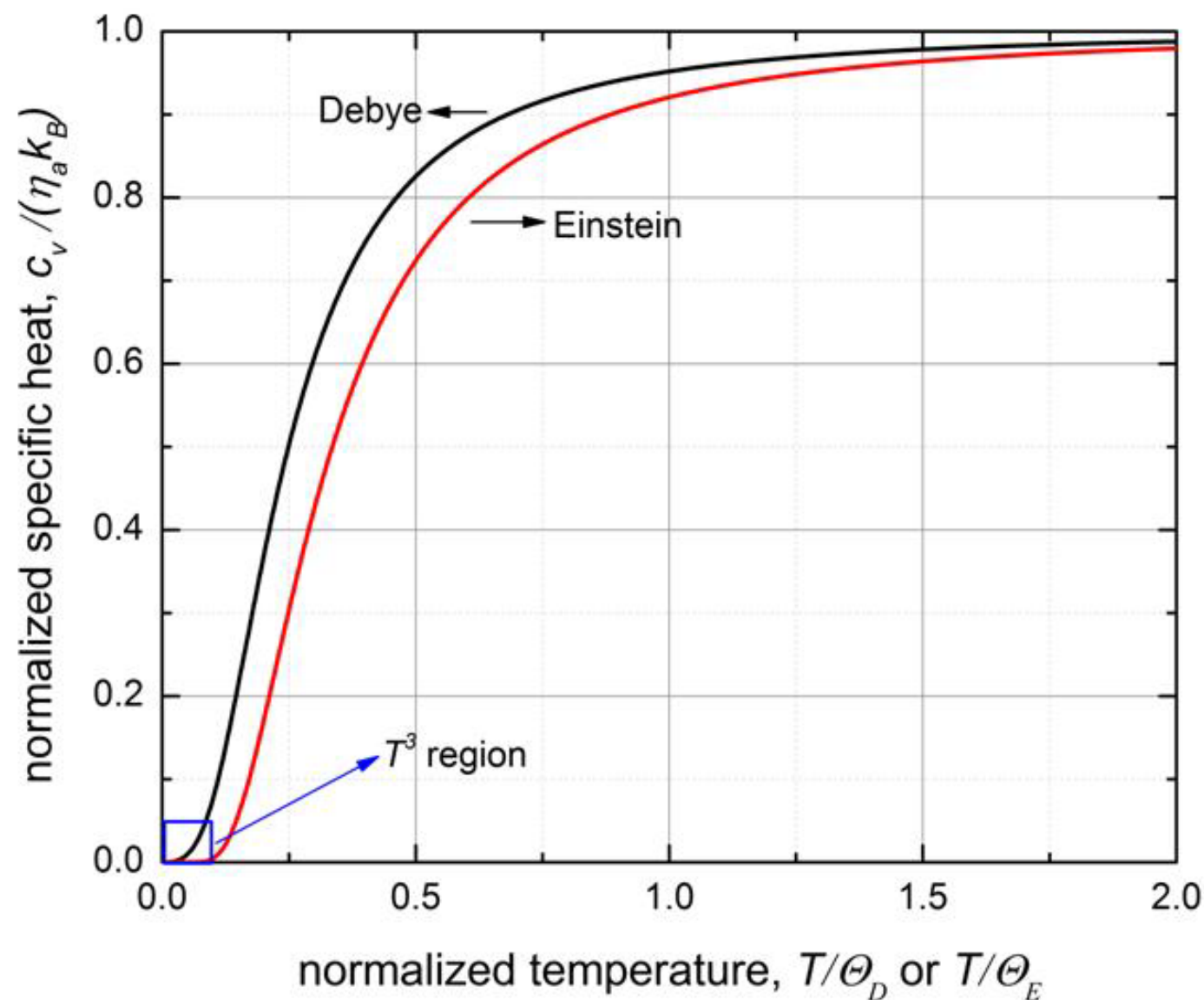


德拜模型考虑了格波的频率分布，把晶体当作弹性连续介质来处理。在低温情况下，被激发的格波频率也越低，对应的波长越长，因此把晶体视为连续弹性介质的近似程度越好，德拜模型越接近实际情况。

六、爱因斯坦模型与德拜模型的比较

爱因斯坦模型：把振动的独立谐振。这个模型抓住了：量上不够精确。

德拜模型：把晶体波，并用一个最高频率分布具有晶体模型与简单晶体的



能在空间做自由。量是量子化的。容温度关系，定

句同性介质中的。拜理论所引入的。的测量外，这个

七、晶格振动模式密度

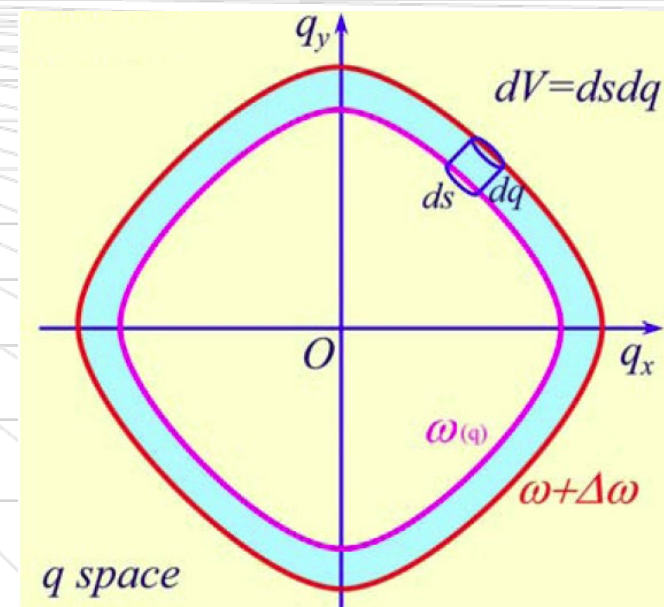
晶格振动模式密度:

$$g(\omega) = \lim_{\Delta\omega \rightarrow 0} \frac{\Delta n}{\Delta\omega} = \frac{dn}{d\omega}$$

Δn 表示在 $\omega \sim \omega + \Delta\omega$ 间隔内晶格振动模式的数目, 在 q 空间中, 根据 $\omega(q) = \text{常数}$ 作出等频面, 那么在等频面 $\omega \sim \omega + \Delta\omega$ 之间的振动模式的数目为

$$dn = \frac{V}{(2\pi)^3} \times (\omega \sim \omega + d\omega \text{ 的等频率面间的体积})$$

$$= \frac{V}{(2\pi)^3} \int ds dq$$



七、晶格振动模式密度

由于: $d\omega = |\nabla_q \omega(q)| dq$

$$dn = \frac{V}{(2\pi)^3} \int dS dq = \left[\frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{dS}{|\nabla_q \omega|} \right] d\omega$$

模式密度的一般计算表达式

$$g(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{dS}{|\nabla_q \omega(q)|}$$

七、晶格振动模式密度

举例：分析 $\omega = cq^2$ 的模式密度。

由色散关系可知，在 q 空间等频率面为球面，半径为： $q = \sqrt{\frac{\omega}{c}}$

在球面上 $|\nabla_q \omega(q)| = \left| \frac{d\omega}{dq} \right| = 2cq = 2c\sqrt{\frac{\omega}{c}}$

所以：

$$g(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{ds}{|\nabla_q \omega|} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\nabla_q \omega|} \int ds = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{2cq} 4\pi q^2 = \frac{V}{(2\pi)^2} \frac{1}{c^{\frac{3}{2}}} \omega^{\frac{1}{2}}$$

三维情况

七、晶格振动模式密度

对于二维情况, q 空间其等频面为一个圆, 半径为: $q = \sqrt{\omega/c}$

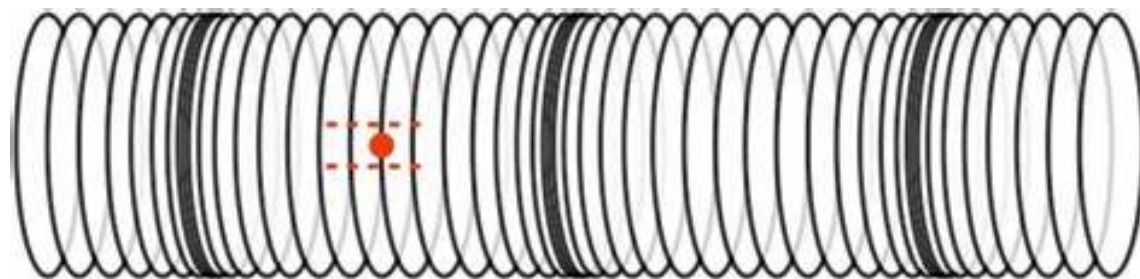
在圆上 $|\nabla_q \omega(q)| = \left| \frac{d\omega}{dq} \right| = 2cq = 2C \sqrt{\frac{\omega}{c}}$

所以:

$$g(\omega) = \frac{A}{(2\pi)^2} \int \frac{dL}{|\nabla_q \omega(q)|} = \frac{A}{(2\pi)^2} \frac{2\pi q}{2Cq} = \frac{A}{4\pi C}$$

思考: 一维情况如何?

补充知识：弹性波



一维波动方程:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{Y}{\rho} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

形式解:

$$u = Ae^{i(\omega t - qx)}$$

色散关系:

$$\omega = \sqrt{\frac{Y}{\rho}} q$$

The End!