上讲回顾：固体磁性的微观解释

- 在原子电子层次解释了原子磁矩←**Hund**定则在晶体中的应用
- 原子磁矩相互作用导致磁有序←**Heisenberg**模型的应用

本章目的(能带论中与实验不符的问题)

- 能带理论成功研究了电子运动→在周期性势场下运动的电子受一定限制→能带，能隙
- 用准经典方法，研究了电子在外场下的运动
  - * 电子速度不随时间变化，无散射机制，电流永不衰减→与实验不符
- 电子气模型中，金属比热？绝缘体？
- 问题在哪里？→绝热近似
  - * 原子在平衡位置附近振动→破坏电子势场的周期性
  - * 原子振动→晶体热学性质
- 本章的任务就是研究晶体中原子的振动
  - * 晶格振动的能量子→声子，代表了晶体中原子的整体振动→声子对晶体电子作用则是电阻的根源

本章具体内容

- 描写晶体中原子热振动(简谐)
  - * 经典模型——唯象模型(假定力常数已知)
  - * 量子模型——声子
- 原子振动总能量
  - * 热运动动能
  - * 比热
- 非简谐热振动
  - * 热膨胀、热传导
  - * 声子相互作用

本讲目的：晶体中原子的简谐振动

- 如何处理晶体中原子的简谐振动？
  - * 绝热近似→周期性势场导致电导率无限大！
    - \# 究其原因是周期势的偏离，因为原子并不固定在平衡位置
  - * 困难
    - \# 如何处理10^{29}次方个原子/立方米的问题？

第24讲、晶格振动的经典理论

1. 静止晶格模型的修正
2. 基本假定
3. 一维单原子链的晶格振动
4. 一维双原子链的晶格振动
5. 三维体系的晶格振动

- 附录：连续介质弹性波

1、静止晶格模型的修正

- 绝热近似

$$(\hat{\mathrm{H}}_{电子}+\hat{\mathrm{H}}_{核}+\hat{\mathrm{H}}_{电子\text{-}核})\Psi(\{r_i\},\{R_J\})=E\Psi(\{r_i\},\{R_J\})$$

- 基本事实：原子核比电子重得多
- 绝热近似：考虑电子运动时可不考虑原子核得运动。原子核固定在它的瞬间位置。

$$\cancel{\hat{\mathrm{H}}_{核}=\sum_J \frac{\hat{\mathrm{P}}_J^2}{2M_J}+\frac{1}{2}\sum_{J,J'}V_{核}(R_J-R_{J'})}$$

$$R_J \longrightarrow R_J^0$$

$$\left(\hat{\mathrm{H}}_{电子}+\hat{\mathrm{H}}_{核}+\hat{\mathrm{H}}_{电子-核}\right)\Psi(\{r_i\},\{R_J\})\Rightarrow(\hat{\mathrm{H}}_{电子}+\hat{\mathrm{H}}_{电子-核})\Psi(\{r_i\},\{R_J^0\})$$

- 静止晶格模型的适用范围

  *由电子决定的性质，一般都能较好地描述

静止晶格模型，与真实的情况有哪些差别？差别有多大？

静止晶格模型的局限

- 经典理论：只有在绝对温度零度，原子才是静止的
- 量子理论：即使在绝对零度，根据测不准原理，静止模型也不成立，有所谓零点振动
- 只要原子不是无限重，或没有无限大的力限制原子运动，静止晶格模型都只是一种近似

虽然我们一直跟踪的是电导率的问题

除了电导率外，静止晶格模型，还会导致哪些与实验不符的结果？

静止晶格模型的困难

- 电子在晶体中运动无阻尼机制
  - * 如晶体中原子固定在平衡位置，晶体具有严格的周期性，根据**Bloch**定理，电子在晶体中运动无散射、无阻尼机制，电导率“无限大”
- 绝缘体
  - * 如果对绝缘体采用静止晶格模型，几乎没有自由度可以被用来描写绝缘体丰富的、不同的物理性质。

哪些性质受此影响？

- 热平衡性质
  - * 比热：静止晶格模型只计入电子贡献，$c_V \sim T$，但只有在**10K**时才能明显地观察到；更高温：$c_V \sim T^3$
  - * 热膨胀：物质的密度与温度有关。但在静止晶格模型中，显然没有考虑
- 输运性质
  - * 金属的输运性质基本上取决于电子结构，但金属还有相当一部分的输运性质、绝缘体的输运性质只有考虑了晶格振动才能被很好地解释
  - * 电子弛豫时间：静止晶格模型，与温度无关并且是无限长的
  - * **Wiedemann-Franz**定律：在中等温度失效，原因就是需要知道电子被原子的散射

哪些性质受此影响？

- 输运性质
  - 超导：传统超导的解释是晶格振动在电子对上的有效作用
  - 绝缘体中电子是相对惰性的，所有电子都处于填满的能带中，难以参与输运过程，但并不一定是绝热体？与绝缘体的热传导与金属的输运性质的机制不同——主要靠原子自由度导热。
  - 声音传播：绝缘体还可以传播声音，但在静止晶格模型里，绝缘体也是“绝声体”
- 晶格振动也是电子与晶体相互作用的基础
  - 金属电导→电子受晶格振动（声子）的作用、散射

必须考虑这种运动！那么，如何描写晶体中原子的热振动？

2、基本假定

$R_J \longleftarrow R_J^0$ 这时不考虑电子的运动，**H**就一项

$$\hat{\mathrm{H}}_{核} = \sum_J \frac{\hat{\mathrm{P}}_J^2}{2M_J} + \frac{1}{2}\sum_{J,J'} V_{核}(R_J - R_{J'})$$

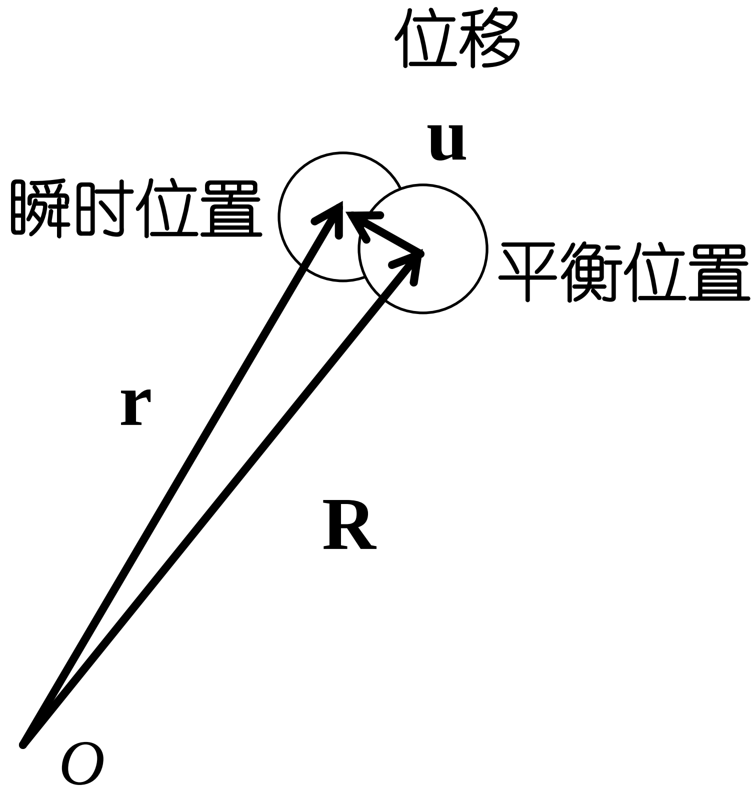
$$R_J^0 - R_{J'}^0 = R_{J''}^0$$

$$R_J = R_J^0 + u_J$$

- ***u_J*是偏离平衡位置的位移**
  - * 但假定原子在平衡位置附近只有很小的的偏离
  - * 并且假定平衡位置**R^0**仍呈周期性排列

只有偏离平衡位置很小的位移

- **R**是原子的平衡位置，具有周期性
  - * 但在任一时刻有一远远小于原子间距的偏离平衡位置的位移**u**
    - # **u** <<**R**



用量子还是经典处理？

估计量子还是经典的判据

- 粒子的**de Broglie**波长与动量成反比，即 $\lambda = \dfrac{h}{mv}$

  ＊ 由 $\dfrac{1}{2}mv^2 = \dfrac{3}{2}k_B T$ ，波长与T的平方根成反比

- 当粒子的波长与粒子间的平均距离a可以比拟时，就会显示量子效应。由 λ =a，可以估计简并温度作为判据

$$T_{量子简并} = \frac{h^2}{3mk_B a^2}$$

- 原子间平均距离是**2~3A**，电子质量**~10-30kg**，原子质量**~ 10-27kg**

$$T_{电子量子简并} \sim 10^5\mathrm{K} \qquad T_{原子量子简并} \sim 50\mathrm{K}$$

如何考虑原子间的相互作用？

简谐近似

- 简谐近似——原子间的力可以看作位移的线性函数，因为原子位移本身很小
  - * 两原子间相互作用势能展开后，零次项是常数，一次项为零，只保留位移的二次项→简谐近似

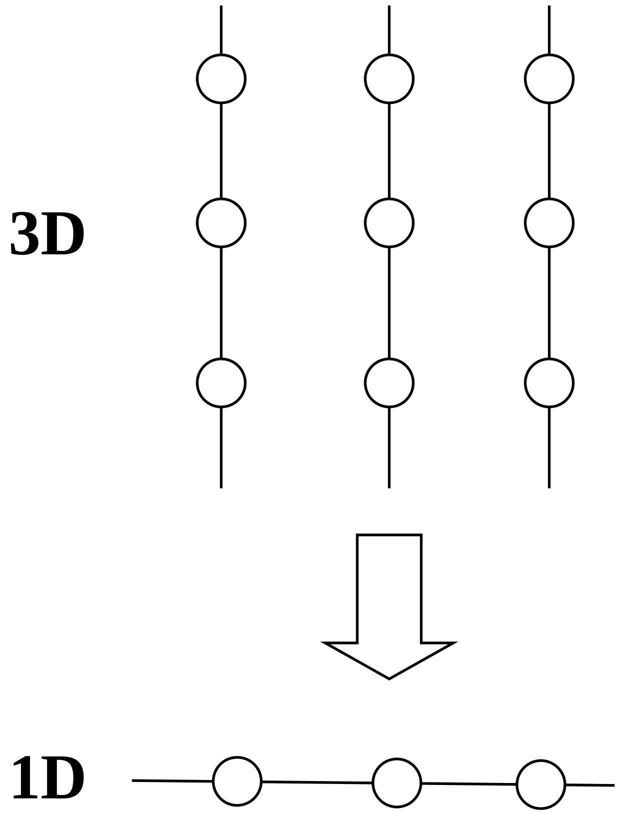
$$V(a+\delta)=V(a)+\left(\frac{dV}{d\delta}\right)_0\delta+\frac{1}{2}\left(\frac{d^2V}{d\delta^2}\right)_0\delta^2+\cdots$$

$$\approx V(a)+\frac{1}{2}\left(\frac{d^2V}{d\delta^2}\right)_0\delta^2$$

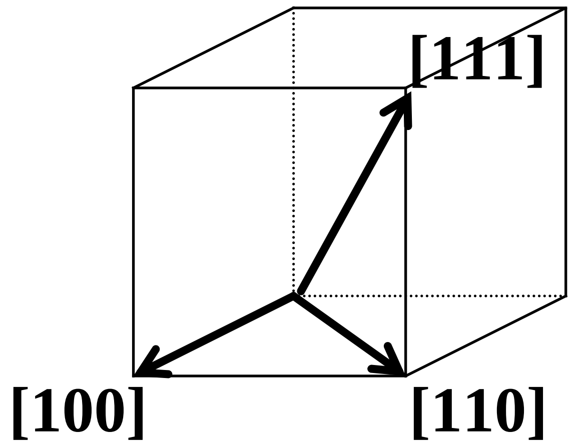
$$F=-\frac{dV}{d\delta}=-\left(\frac{d^2V}{d\delta^2}\right)_0\delta=-\beta\delta$$

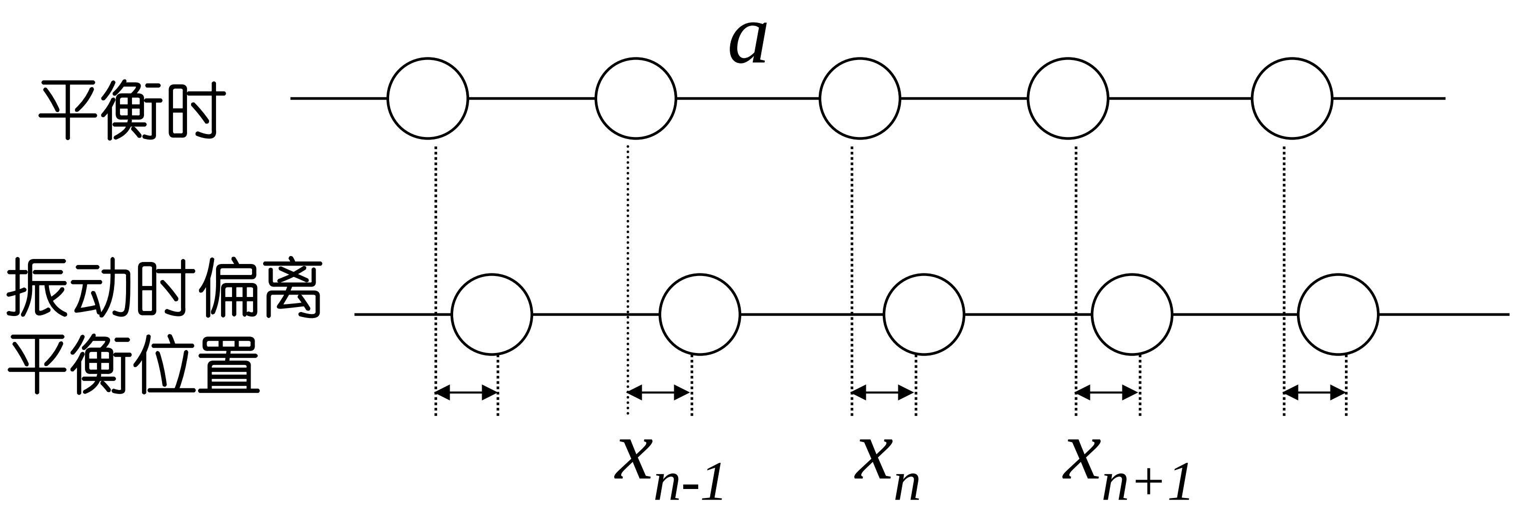
  - * 假定力常数 β 是已知的←唯象理论

3、一维单原子链的晶格振动



- 一维振动：比如在立方晶体中，当波沿着[100], [110], [111]之一传播时，整个原子平面作同相位运动，或平行或垂直与波矢方向，可以看作一维的振动，可用单一坐标来描述离开平衡位置的位移





原子平衡位置 $r_n=na$，x_n是相对于平衡位置的偏离

势能对位移求导后可得力与位移成线性关系→简谐近似

$$F=-\frac{dV}{d\delta}=-\beta\delta$$

- **只考虑最近邻原子作用，看第*n*个原子受力**

  * 注意：受力与两个原子相对于平衡位置的偏离有关

  * 写出关于第*n*个原子的运动方程

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

也可从简谐势能得到运动方程

- 简谐势能为

$$U^{简谐}=\frac{1}{2}\beta\sum_m\left[x_{m+1}-x_m\right]^2$$

- 求力，注意：求和号中任一原子序号将出现两次

$$F=-\frac{\partial U^{简谐}}{\partial x_n}=\beta\left(x_{n+1}-x_n\right)+\beta\left(x_{n-1}-x_n\right)$$

$$m\frac{d^2x_n}{dt^2}=-\frac{\partial U^{简谐}}{\partial x_n}=\beta\left(x_{n+1}-x_n\right)+\beta\left(x_{n-1}-x_n\right)$$

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

这是二阶常微分方程，尝试解为振动解。因平移周期性，根据**Bloch**定理，不同原子位移仅相差一与波矢**q**有关的相因子

$$x_n(t)=x_0(t)e^{iqna}=Ae^{-i\omega t}e^{iqna}$$

x是相对于平衡位置的偏离

q: 波矢　　　　波长 $\lambda=\frac{2\pi}{q}$

na: 第**n**个原子平衡位置的坐标

- 所有原子除振幅差一相因子外，以同一方式 ω**(q)**振动

$$x_n(t) = x_0(t)e^{iqna} = Ae^{-i\omega t}e^{iqna}$$

思考题：有没有同学有质疑，尝试解为什么取这样的形式？

振动方程的尝试解是根据**Bloch**定理得到。但**Bloch**定理是量子力学中，由**H**的平移对称性得到的。但现在只是一个经典力学体系，如不用**Bloch**定理，如何确定尝试解的形式？

- 将尝试解代入运动方程

$$m\frac{d^2x_n}{dt^2}=\beta\left(x_{n+1}+x_{n-1}-2x_n\right)$$

- 得

$$-m\omega^2Ae^{i(qna-\omega t)}=-\beta(2-e^{iqa}-e^{-iqa})Ae^{i(qna-\omega t)}$$

$$=-2\beta(1-\cos qa)Ae^{i(qna-\omega t)}$$

- 即 $$-m\omega^2=-2\beta(1-\cos qa)$$

$$\omega(q)=\sqrt{\frac{2\beta(1-\cos qa)}{\mathrm{m}}}=2\sqrt{\frac{\beta}{m}}\left|\sin\frac{qa}{2}\right|$$

$$\omega(q)=\omega(q+K)$$

$$\omega(q)=\sqrt{\frac{2\beta(1-\cos qa)}{\mathrm{m}}}=2\sqrt{\frac{\beta}{m}}\left|\sin\frac{qa}{2}\right|$$

这是晶格振动中最重要的关系，色散关系。地位相当于能带中*E*~k关系。得到这个关系的过程(要求能独立推导)

1. 建立运动方程，要注意力与两个原子的位移有关；
2. 尝试解，注意包含周期结构的相因子；
3. 解运动方程

*q*的取值？

$$x_n(t) = x_0(t)e^{iqna} = Ae^{-i\omega t}e^{iqna}$$

- 循环周期性边界条件要求

$$e^{iqNa} = 1$$

- 相当于

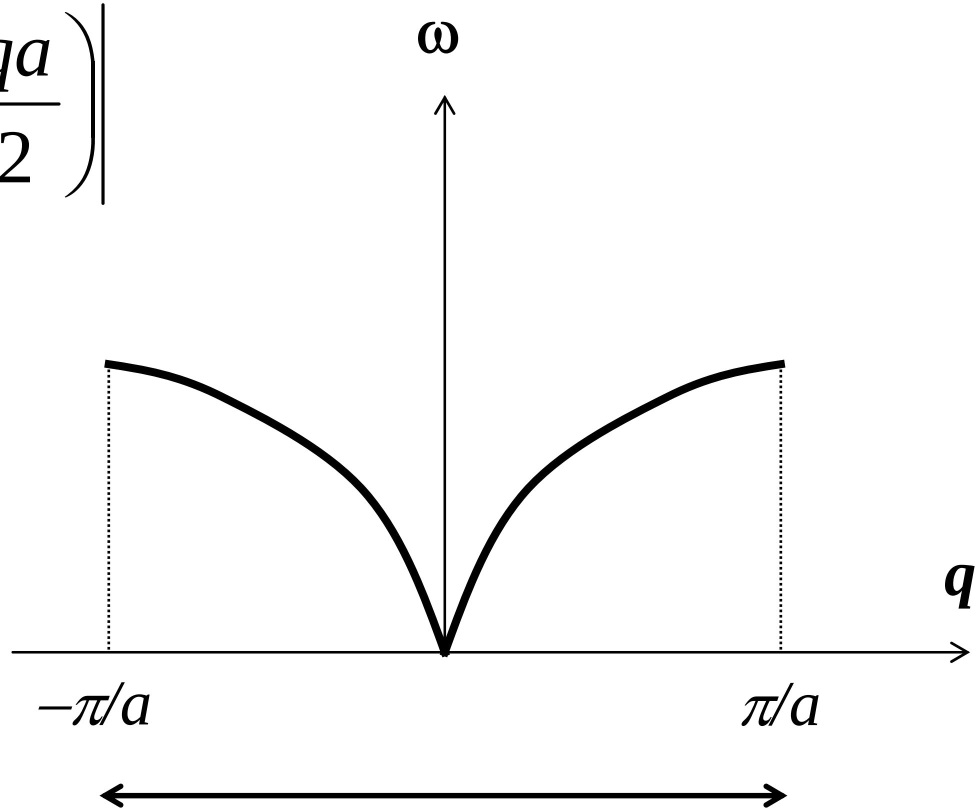
$$q = \frac{2\pi}{Na} l,\ \ l\text{取整数}$$

- 与电子的情况相似，不等价的***q***可以限制在第一**Brillouin**区，倒空间周期性，***q***与***q*+K**等价
  - ＊ 这与连续介质中的弹性波的传播有本质的区别
  - ＊ 在连续介质中，$a \rightarrow 0$，$q_{max} \rightarrow \pm\infty$
- **-*N*/2<*l*<=*N*/2**，***q***共有***N***个取值→***N***种振动模式

色散关系 (dispersion)

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

- 频率与波矢的关系称为色散关系
  - * 地位类似于能带结构，***E*(k)**关系
  - * 只有这段频率的波才能在晶体中传播

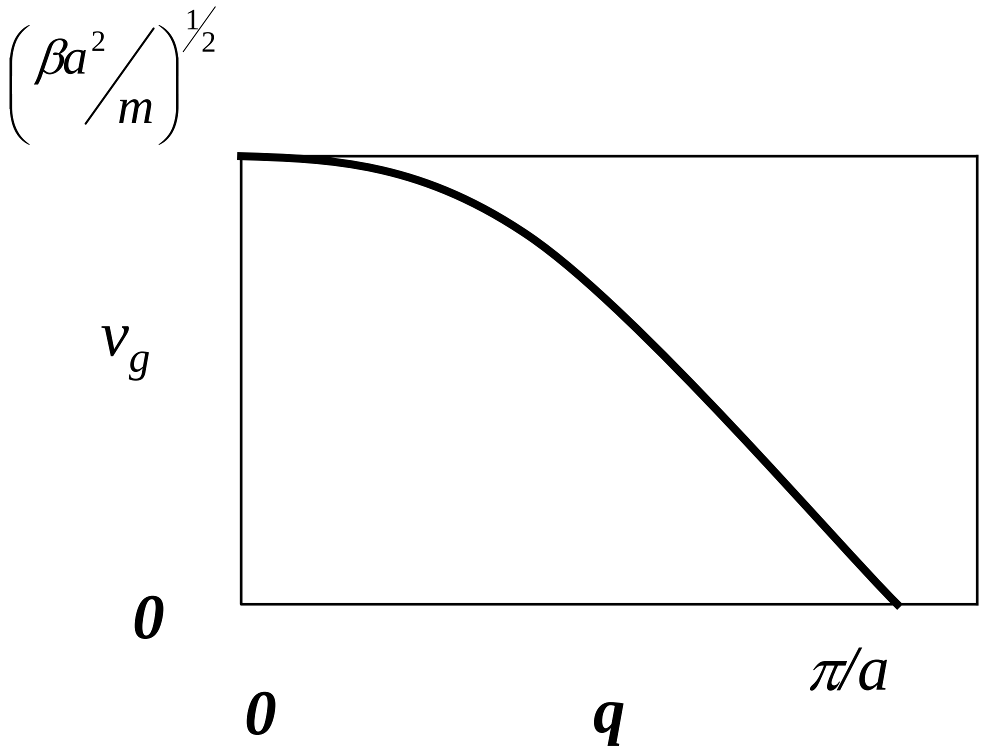


一维布里渊区

在B区边界 $\omega_{\max} = 2\left(\frac{\beta}{m}\right)^{1/2}$

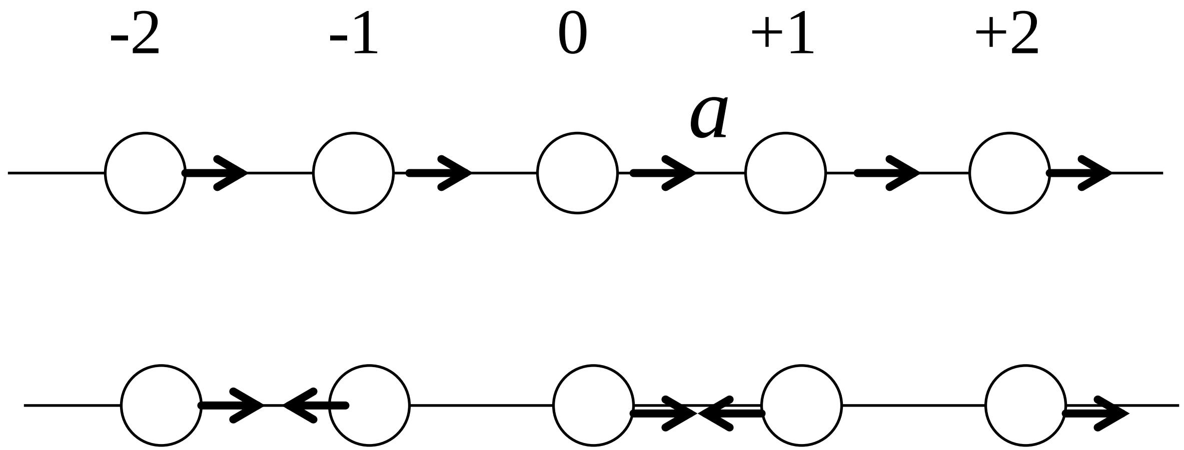
- 在B区边界，ω最大，大于这个频率的波不能传播
- 满足Bragg反射条件，群速为零
  - * 这时，相邻原子振动位相相反，这个波既不向右也不向左运动，而是通过来回的反射，形成驻波

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



Displacement patterns

$$x_n = Ae^{iqna}e^{-i\omega t}$$



q=0 $\qquad x_n = Ae^{-i\omega t}$

q=π/a $\qquad x_n = Ae^{in\pi}e^{-i\omega t}$

在**B**区边界，相邻原子振动位相相反，这个波既不向右也不向左运动，不能在晶格中传播，而是通过来回的反射，形成一个驻波

B区中心Γ点——长波极限

- 即当qa<<1，（也称长波极限）频率与波矢成线性关系

$$\omega(q) \approx a\sqrt{\frac{\beta}{m}}|q| \propto q$$

  * 与q成正比，这是一维弹性波特征

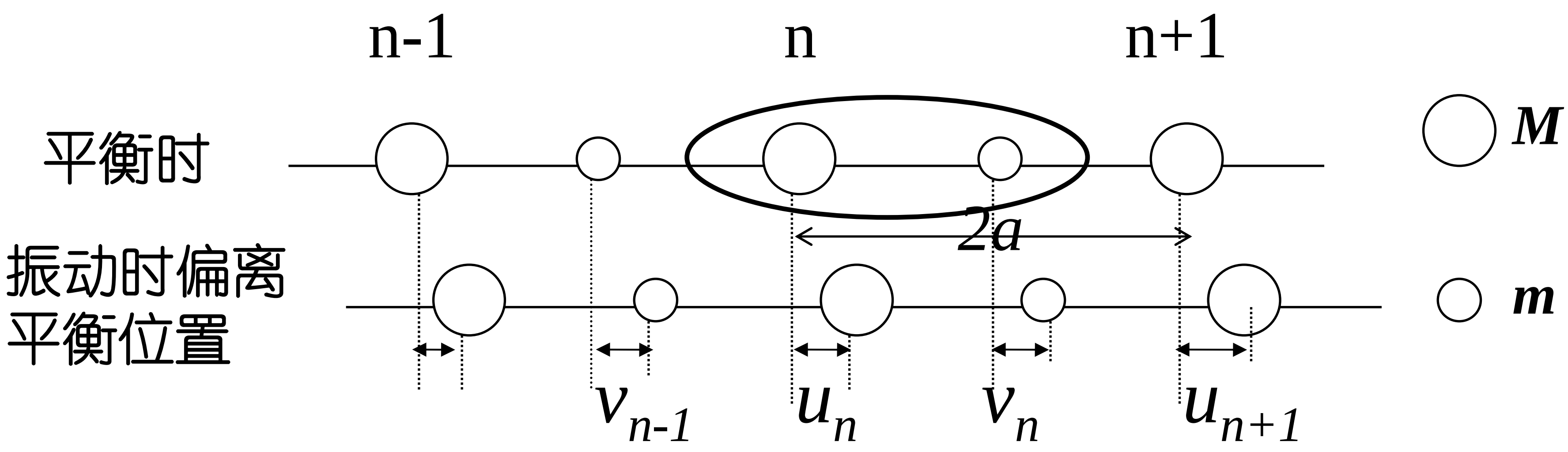
$$v_g = \frac{d\omega}{dq} = a\sqrt{\beta / m}$$

- 为声速。这是因为，qa<<1时，波长λ比晶格常数a大得多。晶体可近似地看成连续介质，即连续介质的弹性波
  * 因此把q→0时，ω→0这支色散关系称为声学支
  * 其振动模式称为声学模

前面是纵向振动，就是原子位移方向平行于波矢方向

思考：一维单原子链的横向振动？

4、一维双原子链的晶格振动



$$M\frac{d^2u_n}{dt^2}=\beta(v_n-u_n)+\beta(v_{n-1}-u_n)$$

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

$$M\frac{d^2u_n}{dt^2}=\beta(v_n-u_n)+\beta(v_{n-1}-u_n)$$

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

$$u_n=Ae^{i[(2n)aq-\omega t]}$$

$$v_n=Be^{i[(2n+1)aq-\omega t]}$$

?

$$\Downarrow$$

$$-M\omega^2A=\beta(e^{iqa}+e^{-iqa})B-2\beta A$$

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

$$\Downarrow$$

$$(2\beta-M\omega^2)A-2\beta\cos qaB=0$$

$$-2\beta\cos qaA+(2\beta-m\omega^2)B=0$$

本征值方程

本征值方程

$$(2\beta - M\omega^2)A - 2\beta\cos qaB = 0$$
$$-2\beta\cos qaA + (2\beta - m\omega^2)B = 0$$

$$\Downarrow$$

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

$$\Downarrow$$

$$\omega^2(q) = \frac{\beta}{Mm}\left\{(M+m) \pm \left[m^2 + M^2 + 2Mm\cos(2qa)\right]^{\frac{1}{2}}\right\}$$

$$\omega^2(q)=\frac{\beta}{\mu}\left\{(1\pm\left[1-4\frac{\mu^2}{Mm}\sin^2 qa\right]^{\frac{1}{2}}\right\}$$

$$\mu=\frac{Mm}{M+m}$$

约化质量

长波近似

$$q\to 0$$

边界

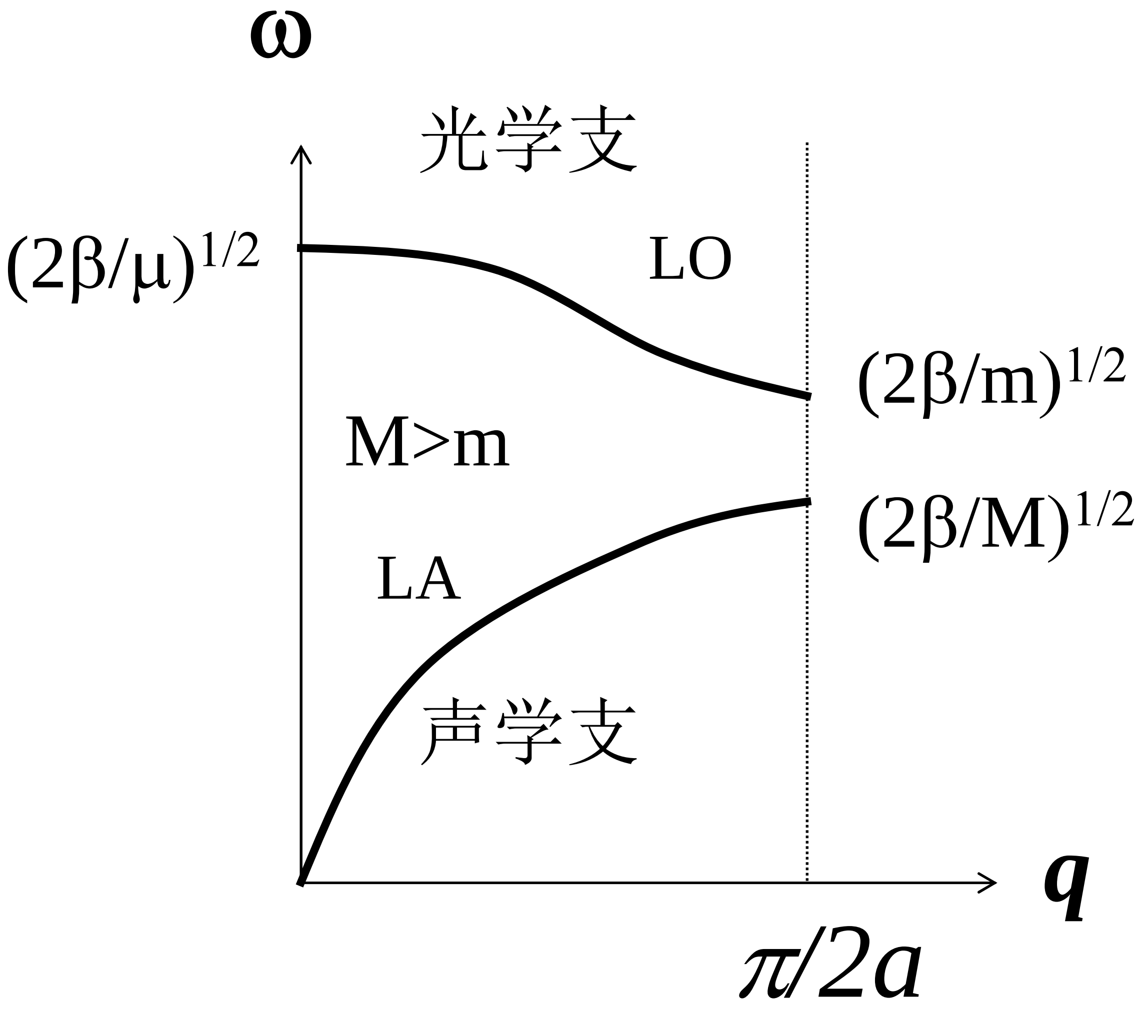
$$q=\pi/2a$$

$$\omega_-=\omega_{声学}(q)=\left(\frac{2\beta}{(M+m)}\right)^{1/2}qa$$ 线性

$$\omega_+=\omega_{光学}(q)=\sqrt{\frac{2\beta}{\mu}}$$ 常数

$$\omega_-=\omega_{声学}(q)=\sqrt{\frac{2\beta}{M}}$$

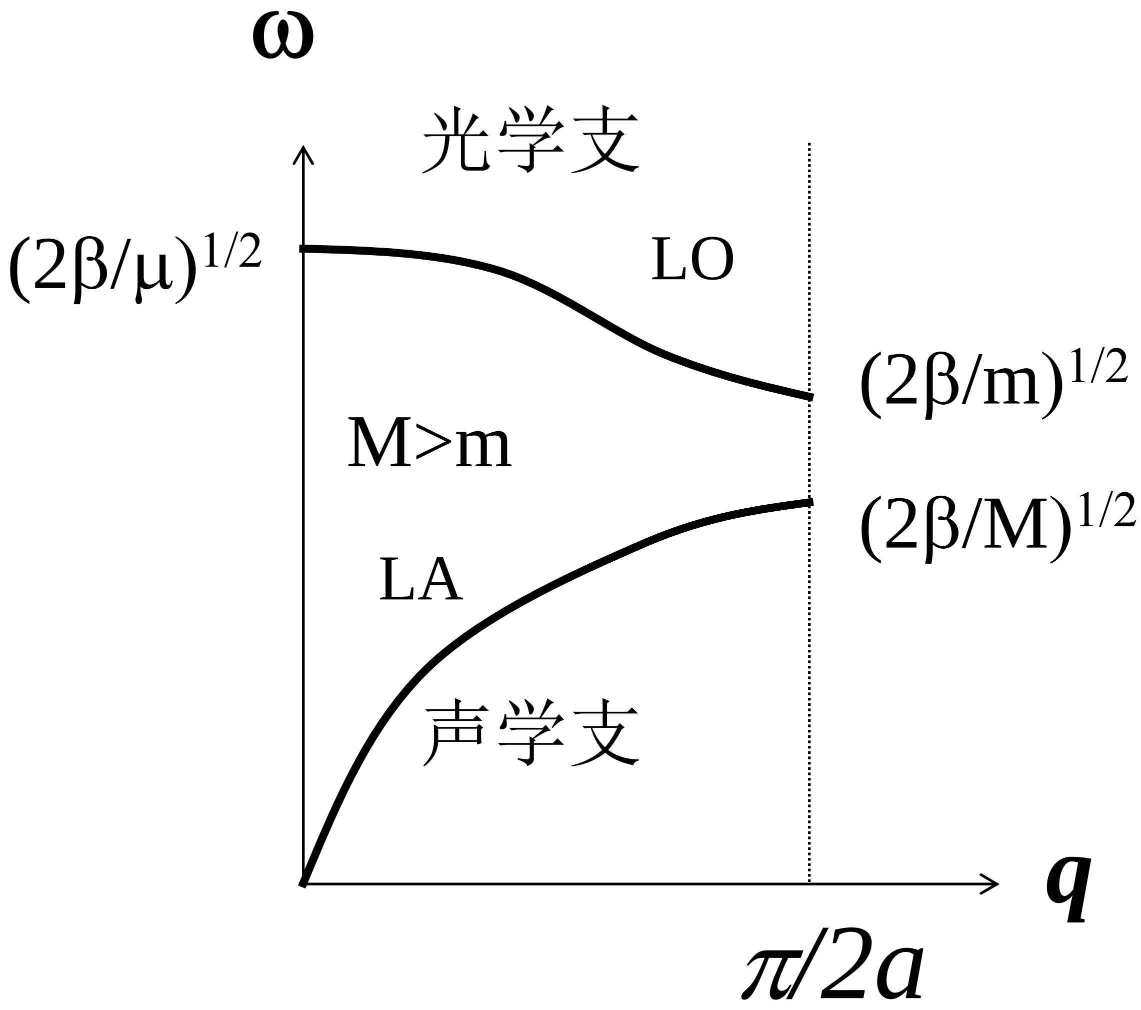
$$\omega_+=\omega_{光学}(q)=\sqrt{\frac{2\beta}{m}}$$



光学支与声学支之间有频率隙

课堂讨论题

- 如右图的振动的频谱关系，是光学支态密度大还是声学支态密度大？一维的情况如何？高维的呢？为什么？



振幅之比——声学支

- 由

$$(2\beta - M\omega^2)A - 2\beta\cos qaB = 0$$

$$-2\beta\cos qaA + (2\beta - m\omega^2)B = 0$$

- 可得

$$\frac{A}{B} = \frac{2\beta - m\omega^2}{2\beta\cos(qa)} > 0$$

- 因为对声学支，有 $\omega_{\max}(q) = \sqrt{\dfrac{2\beta}{M}}$

- 所以振幅之比大于零，这表示相邻不同原子的振幅都有相同的方向，代表质心的振动

振幅之比——光学支

- 由
$$(2\beta - M\omega^2)A - 2\beta\cos qaB = 0$$
$$-2\beta\cos qaA + (2\beta - m\omega^2)B = 0$$

- 可得
$$\frac{A}{B} = \frac{2\beta\cos(qa)}{2\beta - M\omega^2} < 0$$

- 因为对光学支 $\omega_{\min}(q) = \sqrt{\dfrac{2\beta}{m}}$

- 所以振幅之比小于零，这表示相邻原子的振幅方向相反的相对振动。如是离子，能被电磁波激发——所以称为光学波

长波极限

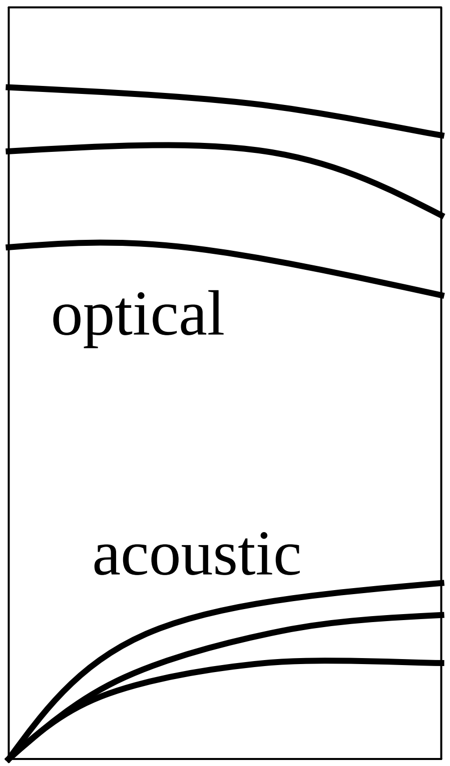
$$\frac{B}{A}=\frac{2\beta-M\omega^2}{2\beta\cos(qa)}<0$$

- 长波极限：**q~0**时，**cos(qa)~1**，而 $\omega^2_{光学}=\dfrac{2\beta}{\mu}$
- 所以 $\dfrac{B}{A}=-\dfrac{M}{m}\rightarrow mB+MA=0$
- 即在长波极限下，光学支是原胞质心保持不动的原胞内原子的相对振动
- 离子晶体中长光学波：相对振动产生电偶极矩，与电磁波相互作用，导致红外光吸收
- 这些结论对三维也适用

一维→三维：色散关系与振动自由度

- 一维单原子线性链的色散关系：一个声学支
- 一维双原子线性链的色散关系：一个声学、一个光学支
- 三维？原胞内有**s**个原子？
- 与原胞内原子的自由度有关：**3**个声学、**3s-3**个光学支格波
- 对于**q**的N个取值（N：原胞个数），共有**3**N个声学、**(3s-3)**N个光学振动模式

5、三维体系的晶格振动



原胞内原子数：***s***

⇩

自由度：**3*s***

三维运动方程及其解

- 晶体共有i=1,N个原胞，原胞内有j=1,s个原子，每个原子有三个振动方向 $\alpha=x,y,z$
- 如果第i个原胞内第j个原子的k方向的位移为$u_{\alpha,ij}$，势能是位移的函数。在平衡点附近有

$$V=V_0+\sum_{i,j,\alpha}\frac{\partial V}{\partial u_{k,ij}}\bigg|_0 u_{k,ij}+\frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j,\alpha\\ i',j',\alpha'}}\frac{\partial^2 V}{\partial u_{\alpha,ij}\partial u_{\alpha',i'j'}}\bigg|_0 u_{\alpha,ij}u_{\alpha',i'j'}+\ldots$$

- 简谐力：

$$F_{\alpha,ij}^{简谐}=-\frac{\partial V}{\partial u_{\alpha,ij}}=-\sum_{i',j',\alpha'}\frac{\partial^2 V}{\partial u_{\alpha,ij}\partial u_{\alpha',i'j'}}\bigg|_0 u_{\alpha',i'j'}$$

- 经典运动方程为

$$M_j \frac{d^2 u_{\alpha,ij}}{dt^2} = -\sum_{i',j',\alpha'} \frac{\partial^2 V}{\partial u_{\alpha,ij} \partial u_{\alpha',i'j'}}\Bigg|_0 u_{\alpha',i'j'}$$

- V对$u_{i,i'}$的导数仅与i和i'的格矢差有关，因为可以任意移动原点坐标而不影响这个导数
- 尝试解

$$u_{\alpha,ij} = \frac{1}{\sqrt{M_j}} u_{\alpha,j}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i - i\omega t}$$

- 代入后可得：

$$-\sqrt{M_j}\,\omega^2 u_{\alpha,j}(\mathbf{q})e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i-i\omega t}=$$

$$=-\sum_{i',j',\alpha'}\frac{1}{\sqrt{M_{j'}}}\left.\frac{\partial^2 V}{\partial u_{\alpha,ij}\partial u_{\alpha',i'j'}}\right|_0 e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i-i\omega t+i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_{i'}-\mathbf{R}_i)}u_{\alpha',j'}(\mathbf{q})$$

- 即

$$\omega^2 u_{\alpha,j}(\mathbf{q})=\sum_{i',j',\alpha'}\frac{1}{\sqrt{M_j M_{j'}}}\left.\frac{\partial^2 V}{\partial u_{\alpha,ij}\partial u_{\alpha',i'j'}}\right|_0 e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_{i'}-\mathbf{R}_i)}u_{\alpha',j'}(\mathbf{q})$$

本征值方程

- 写成 $$\omega^2 u_{\alpha,j}(\mathbf{q}) = \sum_{j',\alpha'} D_{\alpha\alpha',jj'}(\mathbf{q}) u_{\alpha',j'}(\mathbf{q})$$

- $D_{\alpha\alpha',jj'}(\mathbf{q})$称为动力学矩阵，即

$$D_{\alpha\alpha',jj'}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{M_j M_{j'}}} \sum_{\mathbf{R}_{i'}-\mathbf{R}_i} \left.\frac{\partial^2 V}{\partial u_{\alpha,ij}\partial u_{\alpha',i'j'}}\right|_0 e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_{i'}-\mathbf{R}_i)}$$

- 上述线性方程组有非平凡解的条件是

$$\det\left|D_{\alpha\alpha',jj'}(\mathbf{q}) - \omega^2 \delta_{\alpha\alpha'}\delta_{jj'}\right| = 0$$

讨论

- 形式上与能带本征值问题完全类似，$D(\mathbf{q})$相当于$H(\mathbf{k})$
- **3s x 3s**维的矩阵（**s**是原胞内原子的个数），而且是个**Hermit**矩阵**(**可作为练习自己证明**)**，即有实数的本征值
- 对每一个**q**，$\omega_l(\mathbf{q})$，l=1,⋯.,3s，共有**3s**个实数的本征值，$\omega_l(\mathbf{q})$称为色散关系，**3**支声学支，其余光学支
- 对每一个$\omega_l(\mathbf{q})$，**D**分别有一个本征矢，本征矢具有正交归一性和完备性

- 对每一个本征值，有一个本征矢，满足：

$$\omega_l^2(\mathbf{q})c_{\alpha,j}^{(l)}(\mathbf{q})=\sum_{j',\alpha'}D_{\alpha\alpha',jj'}(\mathbf{q})c_{\alpha',j'}^{(l)}(\mathbf{q})$$

- 本征矢的正交性

$$\sum_{j',\alpha'}c_{\alpha',j'}^{(l)*}(\mathbf{q})c_{\alpha',j'}^{(l')}(\mathbf{q})=\delta_{ll'}$$

- 本征矢的完备性

$$\sum_{l}c_{\alpha,j}^{(l)*}(\mathbf{q})c_{\alpha',j'}^{(l)}(\mathbf{q})=\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{jj'}$$

动力学矩阵和色散关系

- 由于势能的导数是实数，可以得到

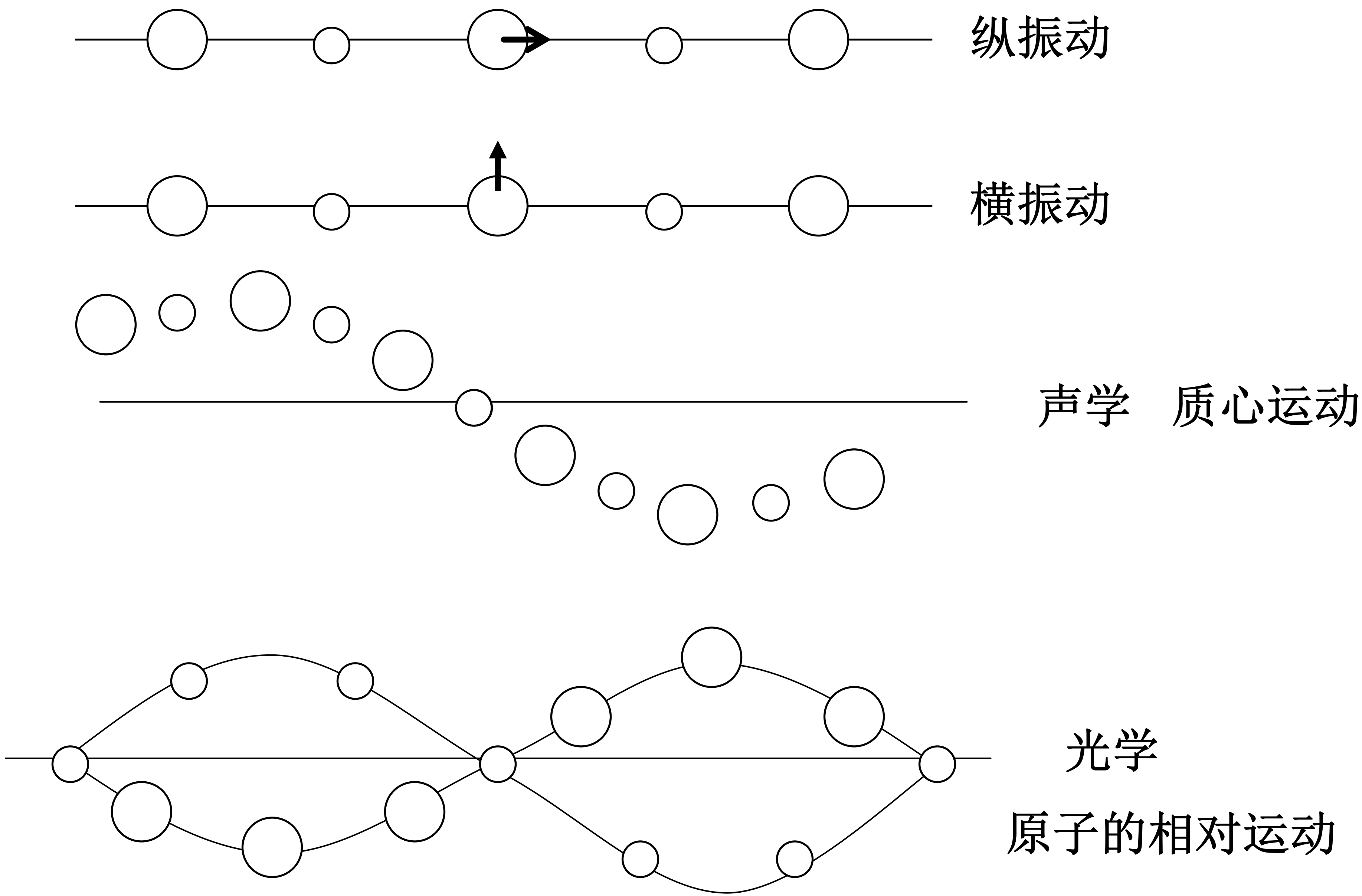
$$D_{\alpha\alpha',jj'}\left(-\mathbf{q}\right)=D^{*}_{\alpha\alpha',jj'}\left(\mathbf{q}\right)$$

- 进而得到本征值的对称关系

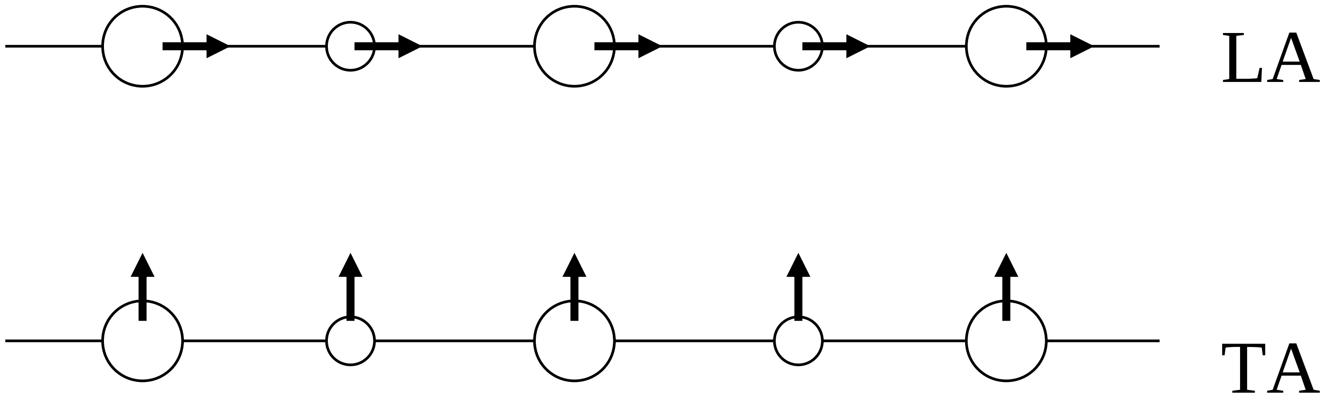
$$\omega_l^2\left(\mathbf{q}\right)=\omega_l^2\left(-\mathbf{q}\right) \qquad \text{对比：} E_n\left(\mathbf{q}\right)=E_n\left(-\mathbf{q}\right)$$

- 可以证明（对本征值方程取复共轭，利用本征值的反演对称），本征矢也有

$$c_{\alpha,j}^{(l)*}\left(\mathbf{q}\right)=c_{\alpha,j}^{(l)}\left(-\mathbf{q}\right)$$


纵振动
横振动
声学 质心运动
光学
原子的相对运动

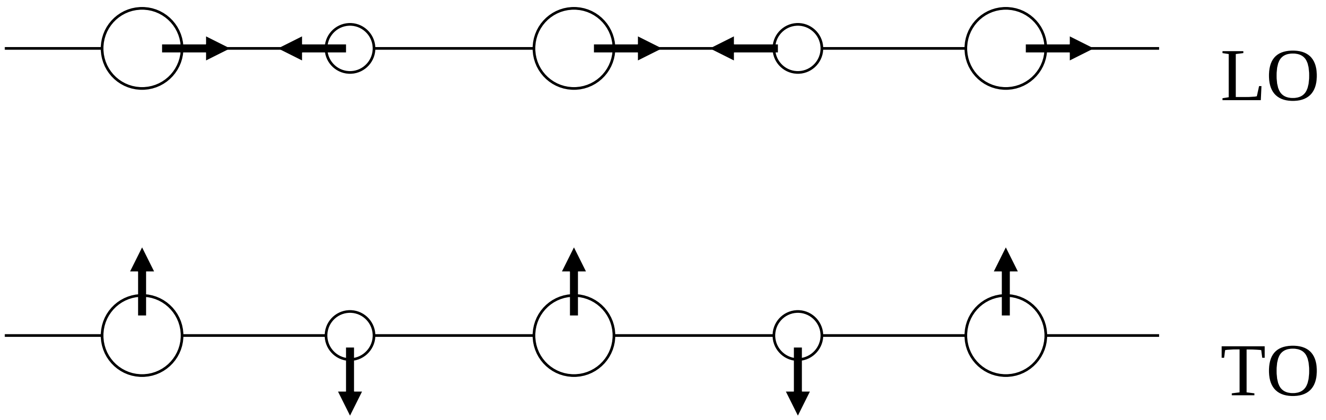
声学模



$$q = 0$$

- 原子以相同振幅平行振动

光学模(q=0)

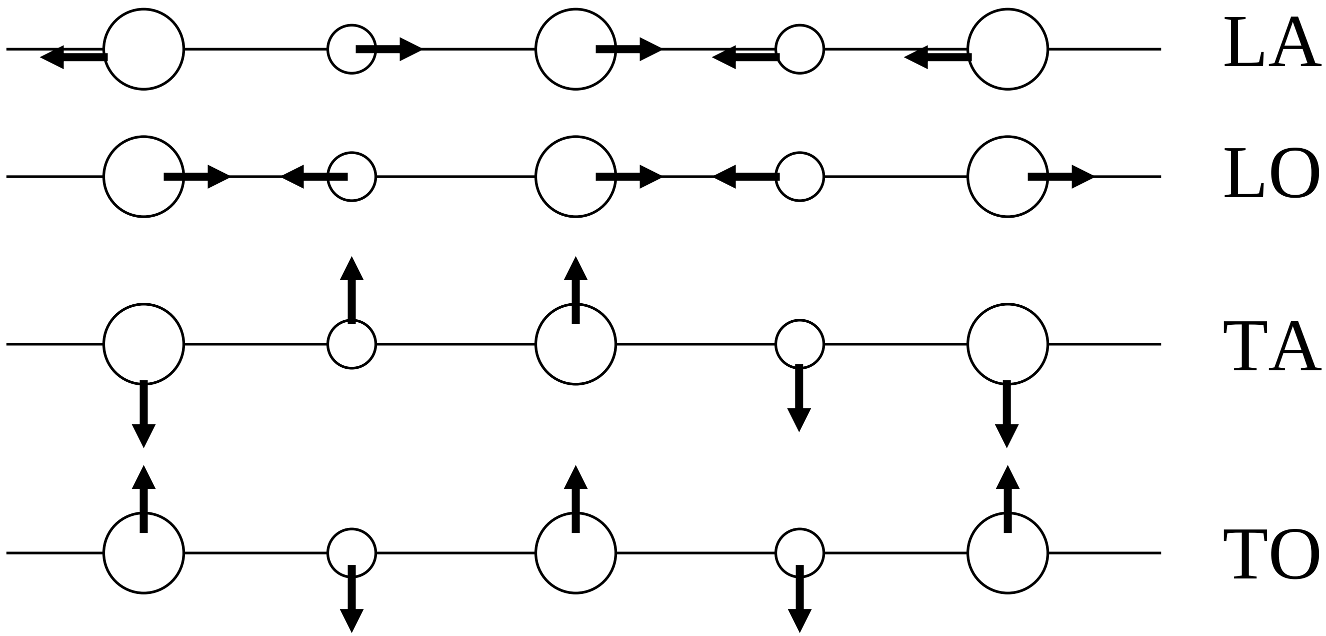


$$q = 0$$

- 相对振动

声学、光学模(布里渊区边界)

- 通过振幅分析，可得到



$$q = \pm\frac{\pi}{a}$$

我们看到，这种波的传播实际上是原子振幅的传播，原子位于格点上

这种描写晶格原子振动的波称为格波

本讲小结

- 一维单原子链的晶格振动
  - * 势能与力常数(简谐近似)、运动方程、尝试解形式 **(Bloch**定理**)**，色散关系**(**声学支振动**)**
- 一维双原子链的晶格振动
  - * 与单原子相比，有光学支振动
  - * ***q*~0(**长波近似**)**光学支、声学支色散关系特点？
  - * 光学支、声学支振幅关系——相对质心的振动 **(*q*=0**时，质心不动的振动**)**、质心振动
- 三维体系的晶格振动
  - * 原胞中原子的自由度数**(3s)**与振动格波数**(3s，3s-3)**之间的关系

新引入的概念

- 简谐近似
- 色散关系
- 振动模式——与电子中的状态相对应
- 声学支、光学支
- 格波

思考题

$$x_n(t) = ?\, x_0(t) e^{iqna} = A e^{-i\omega t} e^{iqna}$$

- 振动方程的尝试解是根据**Bloch**定理得到。但**Bloch**定理是量子力学中，由**H**的平移对称性得到的。但现在只是一个经典力学体系，如不用**Bloch**定理，如何确定尝试解的形式？

习题：

24.（书中5.3题）考虑一双原子链的晶格振动，链上最近邻原子间的力常数交替地等于c和10c。令原子质量相同，且最近邻距离等于a/2，试求在q=0和q=π/a处的ω(q)，并大致画出色散关系。

要能够独立完成，熟记所有细节。

附录、连续介质弹性波

- 如果质量密度是**rho**，应力是**sigma**，则 $\rho\frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2}=\frac{\partial \sigma_x}{\partial x}$
- 假定应力正比于应变 $\sigma_x = c e_x$
- 而应变与位移有关系 $e_x = \frac{\partial u_x}{\partial x}$
- 因此振动方程为 $\rho\frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2}=\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2}$
- 尝试解是 $u_x(x,t)=u_x^0 e^{i(k_x x-\omega t)}$
- 波速或相速是 $v=\omega/k$
- 如果是晶体，用循环边界条件，可确定波矢