University of Science and Technology of China
School of Material Science and Engineering

# Lecture Notes - Solid State Physics

Mo Zheyang

October 21, 2017

## 1 一维单原子链

### 1.1 原子间作用

考虑相邻两个原子之间存在相互作用，只有在平衡位置两原子不受力。于是两原子系统的相互作用可以看做一个弹簧振子。根据以上假设，可以获得以下两个物理表达：

- 只考虑相邻原子（左右各一）间的相互作用，忽略原子间的长程作用；
- 原子间作用力与相隔距离之间满足胡克定律，即 $F = -k\Delta x$.

设原子质量为 $m$，由牛顿第二定律可知

$$m\ddot{x} = F \tag{1.1}$$

其中，加速度 $\ddot{x} = \frac{d^2x}{dt^2}$.

一维单原子链模型中，一个原子只受左右两边相邻原子作用，且左右两边原子对该原子的作用力方向相反，于是可列式

$$m\ddot{x}_n = [-k(x_{n+1} - x_n)] - [-k(x_n - x_{n-1})] \tag{1.2}$$

考虑与课本中符号进行统一，将上式改写为

$$m\ddot{\mu}_n = [-\beta(\mu_{n+1} - \mu_n)] - [-\beta(\mu_n - \mu_{n-1})] \tag{1.3}$$

实际上，上式与下式等效

$$m\ddot{\mu}_n = [-\beta(\mu_n - \mu_{n-1})] - [-\beta(\mu_{n+1} - \mu_n)] \tag{1.4}$$

将上式化简可得

$$m\ddot{\mu}_n = \beta(\mu_{n+1} + \mu_{n-1} - 2\mu_n) \tag{1.5}$$

实际上该方程是个带微分的递归方程，而我们希望求出其通项。若希望求解含 n 个原子的单原子链，则可根据方程列出 n 个等式。这样看上去直接求解上式是难以下手的。我们可以先猜测一个解，再去验证其可行性。

## 1.2 色散关系

线性微分方程 $\ddot{\mu(t)} = \beta \cdot \mu(t)$ 具有通解 $\mu = A \cdot e^{\omega \mu(t)}$，可以验证方程具有格波形式的解

$$\mu_{nq} = A \cdot e^{i(\omega t - naq)} \tag{1.6}$$

将式（1.6）代入式（1.5）中可解得

$$\boxed{\omega^2 = \frac{4\beta}{m} sin^2\left(\frac{1}{2}aq\right)} \tag{1.7}$$

上式即为 *色散关系*（*Dispersion Relation*），描述了电磁波频率会随波数变化而变化的规律。这种现象在光穿透通过五棱镜的时候会体现出来——一束白光“散”成多束彩色的光，因此将该式所表达的规律称为色散关系。

## 1.3 Born-Von Karman 条件——周期性边界条件

再次观察式（1.5）我们可以发现，如果需要求解含 n 个原子的单原子链的 n 个原子的情况，我们实际需要使用到第 n+1 个原子的信息。如果需要真的求解该方程，至少要给第 n+1 个原子定义一个值，即定义边界条件。

我们容易想到，由于晶格的周期性，那么一维单原子链也应该是具有周期性的。那就可以把第 n+1 个原子的情况与第 1 个原子的情况等同起来，这样我们就可以通过式（1.5）来描述所有处于周期结构内的原子的状态了。Excellent!

我们需要重新回到格波方程 [式（1.6）] 的物理意义来进行考虑。格波方程为复数形式，说明其可以具有周期性的表达。定义在含 N 个原子的一维原子链中，第 N+1 个原子的情况与第 1 个原子的情况等同，即 $\mu_{nq} = \mu_{(n+N)q}$。参考式（1.6）的形式可知

$$\mu_{nq} = \mu_{(n+N)q} = \mu_{nq} \cdot e^{-i(Naq)} \tag{1.8}$$

那么相当于要求

$$\boxed{e^{-i(Naq)} = 1} \tag{1.9}$$

当然，也可以根据欧拉公式 $e^{ix} = cosx + isinx$，可将上式改写为

$$e^{-i(Naq)} = cos(-Na \cdot q) + isin(-Na \cdot q) = 1 \tag{1.10}$$

令 $sin(-Na \cdot q) = 0$，,$cos(-Na \cdot q) = 1$，可以知道需要满足

$$-Na \cdot q = 2\pi k \tag{1.11}$$

其中 $k$ 为整数。从而得到 q 所需要满足的关系如下

$$\boxed{q = -\frac{2\pi k}{Na}} \tag{1.12}$$

式（1.9）和式（1.12）所描述的便称为 *Born-Von Karman* 条件。

## 2 一维双原子链

在一维双原子链中，一共有两种质量不同的原子，分别为 m 和 M。它们的相互作用关系与在一维单原子链中相同。于是，与一维单原子链的分析相同，可以通过牛顿第二定律得到原子运动方程：

$$m\ddot{\mu}_{2n} = -\beta(2\mu_{2n} - \mu_{2n+1} - \mu_{2n-1}) \tag{2.1}$$

$$M\ddot{\mu}_{2n+1} = -\beta(2\mu_{2n+1} - \mu_{2n+2} - \mu_{2n}) \tag{2.2}$$

同样地，将验证以上两个递归方程分别具有格波形式解

$$\mu_{2n} = A \cdot e^{i[\omega t - (2n)aq]} \tag{2.3}$$

$$\mu_{2n+1} = B \cdot e^{i[\omega t - (2n+1)aq]} \tag{2.4}$$

通过将式（2.3）和（2.4）分别代入式（2.1）和（2.2），可以得到线性齐次方程组

$$\begin{cases} (m\omega^2 - 2\beta)A + 2\beta cosaqB &= 0 \\ 2\beta cosaqA + (M\omega^2 - 2\beta)B &= 0 \end{cases} \tag{2.5}$$

其有解条件为

$$\begin{vmatrix} (m\omega^2-2\beta)A & 2\beta cosaqB \\ 2\beta cosaqA & (M\omega^2-2\beta)B \end{vmatrix} = mM(\omega^2)^2-2\beta(m+M)\omega^2+4\beta^2 sin^2 aq = 0 \tag{2.6}$$

求解该一元二次方程可得 $\omega^2$ 的两个解为

$$\omega^2 = \beta\frac{m+M}{mM}\left\{1\pm\left[1-\frac{4mM}{(m+M)^2}sin^2 aq\right]^{1/2}\right\} \tag{2.7}$$

即声学波（Acoustic Branch）格波频率的平方

$$\boxed{\omega_-^2 = \beta\frac{m+M}{mM}\left\{1-\left[1-\frac{4mM}{(m+M)^2}sin^2 aq\right]^{1/2}\right\}} \tag{2.8}$$

和光学波（Optical Branch）格波频率的平方

$$\boxed{\omega_+^2 = \beta\frac{m+M}{mM}\left\{1+\left[1-\frac{4mM}{(m+M)^2}sin^2 aq\right]^{1/2}\right\}} \tag{2.9}$$

## 2.1 长波极限

“长波极限”，顾名思义就是当波数 $q\to 0$ 时的极限。这时声学波和光学波会呈现不同的特点——我们可以着重考虑两种原子的振动特点，尤其是振幅的特点，即格波方程中 A 和 B 的关系。由以上推导过程我们已经获得两类波的格波频率，接下来我们将两类波的频率分别带回其格波方程，寻找 A 和 B 的关系。

### 2.1.1 声学波

首先考虑声学波中两种原子振动振幅之比

$$\left(\frac{B}{A}\right)_- = -\frac{m\omega_-^2-2\beta}{2\beta cosaq} \tag{2.10}$$

在 $q\to 0$ 时，$sin^2 aq\to 0$。因此对于式（2.8），有 $\omega_-^2\to 0$。又有 $q\to 0$ 时，$cosaq\to 1$，从而根据式（2.10）可知

$$\boxed{\left(\frac{B}{A}\right)_- \approx -\frac{0-2\beta}{2\beta\cdot 1} = 1} \tag{2.11}$$

上式的意思即，在长波极限，声学波中两种原子振幅趋近于一致。

另外，当 $q\to 0$ 时，有无穷小近似 $sin^2 aq\approx (aq)^2$，因此

$$\omega_-^2 \approx \frac{2\beta}{m+M}(aq)^2 \tag{2.12}$$

也即

$$\boxed{\omega_{-} \approx a\sqrt{\frac{2\beta}{m+M}}q = k\cdot q} \tag{2.13}$$

上式说明，在长波极限，声学波格波频率 $\omega_{-}$ 与波数 $q$ 成比例。这与连续介质中的弹性波性质相似。长声学波就是把一维链看成是连续介质中的弹性波。这也就是声学波命名的由来。

### 2.1.2 光学波

再考虑光学波中两种原子振动振幅之比。

$$\left(\frac{B}{A}\right)_{+} = -\frac{m\omega_{+}^{2} - 2\beta}{2\beta cosaq} \tag{2.14}$$

在 $q \to 0$ 时，对式（2.9）有

$$\omega_{-}^{2} \approx 2\beta\frac{m+M}{mM} \tag{2.15}$$

从而根据式（2.14）可知

$$\boxed{\left(\frac{B}{A}\right)_{+} \approx -\frac{2\beta\frac{m+M}{M} - 2\beta}{2\beta\cdot 1} = -\frac{m}{M}} \tag{2.16}$$

上式的意思即，在长波极限，光学波中两种原子振幅不同，有相对振动。