3.2 一维双原子链

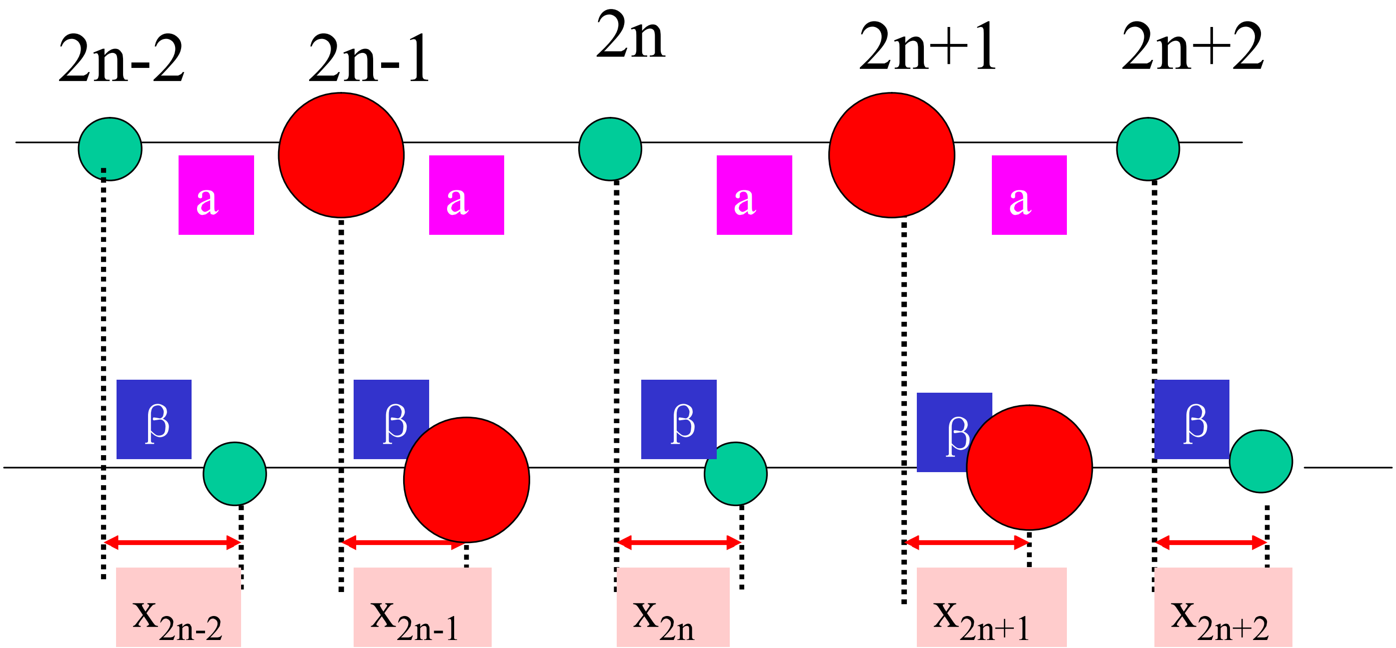
许多晶体的原胞里含有的原子数多于一个。

为了表示复式格子的晶格振动特性，考虑由两个不同原子组成的一维双原子链：

3.2.1 运动方程

一维双原子链：红色原子质量M

绿色原子质量m



对绿色原子：

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

对红色原子：

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

当原子链包含N个原胞（即有N个绿色原子和N个红色原子共2N个原子）时，应有2N个方程组成的联立方程组。

令方程有解：

$$x_{2n} = Ae^{i(\omega t - q2na)}$$

$$x_{2n+1} = Be^{i(\omega t - q(2n+1)a)}$$

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

$$\therefore m(i\omega)^2Ae^{i(\omega t-q2na)}=\beta[Be^{i(\omega t-q(2n+1)a)}+Be^{i(\omega t-q(2n+1)a)}-2Ae^{i(\omega t-q2na)}]$$

因此：

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

同理：

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

方程组与**n**无关：

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

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

整理后得到：

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

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

改写：

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

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

齐次方程组有非零解的条件是：

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

故：

$$(M\omega^2-2\beta)(m\omega^2-2\beta)-[2\beta\cos(qa)]^2=0$$

$$Mm\omega^4-2\beta(m+M)\omega^2+4\beta^2-4\beta^2\cos^2(qa)$$
$$=0$$

$$\therefore Mm\omega^4-2\beta(m+M)\omega^2+4\beta^2\sin^2(qa)=0$$

可以得到两个ω²的值：

$$\omega^2\begin{cases}\omega_+^2\\ \omega_-^2\end{cases}=\beta\frac{m+M}{mM}\left\{1\pm\sqrt{1-\frac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2(qa)}\right\}$$

把 ω_+^2,ω_-^2 代回方程组：

则有：

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

$$\left(\frac{B}{A}\right)_- = -\frac{m\omega_-^2 - 2\beta}{2\beta\cos(qa)}$$

由格波解：

$$x_{2n} = Ae^{i(\omega t - q2na)}$$

$$x_{2n+1} = Be^{i(\omega t - q(2n+1)a)}$$

可知：相邻原胞之间的位相差为**2qa**

(原胞长度为**2a)**

如果把2qa改变2π倍，则原子的运动状态没有改变：

$$\therefore -\pi < 2qa \leq +\pi$$

$$或 -\frac{\pi}{2a} < q \leq +\frac{\pi}{2a}$$

即为一维双原子链的布里渊区。在这个范围内任意一个q有两个格波解：频率为

$$\omega_+^2 和 \omega_-^2$$

仍然采用周期性边界条件：

$$N(2qa) = 2n\pi \qquad (n\text{为整数})$$

$$\therefore q = \frac{2n\pi}{2Na} \qquad (n\text{为整数})$$

又因为：

$$-\frac{\pi}{2a} < q \leq +\frac{\pi}{2a}$$

$$\therefore -\frac{\pi}{2a} < \frac{2n\pi}{2Na} \leq +\frac{\pi}{2a}$$

$$\therefore -\frac{N}{2} < n \leq +\frac{N}{2}$$

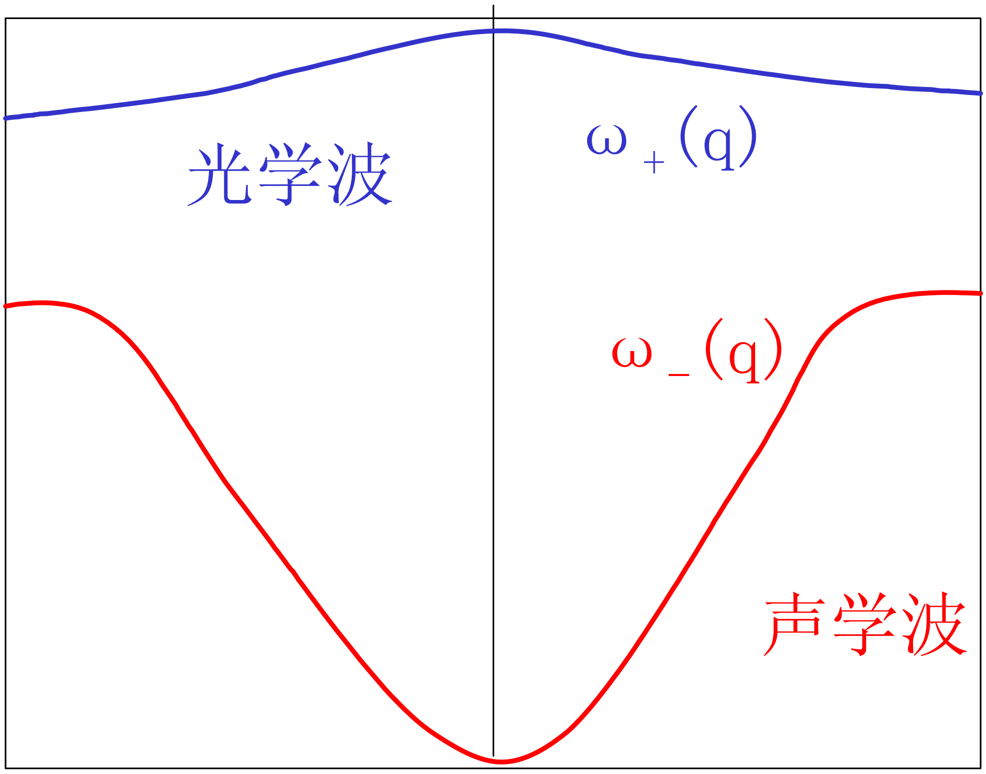
即n共有N个不同的取值：

由N个原胞（共含2N个原子）组成的的一维双原子链，q可以取N个不同的值，每个q对应两个解。

一共2N个不同的格波，数目正好等于链的自由度

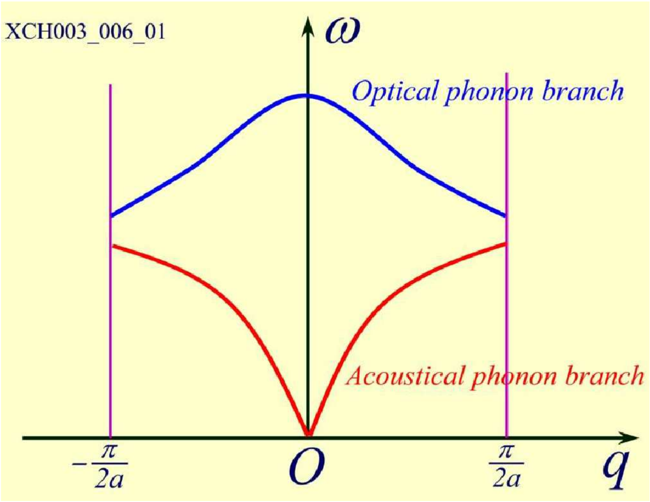
得到了链全部的振动模式。

3.2.2 双原子链的色散关系：



色散关系的特点

短波极限 $q \to \pm\frac{\pi}{2a}$



$$(\omega_-)_{\max} = (\frac{\beta}{mM})^{1/2}\{(m+M)-(M-m)\}^{1/2} = (\frac{2\beta}{M})^{1/2}$$

$$(\omega_+)_{\min} = (\frac{\beta}{mM})^{1/2}\{(m+M)+(M-m)\}^{1/2} = (\frac{2\beta}{m})^{1/2}$$

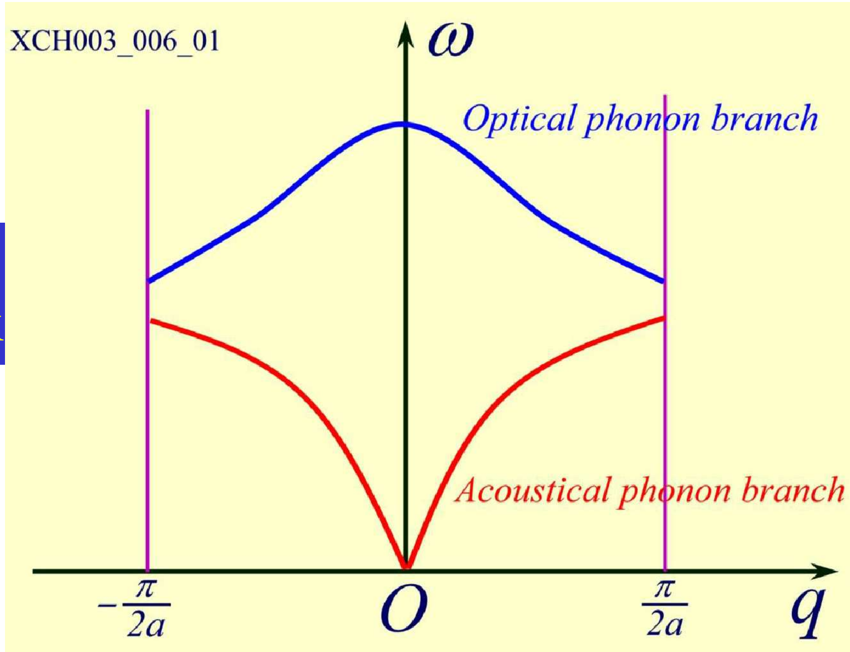
因为 **M＞m** $(\omega_+)_{\min} > (\omega_-)_{\max}$

$(\omega_+)_{\min} > \omega > (\omega_-)_{\max}$ —— 不存在格波

—— 频率间隙

$(\omega_+)_{\min} \sim (\omega_-)_{\max}$

—— 一维双原子晶格叫做带通滤波器

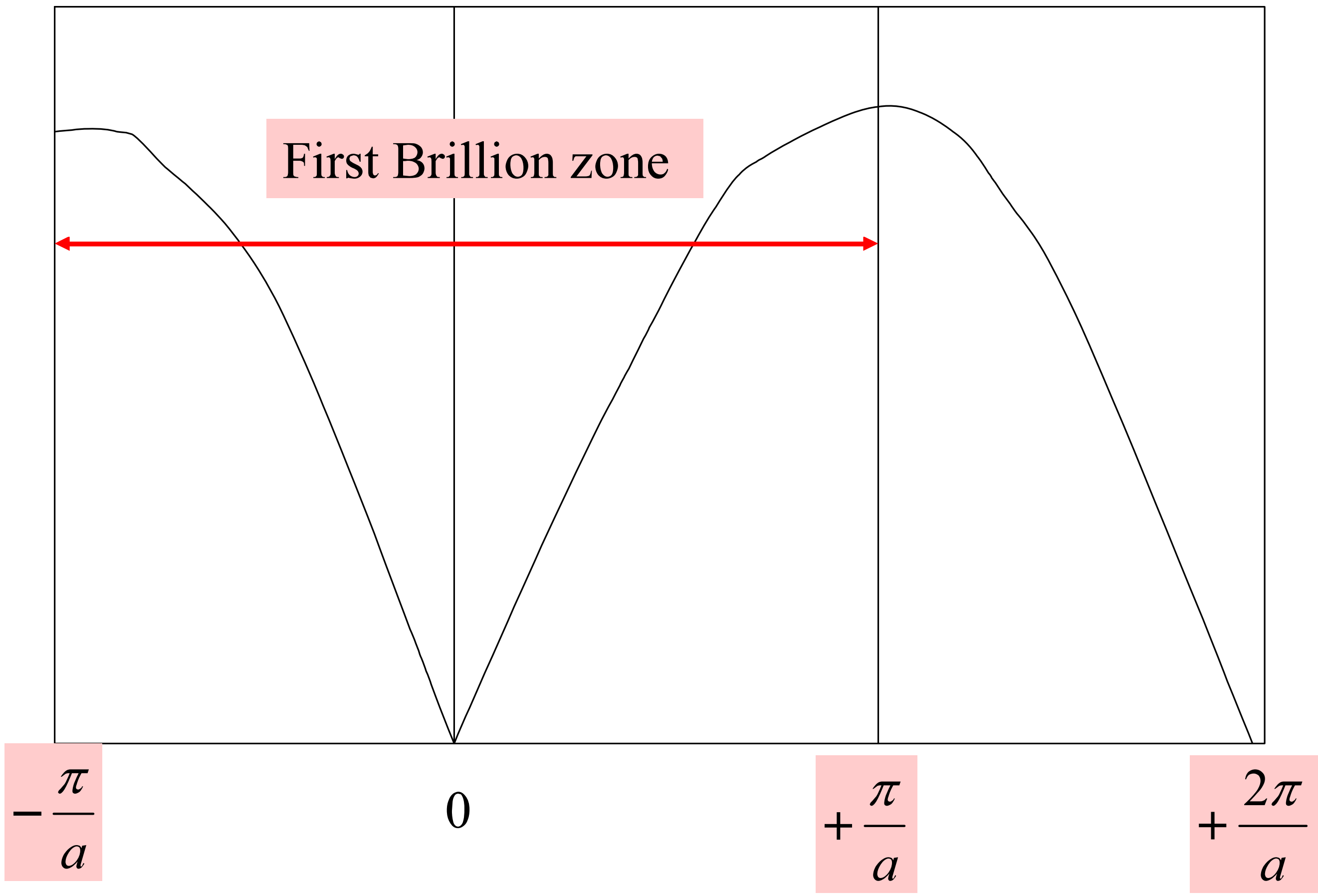


3.2.3 声学波与光学波

研究$q \longrightarrow 0$时 $\omega(q)$ 的关系具有特殊意义：

对一维单原子链：

ω与 q的函数关系如图所示：



有：

$$\because \omega^2 = \frac{2\beta}{m}[1-\cos(qa)] = \frac{4\beta}{m}\sin^2(\frac{1}{2}qa)$$

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

当

$$q << \frac{\pi}{a}\text{时，而}q = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\therefore \frac{2\pi}{\lambda} << \frac{\pi}{a}\text{时，即}\lambda >> a$$

$$\therefore \sin(\frac{1}{2}aq) \approx \frac{1}{2}aq$$

显然：

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

对于连续介质的弹性波，有：

$$\omega = c|q|$$

c为波速

表明当 $q << \frac{\pi}{a}$时

一维单原子链中的格波相当于连续介质中的弹性波。

如果相邻原子的相对位移为δ时，则：相对伸长为：$\frac{\delta}{a}$

相互作用力为： $F = \beta\delta = (\beta a)\frac{\delta}{a}$

其中：链的伸长模量为：βa

链的密度为：$\dfrac{m}{a}$

故：

$$c = a\sqrt{\frac{\beta}{m}} = \sqrt{\frac{a\beta}{\left(\frac{m}{a}\right)}} = \sqrt{\frac{\text{伸长模量}}{\text{密度}}}$$

即当把原子链看成是弹性波时，**c**为弹性波的波速。

对一维双原子链，有：

$$\omega^2\begin{cases}\omega_+^2\\ \omega_-^2\end{cases}=\beta\frac{m+M}{mM}\left\{1\pm\sqrt{1-\frac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2(qa)}\right\}$$

光学波：$$\omega_+^2=\beta\frac{m+M}{mM}\left\{1+\sqrt{1-\frac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2(qa)}\right\}$$

声学波：$$\omega_-^2=\beta\frac{m+M}{mM}\left\{1-\sqrt{1-\frac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2(qa)}\right\}$$

对声学波：

当 $q \to 0$时$\omega_- \to 0$

注意 $$\frac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2(qa) \approx \frac{4mM}{(m+M)^2}(qa)^2 << 1$$

$$\because \sqrt{1-x} \approx 1-\frac{1}{2}x$$

$$\therefore \sqrt{1-\frac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2(qa)} \approx 1-\frac{2mM}{(m+M)^2}(qa)^2$$

$$\therefore \omega_-^2 = \beta\frac{m+M}{mM}\left\{1-\sqrt{1-\frac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2(qa)}\right\}$$

$$\approx \beta\frac{m+M}{mM}[\frac{2mM}{(m+M)^2}(qa)^2]$$

$$= \frac{2\beta}{(m+M)}(qa)^2$$

或：

$$\therefore \omega_{-} = \sqrt{\frac{2\beta}{m+M}}(aq) = (a\sqrt{\frac{2\beta}{m+M}})q$$
$$= cq$$

这里：

$$c = a\sqrt{\frac{2\beta}{m+M}} = \sqrt{\frac{2\beta a}{\frac{m+M}{a}}} = \sqrt{\frac{\text{伸长模量}}{\text{密度}}}$$

其中：伸长模量=β **(2a)**

密度=（**m+M/a**）

声学波的色散关系与一维布拉维格子形式相同

即长声学波的频率正比于波数，就是把一维链看成是连续介质时的弹性波。

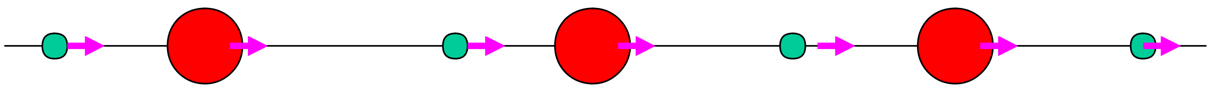
对于长声学波，$q \to 0$时$\omega_- \to 0$

$$\therefore (\frac{B}{A})_- = -\frac{m\omega_-^2 - 2\beta}{2\beta\cos(qa)} \to 1$$

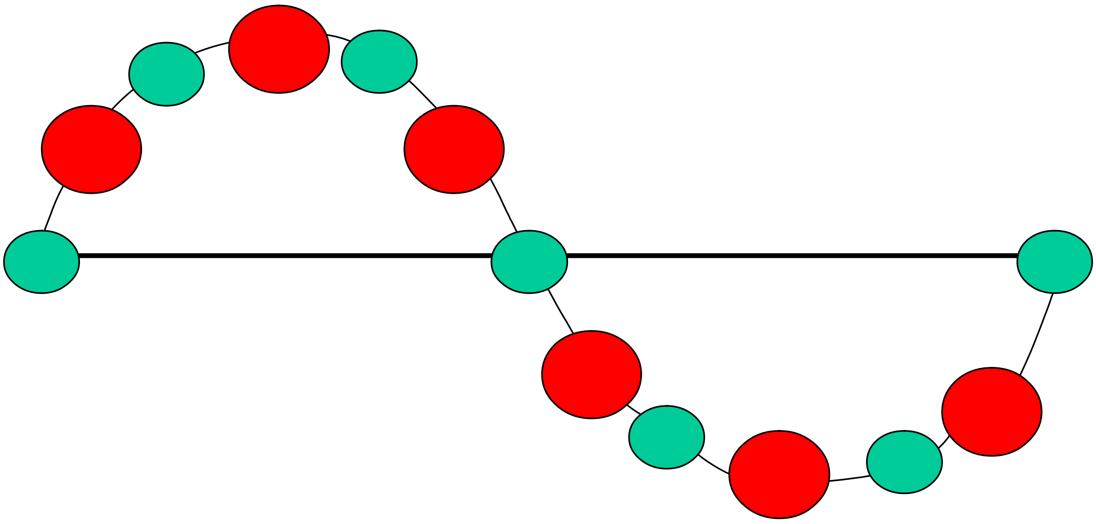
表明原胞里的两种原子的运动是一样的，振幅和位相都没有差别。

即长声学波代表了原胞的质心的振动，

而q=0时则代表了整个晶体的平动。



或者说声学波时两种原子是同向运动的。



长声学波示意图

对光学波：

$$\because \omega_+^2 = \beta \frac{m+M}{mM}\left\{1+\sqrt{1-\frac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2(qa)}\right\}$$

当$q=0$时

$$\therefore \omega_+^2 = \beta\frac{2(m+M)}{mM}$$

即与**n**无关，表明**N** 个联立方程都归结为同一个方程。

或者：只要ω与 q满足：

$$\therefore \omega_+ = \sqrt{\frac{2\beta(m+M)}{mM}} = \sqrt{\frac{2\beta}{\mu}}$$

其中：

$$\mu = \frac{mM}{m+M} \text{为折合质量}$$

两种原子的振幅比为：

$$\because \left(\frac{B}{A}\right)_+ = -\frac{m\omega_+^2 - 2\beta}{2\beta\cos(qa)}$$

当$q \to 1$时，$\cos(qa) \to 1$

$$\therefore \left(\frac{B}{A}\right)_+ = -\frac{m\omega_+^2 - 2\beta}{2\beta\cos(qa)} = -\frac{m\left(\frac{2\beta}{\mu}\right) - 2\beta}{2\beta}$$

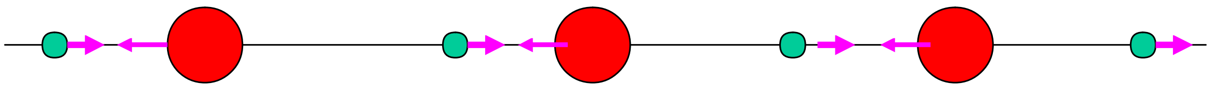
即当$q \to 0$时，

$$\left(\frac{B}{A}\right)_{+} = -\frac{m}{\mu} = -\frac{m}{\dfrac{mM}{m+M}} \approx -\frac{m}{M}$$

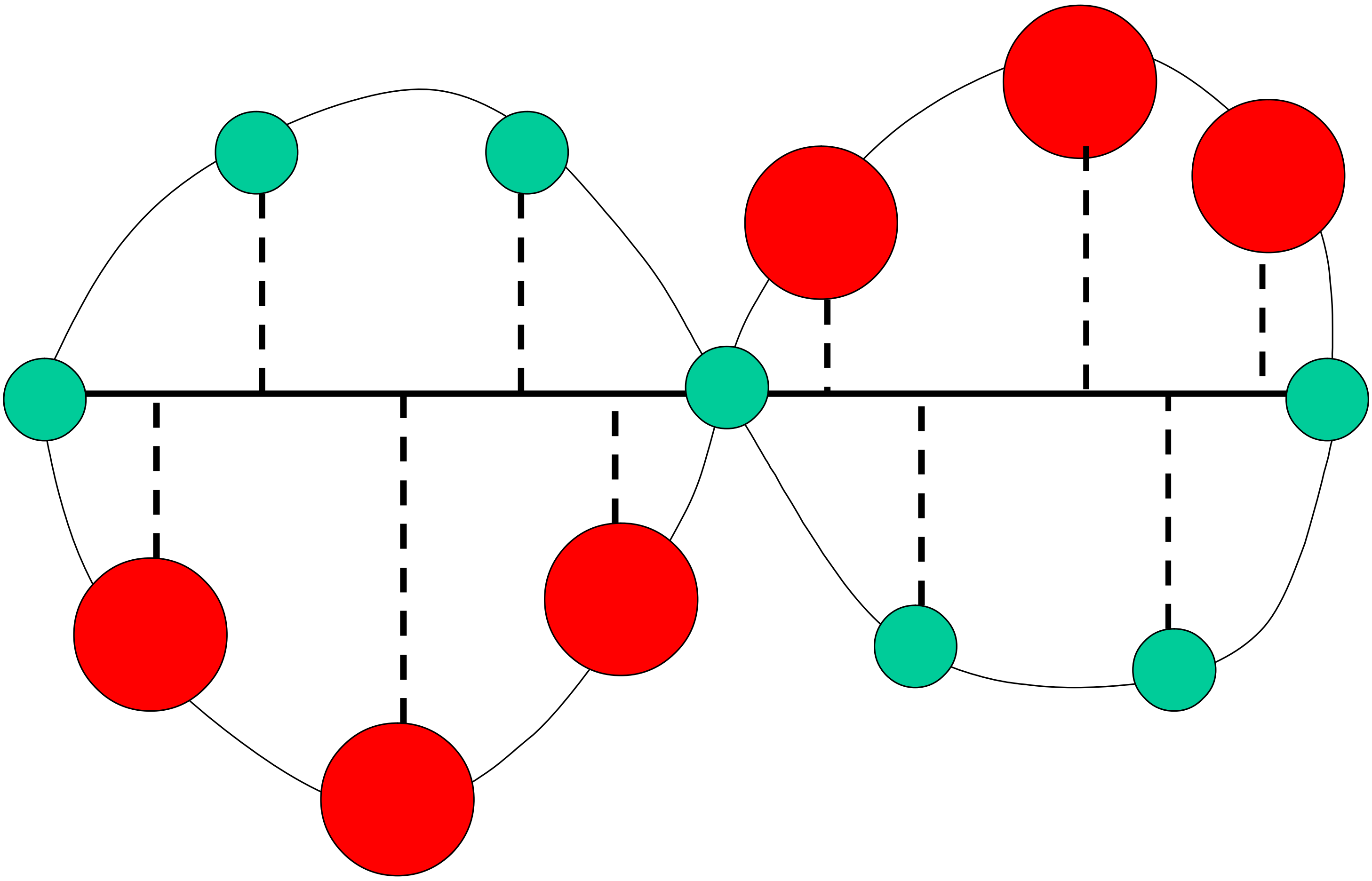
表明原胞内的两个原子以相反的位相、不同的振幅进行振动。

$$Am + BM = 0$$

即光学波的长波极限描述的是同一原胞里的两个原子相对于质心的振动。



或者说光学波时两种原子是反向运动的。



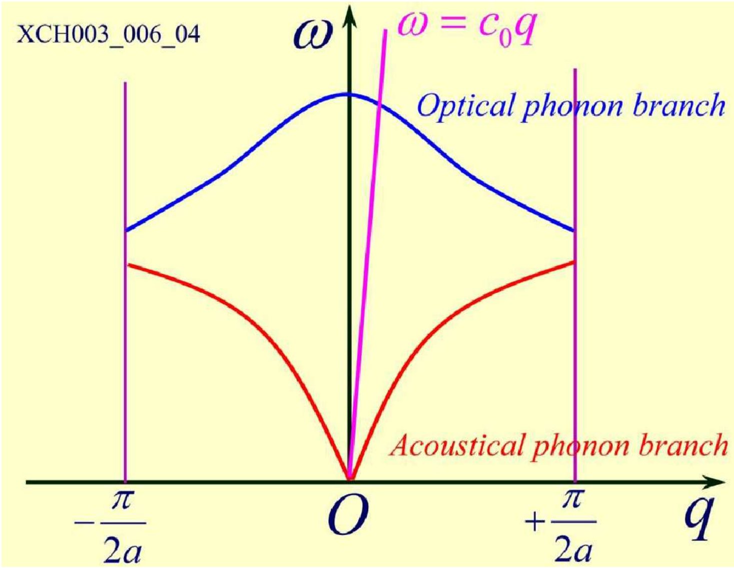
长光学波示意图

. 长光学波与电磁波的作用

—— 在长波极限下，对于典型的μ和β值

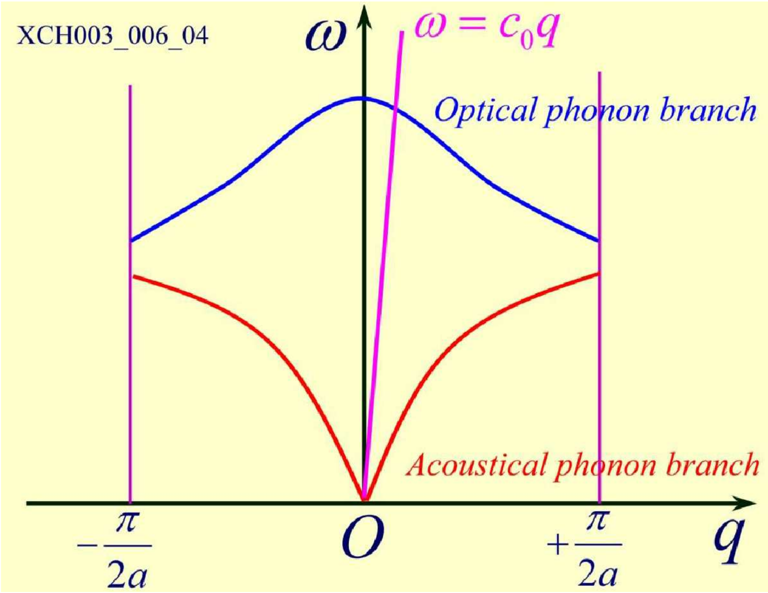
$$(\omega_+)_0 \approx \sqrt{\frac{2\beta}{\mu}} = 10^{13} \sim 10^{14} / s$$

—— 远红外光波激发离子晶体，可引起晶体中长光学波的共振吸收



光波的频率 $\omega = c_0 q$

—— 波矢远远小于一般格波的波矢，只有q~0的长光学波可以与远红外的光波发生共振吸收



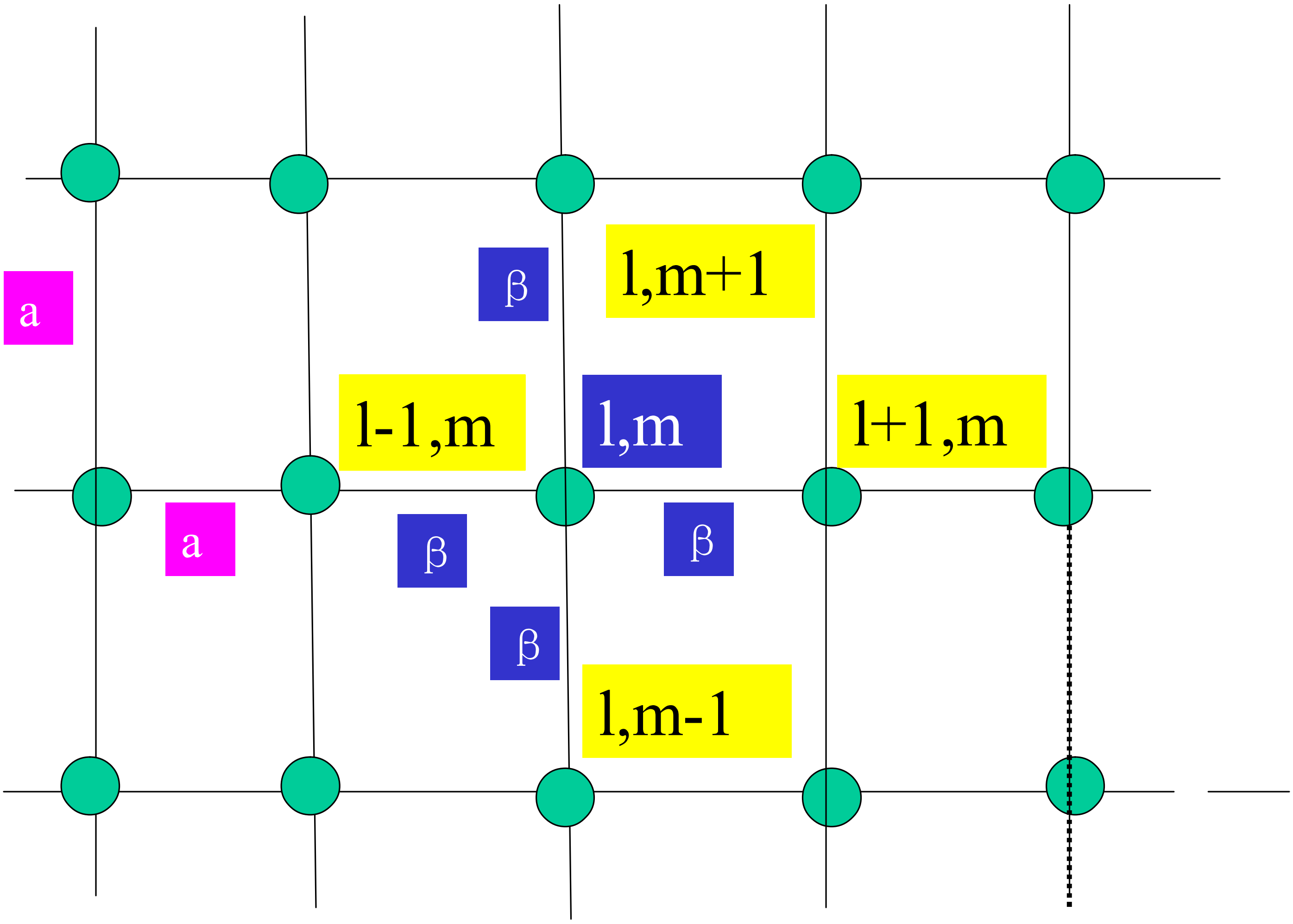
将可以与光波作用的长光学波声子称为电磁声子

理想	实际
理想晶格	缺陷
理想原子排列	杂质
周期边界	自由边界
简谐近似	非简谐近似

3.2.4 二维正方晶格

为了表示二维晶格的振动特性，考虑由相同原子的行和列组成的一平面正方晶格的横振动：

令原子质量为**M**，最近邻原子的力常数为β，$x_{l,m}$表示在第**l**行、第**m**列的原子垂直于晶格平面的位移。



a
β
l,m+1
l-1,m
l,m
l+1,m
a
β
β
β
l,m-1

只考虑最近邻原子的影响：

第（l，m）个原子受到(l＋1，m)、(l－1，m)、(l，m＋1)、(l，m－1)四个原子的作用力为：

(l＋1，m)原子对它的力＝β **($x_{l+1,m}$-$x_{l,m}$)**

(l-1，m)原子对它的力＝β **($x_{l-1,m}$-$x_{l,m}$)**

(l，m+1)原子对它的力＝β **($x_{l,m+1}$-$x_{l,m}$)**

(l，m-1)原子对它的力＝β **($x_{l,m-1}$-$x_{l,m}$)**

运动方程式：

$$M\frac{d^2x_{l,m}}{dt^2}=\beta(x_{l+1,m}-x_{l,m}+x_{l-1,m}-x_{l,m})$$

$$+\beta(x_{l,m+1}-x_{l,m}+x_{l,m-1}-x_{l,m})$$

令方程有解：

$$x_{l,m} = A\,exp[i(lq_x a + mq_y a - \omega t)]$$

代入方程有：

因此：

$$-M\omega^2 =$$

$$=\beta(e^{iq_x a}+e^{-iq_x a}+e^{iq_y a}+e^{-iq_y a}-4)$$

所以：

$$M\omega^2 = 2\beta(2-\cos q_x a-\cos q_y a)$$

由上可以得知：

$u_{l,m}$; ω 均为q_x、q_y的周期函数，周期为 $2\pi/a$

即全部解都落在一个边长为2π/a的正方形区域内，这正是二维正方格子的第一布里渊区。

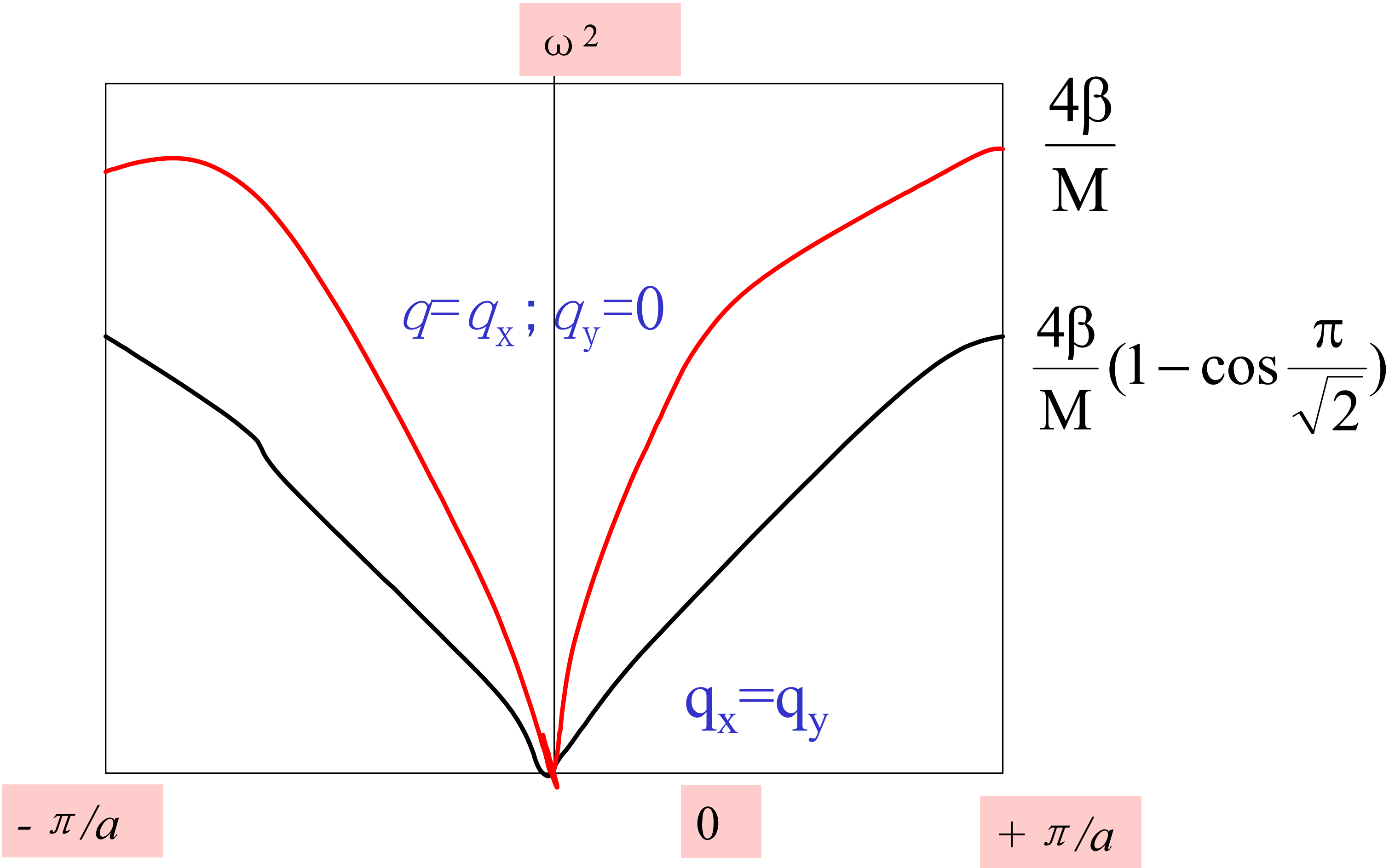
对于$q=q_x;q_y=0$方向，有：

$$\omega^2=\frac{2\beta}{M}(1-\cos qa)$$

对于$q_x=q_y$方向：

$$\omega^2=\frac{4\beta}{M}(1-\cos q_x a)$$
$$=\frac{4\beta}{M}(1-\cos\frac{1}{\sqrt{2}}qa)$$

ω^2与q的色散关系：



对于qa<<**1**：色散关系

$$M\omega^2 = 2\beta(2 - \cos q_x a - \cos q_y a)$$

简化为：

$$\omega^2 \approx \frac{2\beta}{M}[(2-(1-\frac{1}{2}q_x^2a^2)-(1-\frac{1}{2}q_y^2a^2)]$$

$$= \frac{\beta a^2}{M}(q_x^2 + q_y^2)$$

对于qa<<**1**：

$$\omega=\sqrt{\frac{\beta a^2}{M}(q_{x}^2+q_{y}^2)}$$

$$=q\sqrt{\frac{\beta a^2}{M}}$$

这样对于qa<<**1**；即振动波长λ>>a的长波极限下，群速度为：

$$v_g = \frac{d\omega}{dq} = \sqrt{\frac{\beta a^2}{M}}$$

与**q**无关。