3.2 晶格振动的量子化－声子

一. 简谐近似和简正坐标
二. 晶格振动的量子化
三. 声子

参考黄昆书 3.1节（p79-82）
及p88-92
Kittel 书　4.3和4.4 两节

一.简谐近似和简正坐标：

从经典力学的观点看，晶格振动是一个典型的小振动问题，由于质点间的相互作用，多自由度体系的振动使用拉格朗日方程处理比上节中使用的牛顿方程要简单明了。本节采用简正坐标重新处理。（见黄昆书p79-82）

N个原子组成的晶体，平衡位置为 R_n ，偏离平衡位置的位移矢量为：$u_n(t)$

所以原子的位置表示为：　$R_n'(t) = R_0 + u_n(t)$

势能在平衡位置展开：

$$V = V_0 + \sum_{i=1}^{3N}\left(\frac{\partial V}{\partial u_i}\right)_0 u_i + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3N}\left(\frac{\partial^2 V}{\partial u_i \partial u_j}\right)_0 u_i u_j + \frac{1}{6}\sum_{i=1}^{3N}\left(\frac{\partial^3 V}{\partial u_i \partial u_j \partial u_k}\right)_0 u_i u_j u_k + \text{ggg}$$

只保留 u_i 的二次项称作简谐近似。N个原子体系的动能函数为：$T = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3N} m_i \left(\frac{du_i}{dt}\right)^2$ 系统总能量 $E = T + V$ ，由于势能项中包含有依赖于两原子坐标的交叉项，这给理论表述带来了困难，同时，**由于 u_i 的变化可以是连续的，所以总能量也是连续的。这是经典力学描述的结果**。

为使系统的势能和动能表示更加简化，现引入简正坐标：

$$\sqrt{m_i}u_i = \sum_{i=1}^{3N} a_{ij} Q_i$$

$Q_1, Q_2, Q_3, Q_4, \text{ggg} Q_{3N}$

引入简正坐标后，使系统的能量表达更为简洁，没有了交叉项：

$$T=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3N}\dot{Q}_i^2 \qquad V=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3N}w_i^2Q_i^2$$

系统的拉格朗日函数为：$L=T-V$

哈密顿量：$H=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3N}\left(p_i^2+w_i^2Q_i^2\right)$　　正则动量：$p_i=\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_i}=\dot{Q}_i$

经过变换后的哈密顿量已经不包含交叉项，**成为我们所熟知的经典谐振子哈密顿量之和**，也就是说在新的坐标系里，系统的原子振动可以被描述成简谐振子的运动，即**用简正坐标来描述独立的简谐振动。**

应用正则方程得到：$\ddot{Q}_i+w_i^2Q_i=0 \qquad i=1,2,3,\cdots,3N$

系统振动由 3N个独立的谐振子来表述

任意简正坐标的解：$Q_i=A\sin(w_it-d)$

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。

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。

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，这才是最为重要的。

二. 晶格振动的量子化：

经坐标变换后写出体系经典哈密顿量可以直接作为量子力学的出发点，写出波动方程：

$$\left[\sum_{i=1}^{3N}\frac{1}{2}\left(-\mathbf{h}^2\frac{\partial^2}{\partial Q_i^2}+w_i^2Q_i^2\right)\right]y(Q_1,Q_2,\cdots,Q_{3N})=Ey(Q_1,Q_2,\cdots,Q_{3N})$$

显然方程表示一系列相互独立的简谐振子，对于其中每一个简正坐标都有：

$$\frac{1}{2}\left[-\mathbf{h}^2\frac{\partial^2}{\partial Q_i^2}+w_i^2Q_i^2\right]j(Q_i)=e_ij(Q_i)$$

谐振子的解是大家熟知的：$e_i=(n_i+\frac{1}{2})\mathbf{h}w_i$

独立谐振子能量量子化是量子力学的结论。

而系统本征态的能量为：

$$E=\sum_{i=1}^{3N}e_i=\sum_{i=1}^{3N}(n_i+\frac{1}{2})\mathbf{h}w_i$$

通过经典力学，我们已经获得晶格振动频率 ω 的表达式。

显然，一旦找到了简正坐标，就可以直接过渡到量子理论。每一个简正坐标，对应一个谐振子方程，波函数是以简正坐标为宗量的谐振子波函数，其能量本征值是量子化的，所以把量子力学的基本结论应用到晶格振动上才揭示出了**晶格振动的**最基本的特征。

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 $\hbar w_j$ 被称为声子（**Phonon**）。这是晶格振动量子理论最重要的结论。

在经典理论中，能量是连续的，量子理论修正了这点。经典理论中原子振动要用集体运动方式描述的观点，相应的色散关系也是正确的。因此，量子理论并没有改变其结论，只是对各模式振幅的取值做了量子化的规定。

声子概念引入后给我们处理具有强相互作用的原子集体——晶体带来了极大方便，而且生动地反映了晶格振动能量量子化的特点。类似的描述方式和概念是固体物理的一大特征，他们被称作元激发，**Elementary excitation**

声子是固体中最重要的元激发之一。

三. 声子：

- **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。但声子与电子或光子是有本质区别的，**声子只是反映晶体原子集体运动状态的激发单元，它不能脱离固体而单独存在，它并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。所以，**声子是一种准粒子。**

  而光子是一种真实粒子，它可以在真空中存在。

- **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。

- 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，称为发射 一个声子；若电子从晶格获得 $\hbar\omega_i$ 的能量，则称为吸收一个声子。

- 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，声子数目并不守恒。声子可以产生，也可以湮灭。**其作用过程遵从能量守恒和准动量守恒**。

- 对于由N个原子组成的晶体，有3N个振动模式，即有3N种不同的声子。因此，晶格振动的总能量为：

$$E=\sum_{j=1}^{3N}\left(n_i+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_i$$

◆ 引入声子概念后，对于由强相互作用的原子的集体运动状态——晶格振动的每一个格波，便可看作是由数目为 n_i 能量为 $\hbar\omega_i$ 的理想声子组成，而整个系统则是由众多声子组成的声子气体。**引入声子的概念不仅能生动地反映出晶格振动能量量子化的特点，而且在处理与晶格振动有关的问题时，可以更加方便和形象。**

例如：处理晶格振动对电子的散射时，便可以当作电子与声子的碰撞来处理。声子的能量是 $\hbar\omega_i$ ，动量是 $\hbar q$ 。

又例如：**热传导可以看成是声子的扩散；热阻是于声子被散射等等。**使许多复杂的物理问题变得如此形象和便于处理是引入声子概念的最大好处。

◆ 但它的动量不是真实动量，因为当波矢增加一个倒格矢量时，不会引起声子频率和原子位移的改变。

$$w(q) = w(q + G_h)$$

即从物理上看，他们是等价的，这是晶体结构周期性的反映。但在处理声子同声子、声子同其它粒子之间的相互作用时，

$\mathbf{h}q$ 又具有一定的动量性质，所以叫做“准动量”。

◆ 声子气体不受 Pauli 原理的限制，粒子数目不守恒，故属于玻色子系统，服从 Bose-Einstein 统计，当系统处于热平衡状态时，平率为 ω_i 的格波的平均声子数由波色统计给出：

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

其平均能量：

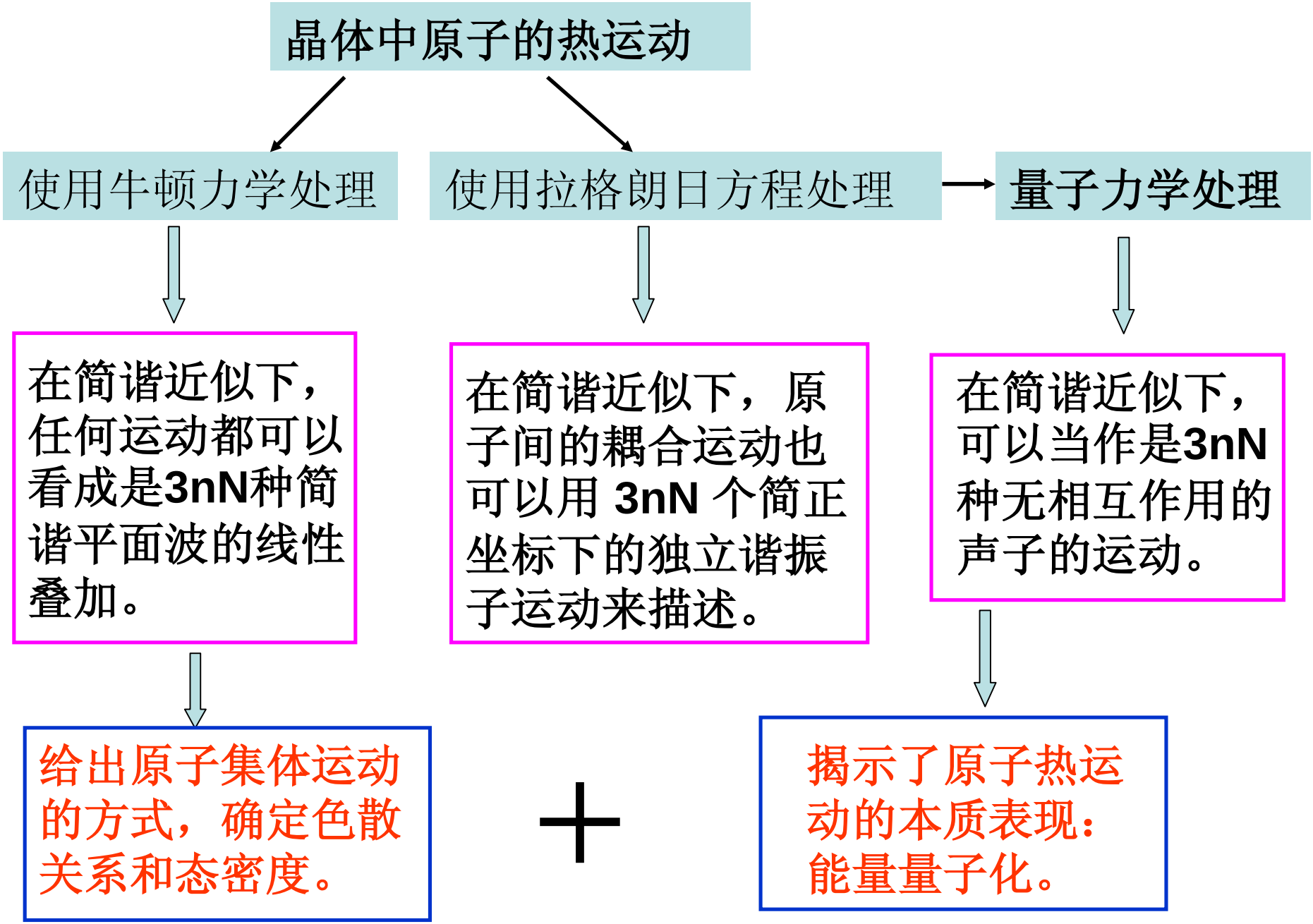
$$\bar{e}_i = \frac{\hbar w_i}{2} + \frac{\hbar w_i}{e^{\hbar w_i / k_B T} - 1}$$

公式第一项是T=0K时的零点能。

$$k_B T >> \hbar w_i, \bar{e}_i \approx k_B T$$

思考题:

1. 何谓声子？试将声子的性质与光子做一比较，在比较中加深对声子的理解。
2. 在一定温度下，一个光学模式的声子数目多，还是一个声学模式的声子数目多？
3. 同一个振动模式，温度低的时候声子数目多，还是温度高的时候声子数目多？
4. 从晶体 Si 晶格振动色散关系的实测曲线（黄昆书p102）判断，是光学支的态密度大，还是声学支的态密度大？
5. 声子的数目是否守恒？高温时，频率为 ω 的格波声子数目与温度成何关系？
6. 晶体在绝对零度时，还有声子（或问还有格波）存在吗？


晶体中原子的热运动
使用牛顿力学处理
使用拉格朗日方程处理
量子力学处理
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。
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。
在简谐近似下，可以当作是3nN种无相互作用的声子的运动。
给出原子集体运动的方式，确定色散关系和态密度。
+
揭示了原子热运动的本质表现：能量量子化。