

一般情况下一维 j 原子链的求解及色散关系讨论

董佳豪 张立新

(南开大学物理科学学院, 天津 300071)

摘 要 本文推导了一般情况下一维 j 原子链晶格振动的计算模型, 并在简谐近似和最近邻近近似下获得了晶格的运动方程组。令 $j=2, 3$ 分别计算了一维双原子链及三原子链晶格振动的色散关系, 得到了与现有教材及文献相同的结论。本文还讨论了原子质量顺序、恢复力系数顺序等特有晶体结构参数及原子质量大小、恢复力系数大小、晶格常数等一般晶体结构参数对一维三原子链晶格振动色散关系的影响。本文内容可为固体物理教学提供额外的教学素材, 帮助学生深入理解晶格振动相关内容, 也可为工程上带通滤波器的研发提供一定的参考。

关键词 一般情况; 一维 j 原子链; 晶格振动; 色散关系; 固体物理

SOLUTION AND THE DISCUSSION OF DISPERSION RELATION OF ONE-DIMENSIONAL J -ATOM CHAIN IN GENERAL

DONG Jiahao ZHANG Lixin

(School of physics, Nankai University, Tianjin 300071)

Abstract In this paper, the theoretical calculation model of lattice vibration of one-dimensional j -atom chain in general is established, and the equations of lattice vibration are obtained under simple harmonic approximation and nearest neighbor approximation. Then by setting $j=2, 3$, we get the dispersion relation of lattice vibration of one-dimensional diatomic and triatomic chains in general, and get the same conclusion as existing textbooks and references. This paper also discusses the influence of special crystal structure parameters such as atomic mass order, restoring force coefficient order, and typical crystal structure parameters such as atomic mass, restoring force coefficient and lattice constant on the lattice vibration dispersion relationship of one-dimensional three atom chain in general. The content of this paper can provide additional teaching materials for solid state physics teaching, help students understand the relevant content of lattice vibration, and also provide a certain reference for the research and development of band-pass filter in engineering.

Key words in general; one dimensional j -atom chain; lattice vibration; dispersion relation; solid state physics

在固体物理学教学过程中, 一维原子链晶格振动的经典理论是研究晶格原子运动规律的重要基础理论, 进而能够阐明固体宏观的物理性质。其中, 现有固体物理学教材中, 多基于经典力学在

简谐近似和最近邻近近似下求解一维单原子链和双原子链模型的格波解和色散关系^[1]。为进一步拓展固体物理教学内容, 深入了解色散关系, 秦春伟和郑金鑫等人讨论了一维双原子链和一维单原子

收稿日期: 2022-07-30

通讯作者: 张立新, 男, 教授, 从事固体物理教学等工作, lxzhang@nankai.edu.cn。

引文格式: 董佳豪, 张立新. 一般情况下一维 j 原子链的求解及色散关系讨论[J]. 物理与工程, 2023, 33(1): 35-42.

Cite this article: DONG J H, ZHANG L X. Solution and the discussion of dispersion relation of one-dimensional j -atom chain in general[J]. Physics and Engineering, 2023, 33(1): 35-42. (in Chinese)

链色散关系的内在联系,证明了两者的等效性^[2,3];孙美慧和赵远等人研究了一维三原子链的求解及原子质量对色散关系的影响规律^[4,5];郑世燕讨论了一维j原子链晶格振动色散关系的一般推导公式并分析了晶体结构参数对一维四原子链色散关系的影响^[6]。

然而,目前关于一般情况下一维原子链的求解及色散关系的讨论却鲜有报道,仅有刘艳晶等人讨论了一般情况下一维双原子链的色散关系和原子振动特点^[7]。一般情况即原胞内原子质量、最近邻原子间距和恢复力系数均不相同,其色散关系更具普遍性。本文拟采用原胞法,并在简谐近似和最近邻近似双重近似条件下,以一般情况下一维j原子链晶格振动模型为研究对象,推导一般情况下一维j原子链晶格振动方程组的一般表达式。同时,现有文献中的一维双原子链及一维三原子链的相关结论亦可由该一般表达式简化获得。最后,本文重点讨论了一般情况下一维三原子链晶格振动的色散关系和原子质量顺序、恢复力系数顺序等特有晶体结构参数及原子质量大小、恢复力系数大小、晶格常数等一般晶体结构参数对色散关系的影响。本文旨在为固体物理学教学提供额外的教学素材和参考,也可为工程上带通滤波器的研发提供一定的参考。

1 一般情况下一维j原子链模型

质量为 $m_1, m_2, m_3, \dots, m_j$ 的j种不同质量的原子按照一定顺序非等间距排列构成一维j原子链,其模型如图1所示。平衡时各相邻原子间距 $a_1, a_2, a_3, \dots, a_j$ 各不相同,最近邻原子间的恢复力系数 $\beta_1, \beta_2, \beta_3, \dots, \beta_j$ 也不相同,即原胞内原子质量、最近邻原子间距和恢复力系数均不相同,同时取晶格常数 $L = a_1 + a_2 + a_3 + \dots + a_j$ 。沿一维原子链建立坐标轴,适当选取坐标原点使第n个原胞中的 $m_1, m_2, m_3, \dots, m_j$ 平衡位置分别为 $nL, nL + a_1, nL + a_1 + a_2, \dots, (n+1)L - a_j$,由于热运动原子离开平衡位置的位移分别为 $\mu_{nL},$

$$\mu_{nL+a_1}, \mu_{nL+a_1+a_2}, \dots, \mu_{(n+1)L-a_j}。$$

2 格波解及色散关系

简谐近似下只考虑最近邻原子间的相互作用,根据经典牛顿力学理论,建立一维j原子链原胞内j个不同原子的运动方程分别为

$$m_1 \ddot{\mu}_{nL} = \beta_1 \mu_{nL+a_1} + \beta_j \mu_{nL-a_j} - (\beta_1 + \beta_j) \mu_{nL} \quad (1-1)$$

$$m_2 \ddot{\mu}_{nL+a_1} = \beta_2 \mu_{nL+a_1+a_2} + \beta_1 \mu_{nL} - (\beta_2 + \beta_1) \mu_{nL+a_1} \quad (1-2)$$

$$m_3 \ddot{\mu}_{nL+a_1+a_2} = \beta_3 \mu_{nL+a_1+a_2+a_3} + \beta_2 \mu_{nL+a_1} - (\beta_3 + \beta_2) \mu_{nL+a_1+a_2} \quad (1-3)$$

.....

$$m_j \ddot{\mu}_{(n+1)L-a_j} = \beta_j \mu_{(n+1)L} + \beta_{j-2} \mu_{(n+1)L-a_j-a_{j-1}} - (\beta_j + \beta_{j-2}) \mu_{(n+1)L-a_j} \quad (1-j)$$

方程组(1)为二阶微分方程组,设其试探解是频率为 ω 的简谐波

$$\mu_{nL} = A_1 e^{(qnL - \omega t)} \quad (2-1)$$

$$\mu_{nL+a_1} = A_2 e^{[q(nL+a_1) - \omega t]} \quad (2-2)$$

$$\mu_{nL+a_1+a_2} = A_2 e^{[q(nL+a_1+a_2) - \omega t]} \quad (2-3)$$

.....

$$\mu_{(n+1)L-a_j} = A_j e^{[q((n+1)L-a_j) - \omega t]} \quad (2-j)$$

将上述试探解分别带回方程组(1)得到关于振幅 $A_1, A_2, A_3, \dots, A_j$ 的齐次线性方程组,同时按照 $A_1, A_2, A_3, \dots, A_j$ 的顺序整理后得

$$A_1(-\beta_1 - \beta_j + m_1 \omega^2) + A_2 \beta_1 e^{iqa_1} + A_3 \cdot 0 + A_4 \cdot 0 + \dots + A_{j-1} \cdot 0 + A_j \beta_j e^{-iqa_j} = 0 \quad (3-1)$$

$$A_1 \beta_1 e^{-iqa_1} + A_2(-\beta_1 - \beta_2 + m_2 \omega^2) + A_3 \beta_2 e^{iqa_2} + A_4 \cdot 0 + \dots + A_{j-1} \cdot 0 + A_j \cdot 0 = 0 \quad (3-2)$$

$$A_1 \cdot 0 + A_2 \beta_2 e^{-iqa_2} + A_3(-\beta_2 - \beta_3 + m_3 \omega^2) + A_4 \beta_3 e^{iqa_3} + \dots + A_{j-1} \cdot 0 + A_j \cdot 0 = 0 \quad (3-3)$$

.....

$$A_1 \beta_j e^{iqa_j} + A_2 \cdot 0 + A_3 \cdot 0 + A_4 \cdot 0 + \dots + A_{j-1} \beta_{j-1} e^{-iqa_{j-1}} + A_j(-\beta_{j-1} - \beta_j + m_j \omega^2) = 0 \quad (3-j)$$

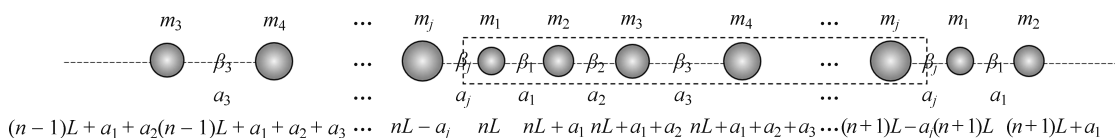


图1 一般情况下一维j原子链晶格振动模型

方程组(3)由 j 个方程所构成,此即为一般情况下一维 j 原子链晶格振动方程组的一般表达式。

2.1 一般情况下一维双原子链晶格振动($j=2$)

当 $j=2$ 时,即为一般情况下一维双原子链的晶格振动。此时方程组由式(3-1)与式(3-2)组成,同时令 $A_3=A_1$,其他系数都为 0。则此时有两个系数 A_1 和 A_2 ,当系数 A_1 和 A_2 有非零解时,式(3-1)和(3-2)需满足

$$\begin{vmatrix} -\beta_1 - \beta_2 + m_1 \omega^2 & \beta_1 e^{iqa_1} + \beta_2 e^{-iqa_2} \\ \beta_1 e^{-iqa_1} + \beta_2 e^{iqa_2} & -\beta_1 - \beta_2 + m_2 \omega^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (4)$$

由此可得

$$\begin{aligned} m_1 m_2 \omega^4 - (m_1 + m_2)(\beta_1 + \beta_2) \omega^2 + \\ 4\beta_1 \beta_2 \sin^2 \frac{qL}{2} = 0 \end{aligned} \quad (5)$$

这是关于 ω^2 的一元三次方程,可根据一元三次方程的求根公式获得其色散关系的解析表达式,其具体表达式在下文给出。

2.3 一般情况下一维四原子链晶格振动($j=4$)

当 $j=4$ 时,即为一般情况下一维四原子链的

$$\begin{vmatrix} -\beta_1 - \beta_4 + m_1 \omega^2 & \beta_1 e^{iqa_1} & 0 & \beta_4 e^{-iqa_4} \\ \beta_1 e^{-iqa_1} & -\beta_1 - \beta_2 + m_2 \omega^2 & \beta_2 e^{iqa_2} & 0 \\ 0 & \beta_2 e^{-iqa_2} & -\beta_2 - \beta_3 + m_3 \omega^2 & \beta_3 e^{iqa_3} \\ \beta_4 e^{iqa_4} & 0 & \beta_3 e^{-iqa_3} & -\beta_3 - \beta_4 + m_4 \omega^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (8)$$

这是关于 ω^2 的一元四次方程,求其解析解较繁琐,可以使用 MATLAB 等软件进行数值模拟,同时可以给出直观的图像。

2.4 一般情况下一维 j 原子链晶格振动($j \geq 5$)

以此类推,当 $j \geq 5$ 时,即为一般情况下一维 j

$$\begin{vmatrix} -\beta_1 - \beta_j + m_1 \omega^2 & \beta_1 e^{iqa_1} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \beta_j e^{-iqa_j} \\ \beta_1 e^{-iqa_1} & -\beta_1 - \beta_2 + m_2 \omega^2 & \beta_2 e^{iqa_2} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \beta_2 e^{-iqa_2} & -\beta_2 - \beta_3 + m_3 \omega^2 & \beta_3 e^{iqa_3} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \beta_j e^{iqa_j} & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \beta_{j-1} e^{-iqa_{j-1}} & -\beta_{j-1} - \beta_j + m_j \omega^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (9)$$

这是关于 ω^2 的一元二次方程,由此解得一般情况下一维双原子链的色散关系式为

$$\begin{aligned} \omega_{\pm}^2 = \frac{1}{2m_1 m_2} \left[(m_1 + m_2)(\beta_1 + \beta_2) \pm \right. \\ \left. \sqrt{(m_1 + m_2)^2 (\beta_1 + \beta_2)^2 - 16m_1 m_2 \beta_1 \beta_2 \sin^2 \frac{qL}{2}} \right] \end{aligned} \quad (6)$$

其中, ω_- 代表晶格振动中声频支格波的频率, ω_+ 代表晶格振动中光频支格波的频率。这与文献[7]所得结论相符。

2.2 一般情况下一维三原子链晶格振动($j=3$)

当 $j=3$ 时,即为一般情况下一维三原子链的晶格振动。此时方程组由式(3-1)、式(3-2)与式(3-3)组成,同时令 $A_4=A_1$,其他系数都为 0。则此时有 A_1 、 A_2 和 A_3 三个系数,当系数 A_1 、 A_2 和 A_3 有非零解时,式(3-1)、式(3-2)和式(3-3)需满足

晶格振动。此时方程组由式(3-1)、式(3-2)、式(3-3)与式(3-4)组成,同时令 $A_5=A_1$,其他系数都为 0。则此时有 A_1 、 A_2 、 A_3 和 A_4 四个系数,当系数 A_1 、 A_2 、 A_3 和 A_4 有非零解时,式(3-1)、式(3-2)、式(3-3)和式(3-4)需满足

原子链的晶格振动,此时共有 A_1 、 A_2 、 $\cdots$ 、 A_j j 个系数,当系数 A_1 、 A_2 、 $\cdots$ 、 A_j 有非零解时,式(3-1)、式(3-2)、 $\cdots$ 、式(3- j)需满足

这是关于 ω^2 的一元 j 次方程, 求其解析解较繁琐且相对困难, 可以考虑使用 MATLAB 等软件进行数值模拟, 同时可以给出直观的图像, 为分析研究一般情况下一维 j 原子链晶格振动特点提供一定的理论依据。

3 一般情况下一维三原子链色散关系影响因素讨论

为进一步了解一般情况下一维 j 原子链色散关系的特点, 我们以一维三原子链为例, 探讨了晶格参数对一般情况下一维三原子链色散关系的影响。

根据式(7)可得

$$\begin{aligned} & -m_1 m_2 m_3 \omega^6 + (m_1 m_3 \beta_1 + m_2 m_3 \beta_1 + \\ & m_1 m_2 \beta_2 + m_1 m_3 \beta_2 + m_1 m_2 \beta_3 + m_2 m_3 \beta_3) \omega^4 - \\ & (m_1 \beta_1 \beta_2 + m_1 \beta_2 \beta_3 + m_1 \beta_1 \beta_3 + m_2 \beta_1 \beta_2 + m_2 \beta_2 \beta_3 + \\ & m_2 \beta_1 \beta_3 + m_3 \beta_1 \beta_2 + m_3 \beta_2 \beta_3 + m_3 \beta_1 \beta_3) \omega^2 + \\ & 2\beta_1 \beta_2 \beta_3 (1 - \cos qL) = 0 \end{aligned} \quad (10)$$

由此可知, 一般情况下一维三原子链的色散关系与晶格常数 L 有关, 而与最近邻原子间距 a_1 、 a_2 和 a_3 不直接相关, 这与一般情况下一维双原子链的结论相同^[7]。由此可以推论: 对于一般情况下一维 j 原子链的色散关系, 其与晶格常数 L 有关, 而与最近邻原子间距 a_1 、 a_2 、 a_3 、 $\dots$ 、 a_j 不直接相关。这是由于在简谐近似和最近邻近近似下, 晶格原子受到的恢复力只与最近邻原子间的相对位移有关, 而与原子间的平衡距离无关^[7]。

对于特例 $\beta_1 = \beta_2 = \beta_3 = \beta$, $a_1 = a_2 = a_3 = a$ 的情况下, 式(10)可化简为

$$\begin{aligned} & -m_1 m_2 m_3 \omega^6 + 2\beta(m_1 m_3 + m_2 m_3 + m_1 m_2) \omega^4 - \\ & 3\beta^2(m_1 + m_2 + m_3) \omega^2 + 2\beta^3(1 - \cos 3qa) = 0 \end{aligned} \quad (11)$$

这与文献[4]的结果是相同的。

进一步解得方程(10)的解为

$$\begin{aligned} \omega_1 &= \left\{ \frac{-\left(\frac{m_1 m_3 \beta_1 + m_2 m_3 \beta_1}{m_1 m_2 \beta_2 + m_1 m_3 \beta_2 + m_1 m_2 \beta_3 + m_2 m_3 \beta_3} \right) + 2 \left[\frac{(m_1 m_3 \beta_1 + m_2 m_3 \beta_1 + m_1 m_2 \beta_2 + m_1 m_3 \beta_3 + m_1 m_2 \beta_3)^2 -}{4(m_1 + m_2 + m_3)(m_1 \beta_1 \beta_2 + m_1 \beta_2 \beta_3 + m_1 \beta_1 \beta_3 + m_2 \beta_1 \beta_2 + m_2 \beta_2 \beta_3 + m_2 \beta_1 \beta_3 + m_3 \beta_1 \beta_2 + m_3 \beta_2 \beta_3 + m_3 \beta_1 \beta_3)} \right]^{1/2} \cos \frac{\pi - \theta}{3}}{-3(m_1 + m_2 + m_3)} \right\}^{1/2} \\ \omega_2 &= \left\{ \frac{-\left(\frac{m_1 m_3 \beta_1 + m_2 m_3 \beta_1}{m_1 m_2 \beta_2 + m_1 m_3 \beta_2 + m_1 m_2 \beta_3 + m_2 m_3 \beta_3} \right) + 2 \left[\frac{(m_1 m_3 \beta_1 + m_2 m_3 \beta_1 + m_1 m_2 \beta_2 + m_1 m_3 \beta_3 + m_1 m_2 \beta_3)^2 -}{4(m_1 + m_2 + m_3)(m_1 \beta_1 \beta_2 + m_1 \beta_2 \beta_3 + m_1 \beta_1 \beta_3 + m_2 \beta_1 \beta_2 + m_2 \beta_2 \beta_3 + m_2 \beta_1 \beta_3 + m_3 \beta_1 \beta_2 + m_3 \beta_2 \beta_3 + m_3 \beta_1 \beta_3)} \right]^{1/2} \cos \frac{\pi + \theta}{3}}{-3(m_1 + m_2 + m_3)} \right\}^{1/2} \\ \omega_3 &= \left\{ \frac{-\left(\frac{m_1 m_3 \beta_1 + m_2 m_3 \beta_1}{m_1 m_2 \beta_2 + m_1 m_3 \beta_2 + m_1 m_2 \beta_3 + m_2 m_3 \beta_3} \right) - 2 \left[\frac{(m_1 m_3 \beta_1 + m_2 m_3 \beta_1 + m_1 m_2 \beta_2 + m_1 m_3 \beta_3 + m_1 m_2 \beta_3)^2 -}{4(m_1 + m_2 + m_3)(m_1 \beta_1 \beta_2 + m_1 \beta_2 \beta_3 + m_1 \beta_1 \beta_3 + m_2 \beta_1 \beta_2 + m_2 \beta_2 \beta_3 + m_2 \beta_1 \beta_3 + m_3 \beta_1 \beta_2 + m_3 \beta_2 \beta_3 + m_3 \beta_1 \beta_3)} \right]^{1/2} \cos \frac{\theta}{3}}{-3(m_1 + m_2 + m_3)} \right\}^{1/2} \end{aligned} \quad (12)$$

其中 $\theta = \arccos T$

$$\begin{aligned} T = & \frac{2 \left[\frac{m_1 m_3 \beta_1 + m_2 m_3 \beta_1}{m_1 m_2 \beta_2 + m_1 m_3 \beta_2 + m_1 m_2 \beta_3 + m_2 m_3 \beta_3} \right]^3 + 9 \left(\frac{m_1 + m_2}{m_3} \right) \left[\frac{m_1 m_3 \beta_1 + m_2 m_3 \beta_1}{m_1 m_2 \beta_2 + m_1 m_3 \beta_2 + m_1 m_2 \beta_3 + m_2 m_3 \beta_3} \right] \left[\frac{m_1 \beta_1 \beta_2 + m_1 \beta_2 \beta_3 + m_1 \beta_1 \beta_3 + m_2 \beta_1 \beta_2 + m_2 \beta_2 \beta_3 + m_2 \beta_1 \beta_3 + m_3 \beta_1 \beta_2 + m_3 \beta_2 \beta_3 + m_3 \beta_1 \beta_3}{m_1 \beta_1 \beta_2 + m_1 \beta_2 \beta_3 + m_1 \beta_1 \beta_3 + m_2 \beta_1 \beta_2 + m_2 \beta_2 \beta_3 + m_2 \beta_1 \beta_3 + m_3 \beta_1 \beta_2 + m_3 \beta_2 \beta_3 + m_3 \beta_1 \beta_3} \right] + 54 \left(\frac{m_1 + m_2}{m_3} \right)^2 (\beta_1 \beta_2 \beta_3) \sin^2 \frac{qL}{2}}{\left[\frac{(m_1 m_3 \beta_1 + m_2 m_3 \beta_1 + m_1 m_2 \beta_2 + m_1 m_3 \beta_3 + m_1 m_2 \beta_3)^2 -}{4(m_1 + m_2 + m_3)(m_1 \beta_1 \beta_2 + m_1 \beta_2 \beta_3 + m_1 \beta_1 \beta_3 + m_2 \beta_1 \beta_2 + m_2 \beta_2 \beta_3 + m_2 \beta_1 \beta_3 + m_3 \beta_1 \beta_2 + m_3 \beta_2 \beta_3 + m_3 \beta_1 \beta_3)} \right]^{3/2}} \end{aligned} \quad (13)$$

在原子质量、恢复力系数和晶格常数一定的情况下,通过 MATLAB 对 $\omega_1(q)$ 、 $\omega_2(q)$ 和 $\omega_3(q)$ 进行数值拟合可得色散关系曲线,如图 2 所示。一般情况下的一维三原子链共有 3 条色散关系曲线,其中包括 1 条声学支 ω_1 和 2 条光学支 ω_2 和 ω_3 。 $\Delta\omega_1$ 、 $\Delta\omega_2$ 和 $\Delta\omega_3$ 分别表示声学支、低频光学支和 高频光学支的频谱宽度,同时存在 $\Delta\omega'$ 和 $\Delta\omega''$ 2 个频率禁带。由式(12)可知,频谱宽度和频率禁带与 3 个原子的质量 m_1 、 m_2 、 m_3 ,3 个恢复力系数 β_1 、 β_2 、 β_3 及晶格常数 L 均有关,说明某种振动模式的格波是所有原子共同作用的结果,而不是某类原子单独的运动行为。

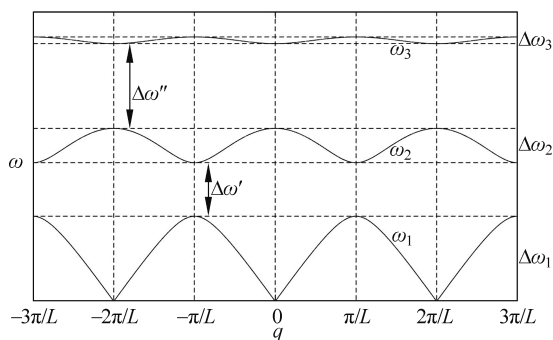


图 2 一般情况下一维三原子链色散关系曲线
($m_1 : m_2 : m_3 = 1 : 2 : 3$, $\beta_1 : \beta_2 : \beta_3 = 1 : 2 : 3$)

3.1 原子质量顺序对晶格振动的影响

对于一维三原子链,原胞内含有三种质量不同的原子,设轻重原子的质量比为 $1 : 2 : 3$ 。在恢复力系数和晶格常数 L 一定的情况下,原胞内原子质量共有 6 种顺序(见表 1)。

表 1 一维三原子链原胞内 6 种原子质量顺序

顺序编号	$m_1 : m_2 : m_3$
1	$1 : 2 : 3$
2	$1 : 3 : 2$
3	$2 : 3 : 1$
4	$2 : 1 : 3$
5	$3 : 1 : 2$
6	$3 : 2 : 1$

为进一步分析原子质量顺序对晶格振动的影响,分别获得 6 种原子质量顺序的色散关系曲线,如图 3 所示,其中恢复力系数比值设为 $\beta_1 : \beta_2 : \beta_3 = 1 : 2 : 3$ 。

由图 3 可得结论如下:

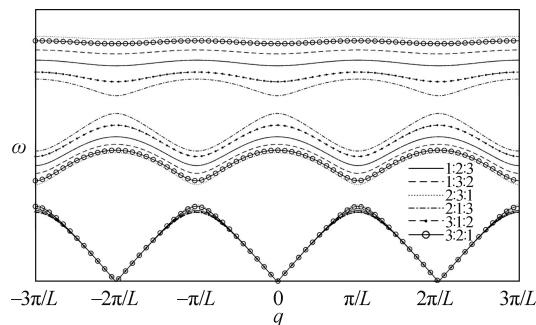


图 3 6 种原子质量次序的一般情况下一维三原子链色散关系曲线

(1) 简约布里渊区宽度不随原子质量顺序的变化而变化,说明简约布里渊区宽度与原子质量顺序无关。

(2) 原子质量次序对 3 种格波的色散频率均有影响,其中对声学支格波影响较小,对光学支格波影响较大。

(3) 6 条声学支格波和 12 条光学支格波具有明显的变化规则。对于频谱宽度最小的声学支格波,其低频光学支格波在 6 条低频光学支格波中频率值最大,且频谱宽度最大,而其高频光学支格波在 6 条高频光学支格波中频率最小,但频谱宽度最大,因此其第一频率禁带 $\Delta\omega'$ 最大,第二频率禁带 $\Delta\omega''$ 最小;对于频谱宽度最大的声学支格波,其低频光学支格波在 6 条低频光学支格波中频率值最小,且频谱宽度最小,而其高频光学支格波在 6 条高频光学支格波中频率最大,但频谱宽度最小,因此其第一频率禁带 $\Delta\omega'$ 最小,第二频率禁带 $\Delta\omega''$ 最大;其他格波则按照上述规则在最大值和最小值之间有序排列。

3.2 恢复力系数顺序对晶格振动的影响

对于一维三原子链,原胞内含有三种不同数值大小的恢复力系数,设不同恢复力系数的相对比值为 $1 : 2 : 3$ 。在原子质量和晶格常数 L 一定的情况下,三种不同的恢复力系数共有 6 种顺序。然而,根据排序的周期性可知,恢复力系数 6 种排序下形成的一维三原子链已经被包含在表 1 形成的 6 种一维三原子链中,它们是完全等效的,其对应关系如表 2 所示。

恢复力系数 6 种顺序下所对应的原子链的色散关系曲线如图 4 所示,其中原子质量比值设为 $m_1 : m_2 : m_3 = 1 : 2 : 3$ 。可以看出,其同图 3 的色散关系曲线有相同的规律,并可通过表 2 将图 3 和图 4 的曲线一一对应。

表 2 6 种恢复力系数顺序下形成的原子链与表 1 形成的原子链对应关系

$\beta_1 : \beta_2 : \beta_3$	对应表 1 $m_1 : m_2 : m_3$ 排序下的原子链
1 : 2 : 3	1 : 2 : 3
1 : 3 : 2	2 : 1 : 3
2 : 3 : 1	3 : 1 : 2
2 : 1 : 3	3 : 2 : 1
3 : 1 : 2	2 : 3 : 1
3 : 2 : 1	1 : 3 : 2

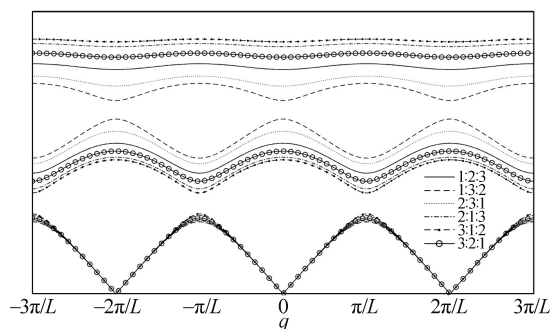


图 4 6 种弹性力恢复系数顺序的一般情况下一维三原子链色散关系曲线

3.3 原子质量大小对晶格振动的影响

为进一步探究原子质量大小对晶格振动的影响,我们以 $m_1 : m_2 : m_3 = 1 : 2 : 3$, $\beta_1 : \beta_2 : \beta_3 = 1 : 2 : 3$ 的一维三原子链为例进行探究。在恢复力系数和晶格常数保持不变的情况下,每次只改变 3 个原子质量中的一个进行数值模拟获得相应的色散关系曲线,如图 5、图 6、图 7 所示。可以验证,对于其他情况下的一维三原子链既具有相同的性质,也存在不同的性质,其具体结论如下:

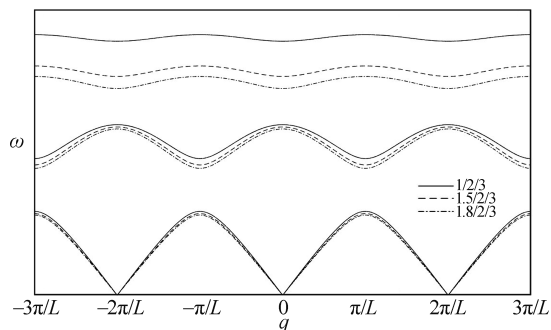


图 5 不同 m_1 下一般情况下一维三原子链色散关系曲线

(1) 简约布里渊区宽度不随原子质量大小的变化而变化,说明简约布里渊区宽度与原子质量大小无关。

(2) 原子质量大小对 3 种格波的频率值均有

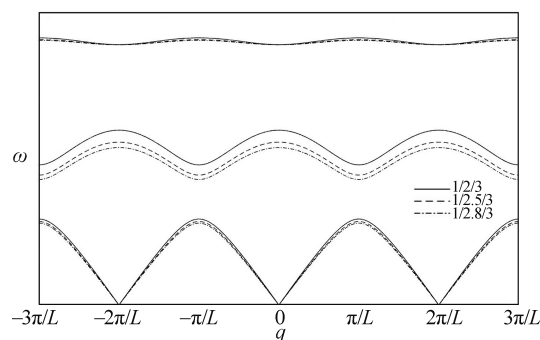


图 6 不同 m_2 下一般情况下一维三原子链色散关系曲线

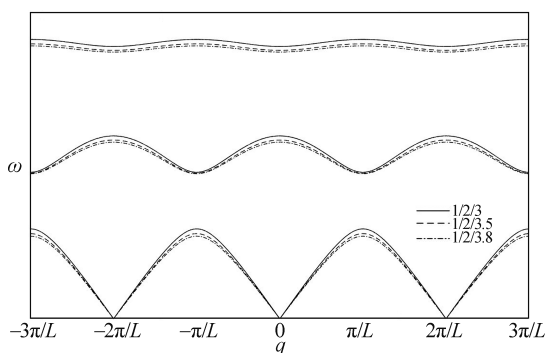


图 7 不同 m_3 下一般情况下一维三原子链色散关系曲线

影响,只是影响程度不同,其中对声学支格波的影响较小,对光学支格波的影响较大。

(3) 改变 m_1 ,对高频光学支格波影响较大;改变 m_2 ,对低频光学支格波影响较大;改变 m_3 ,对 3 支格波的影响均较小。

(4) 分别提高每个原子质量后,每支格波的频率值均会降低,因此声学支格波的频谱宽度变窄,而光学支格波的频谱宽度变化较小,但格波间的频率禁带变化较为明显。

对于其他情况下的一维三原子链其色散关系也具有(1)、(2)、(4)的特点,但对于(3)可能会有不同,如对于 $m_1 : m_2 : m_3 = 2 : 1 : 3$, $\beta_1 : \beta_2 : \beta_3 = 1 : 2 : 3$ 的一维三原子链,当改变轻原子质量 m_1 时,如图 8 所示,高频光学支格波和低频光学支格波都会发生较大改变,与上述结论不同。

上述结论对于工程应用中的带通滤波器的设计可提供一定的理论参考。

3.4 恢复力系数大小对晶格振动的影响

为进一步探究恢复力系数大小对晶格振动的影响,我们仍以 $m_1 : m_2 : m_3 = 1 : 2 : 3$, $\beta_1 : \beta_2 : \beta_3 = 1 : 2 : 3$ 的一维三原子链进行探究。在原子质量不变的情况下,每次只改变 3 个恢复力系数中的一个进行数值模拟获得相应的色散关系曲

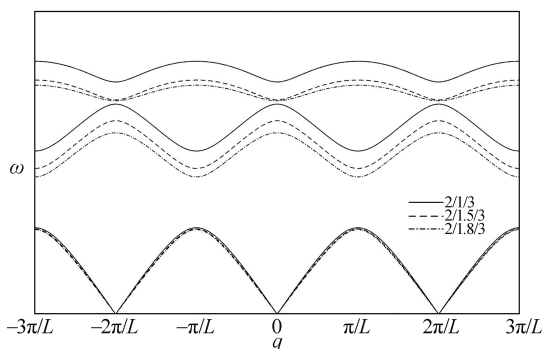


图 8 不同 m_1 下一般情况下一维三原子链色散关系曲线,此时原胞内原子质量排序为 $m_1 : m_2 : m_3 = 2 : 1 : 3$,恢复力系数为 $\beta_1 : \beta_2 : \beta_3 = 1 : 2 : 3$

线,如图 9、图 10、图 11 所示。可以验证,在其他情况下的一维三原子链既具有相同的性质,也存在不同的性质,其具体结论如下:

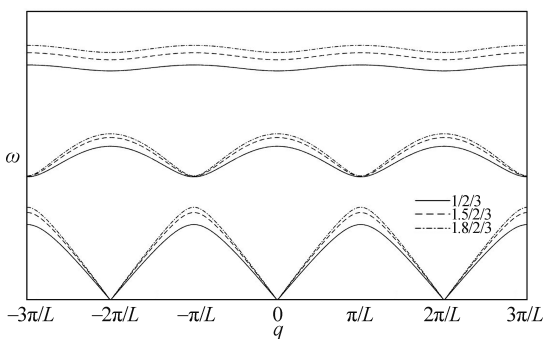


图 9 不同 β_1 下一般情况下一维三原子链色散关系曲线

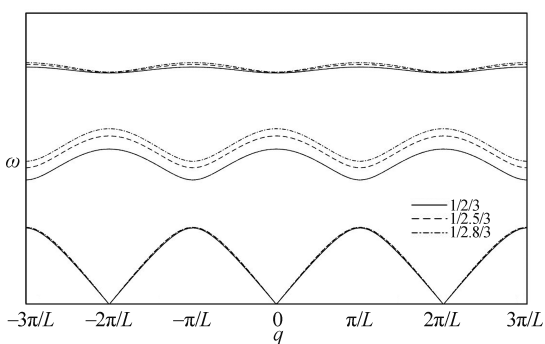


图 10 不同 β_2 下一般情况下一维三原子链色散关系曲线

(1) 简约布里渊区宽度不随恢复力系数大小的变化而变化,说明简约布里渊区宽度与恢复力系数大小无关。

(2) 恢复力系数大小对 3 种格波的频率值均有影响,只是影响程度不同。

(3) 改变 β_1 ,对 3 支格波的影响均较大,改变 β_2 ,对低频光学支格波影响较大,改变 β_3 ,对高频

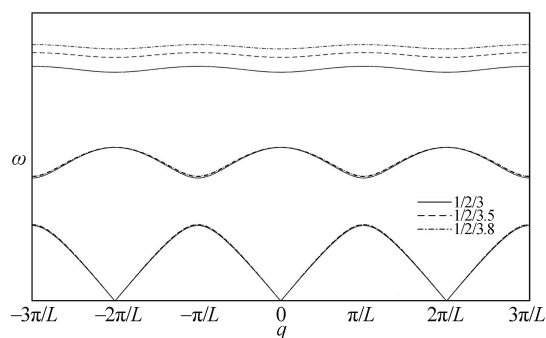


图 11 不同 β_3 下一般情况下一维三原子链色散关系曲线

光学支格波影响较大。

(4) 分别提高每个恢复力系数后,每支格波的频率值都会升高。当改变 β_2 和 β_3 时,格波的频谱宽度变化较小,但格波间的频率禁带变化较为明显;当改变 β_1 时,声学支格波频谱宽度变宽且变化明显,低频光学支格波宽度变宽且变化明显,高频光学支格波宽度变化不明显,说明声学波和低频光学波波速变大而高频光学波波速变化较小,同时格波间的禁带变化较为明显。

对于其他情况下的一维三原子链也具有(1)、(2)的特点,但对于(3)、(4)可能会有不同。如对于 $m_1 : m_2 : m_3 = 1 : 2 : 3$, $\beta_1 : \beta_2 : \beta_3 = 2 : 1 : 3$ 的一维三原子链,当改变恢复力系数 β_2 时,如图 12,高频光学支格波和低频光学支格波都会发生较大改变,同时两个频率禁带变化也较为明显。

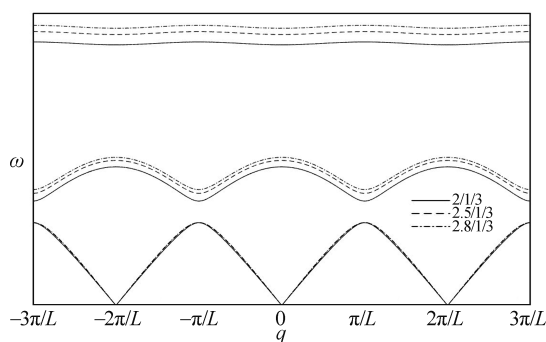


图 12 不同 β_2 下一般情况下一维三原子链色散关系曲线,此时原胞内原子质量排序为 $m_1 : m_2 : m_3 = 1 : 2 : 3$,恢复力系数排序为 $\beta_1 : \beta_2 : \beta_3 = 2 : 1 : 3$

上述结论对于工程应用中的带通滤波器的设计可提供一定的理论参考。

3.5 晶格常数对晶格振动的影响

由上文可知,色散关系曲线与最近邻两个原子的间距 $a_1, a_2, a_3, \dots, a_j$ 无关,而与原胞内所有原子间距之和即晶格常数 L 有关。为进一步探究晶格

常数大小对晶格振动的影响,保持原子质量与恢复力系数保持不变,其中 $m_1 : m_2 : m_3 = 1 : 2 : 3$, $\beta_1 : \beta_2 : \beta_3 = 1 : 2 : 3$,令晶格常数分别为 $L, L/2, L/4$,其色散关系曲线如图 13 所示,由图 13 可得如下结论:

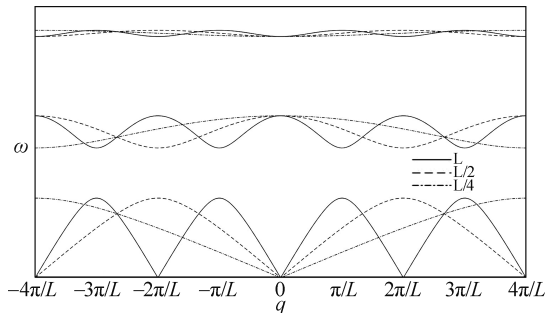


图 13 不同晶格常数下一维三原子链色散关系曲线

(1) 当晶格常数为 L 时,简约布里源区的范围为 $(-\pi/L, \pi/L)$;当晶格常数缩减为 $L/2$ 时,简约布里源区的范围为 $(-2\pi/L, 2\pi/L)$;当晶格常数缩减为 $L/4$ 时,简约布里源区的范围为 $(-4\pi/L, 4\pi/L)$ 。这符合正倒格子的关系,即倒空间中的简约布里源区宽度和正空间中的晶格常数大小呈反比例关系。

(2) 随着晶格常数的改变,频谱宽度和频率禁带宽度均未发生改变,说明频谱宽度和频率禁带宽度与晶格常数 L 无关。

(3) 在简约布里源区范围内,曲线斜率随晶格常数的减小而减小,说明格波速度随晶格常数的减小而减小。

4 结论

本文在简谐近似和最近邻近近似下,对一般情况下一维 j 原子链进行了研究,并给出了其晶格振动方程组的一般表达式。之后我们以一般情况下一维三原子链为例,给出了其解析解,并用数值模拟给出了其色散关系曲线,探讨了原子质量顺序、恢复力系数顺序、原子质量大小、恢复力系数大小、晶格常数等参数对晶格振动和色散关系的影响。研究表明:在各原子间距一定以及轻重原子质量比值和恢复力系数比值一定的情况下,6 种原子质量顺序和 6 种恢复力系数顺序共可以形成 6 种一维三原子链,且 6 种一维三原子链的格波频率值、频谱宽度和频率禁带宽度均不相同。同时不同的排序下,三个格波的频率值遵循一定的变

化规则。另外,对于不同原子质量顺序的原子链,改变原子质量大小既有一些共同的变化特性,也有不同的变化特性;对于不同恢复力系数顺序的原子链,改变恢复力系数大小既有一些共同的变化特性,也有不同的变化特性,这在以往的文献当中还没有报道过。一维三原子链的色散关系与最近邻原子的间距无关,而与晶格常数相关,且简约布里源区的宽度和晶格常数的大小呈反比例关系。

本文不仅可以推出固体物理学教材及相关文献当中已有的相关结论,也可以得到一些有意义的新结论。本文内容可以为固体物理学教学提供额外的教学素材,也可为工程上带通滤波器的设计提供一定的理论参考。

参 考 文 献

- [1] 陆栋,蒋平. 固体物理学[M]. 北京:高等教育出版社,2011: 52-60.
- [2] 秦春伟,胡权,曹思遥,等. 一维单原子链和双原子链晶格振动色散关系的联系[J]. 课程教育研究, 2013(25):241-242. QIN C W, HU Q, CAO S Y, et al. Relation between lattice vibration dispersion relation of one-dimensional monatomic chain and diatomic chain[J]. Course Education Research, 2013(25): 241-242. (in Chinese)
- [3] 郑金鑫,王月媛,胡建民,等. 同质量原子一维晶格振动的色散关系[J]. 哈尔滨师范大学自然科学学报,2019,35(2):54-57. ZHENG J X, WANG Y Y, HU J M, et al. Dispersion relation of one-dimensional lattice vibration of same mass atom [J]. Journal of natural science of Harbin Normal University, 2019, 35(2): 54-57. (in Chinese)
- [4] 孙美慧,王月媛,胡建民,等. 一维三原子链的格波解及其色散关系[J]. 大学物理,2019,38(7):4-8. SUN M H, WANG Y Y, HU J M, et al. The lattice wave solution and its dispersion relation of one-dimensional triatomic chain[J]. University Physics, 2019, 38(7): 4-8. (in Chinese)
- [5] 赵远,胡建民,王月媛,等. 原子质量对一维三原子链色散关系的影响[J]. 大学物理,2021,40(4): 11-14+31. ZHAO Y, HU J M, WANG Y Y, et al. The influence of atomic mass on the dispersion relation of one-dimensional three-atom chain[J]. University Physics, 2021, 40(4): 11-14. (in Chinese)
- [6] 郑世燕,袁怡圃,常斗亮. 一维 j 原子链晶格振动的色散关系[J]. 大学物理,2022,41(5):13-18. ZHENG S Y, YUAN Y P, CHANG D L. Dispersion relation of one dimensional j -atom chain lattice vibration[J]. University Physics, 2022,41(5): 13-18. (in Chinese)
- [7] 刘艳晶,胡建民,王月媛,等. 一般情况下一维双原子链的求解及其色散关系[J]. 物理与工程, 2022,32(4):46-50. LIU Y J, HU J M, WANG Y Y, et al. Solution and dispersion relation of one dimensional diatomic chain in general[J]. Physics and Engineering, 2022, 32(4): 46-50. (in Chinese)