

基于 HTML5 的一维双原子链晶格振动演示

熊子扬 17307110150

摘要 作为最简单的复式晶格模型，一维双原子链模型的晶格振动在固体物理学中有重要的意义，也是理解光学波和声学波两种不同色散关系的基础。本实验采用 HTML5 技术，制作了简易的一维双原子链晶格振动的演示，展示了该模型的基本结论。

1 引言

晶体中的格点表示的是原子的平衡位置，晶格振动则是指原子在格点附近的振动。晶格振动的研究最早从晶体的热学性质开始，从经典的 Dulong-Petit 定律到量子的 Einstein 热容理论，晶格振动都有重要的地位。此外，晶体的电学性质、光学性质、超导电性、磁性、结构相变等性质都和晶格振动有关。

固体物理学中，一维双原子链是最简单的复式晶格模型。对于理解晶格振动，以及理解光学波和声学波的概念而言具有重要意义，也是理解三维晶格振动的基础。

课本上已经给出了该模型振动模式和色散关系的代数解，但是对于振动情况缺乏直观的演示。本实验使用了 HTML5 网页技术，借助图示对该模型有更加直观的展示，并且验证了一些基本结论。

2 实验原理

2.1 一维双原子链模型的色散关系

一维双原子链是最简单的复式晶格模型。设每个原胞有 2 个不同的原子 P 和 Q，平衡时相邻原子距离为 a ，P 和 Q 原子的质量分别为 m 和 M ，如图 1 所示。[1]

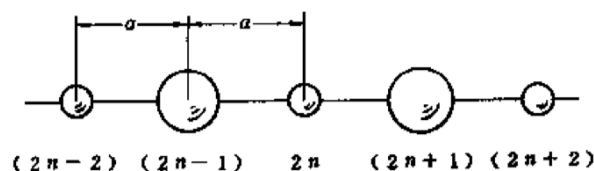


图 3-5 一维双原子链模型

图 1: 一维双原子链模型

设原子链由 N 个原胞组成。对每个原子进行编号，P 原子用偶数表示，Q 原子用奇数表示。只考虑最近邻相互作用（恢复力系数为 β ）和简谐近似，原子偏离格点的位移直接有一般形式：

$$\begin{aligned}\mu_{2n} &= Ae^{\omega t - (2n)aq} \\ \mu_{2n+1} &= Be^{\omega t - (2n+1)aq}\end{aligned}\quad (1)$$

其中参数角频率 ω 和波数 q 满足色散关系：

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

其中“+”号表示光学波，“-”号表示声学波。P 和 Q 原子的振幅相应满足：

$$\left(\frac{B}{A} \right)_{\pm} = -\frac{m\omega_{\pm}^2 - 2\beta}{2\beta \cos aq} \quad (3)$$

考虑到周期性边界条件， q 的取值为：

$$q = \frac{\pi}{2Na} h, \text{ 其中 } h = -\frac{N}{2} + 1, -\frac{N}{2} + 2, \dots, \frac{N}{2} \quad (4)$$

2.2 HTML5

HTML 是超文本标记语言（HyperText Markup Language）的缩写，是一种用于创建网页的标准标记语言。常见的网页基本都由 HTML 创建。

HTML5 支持 Canvas 元素。Canvas 是图像的容器，配合 JavaScript 脚本可以进行图像乃至动画的绘制，以及网页和图像之间参数的传递。

3 实验装置和过程

3.1 HTML5 网页基础图文部分的搭建

用 HTML5 语言搭建网页框架并填充基础内容。

网页分为四个章节，分别为简介、图示、结论和参考文献。在开头部分插入标题、作者、校徽以及目录。在图示部分插入控制参数的一系列按钮和滑块，并预留用于绘制图像的 Canvas 元素。

在图示部分中，我们选取周期内原胞个数 $N = 4000$ 。绘制两个图像，分别为晶格振动情况图示（选择连续排列的 7 个原胞进行演示）和色散关系函数图像。设置两个按钮分别控制当前演示色散关系的类型（声学波/光学波）和晶格振动情况图示的开始/停止。设置两个滑块分别控制 Q 原子和 P 原子的质量比 $\frac{M}{m}$ 和当前波数 q 。如图 2 所示。

对于晶格振动图像图示，特别说明如下：

1. 图中红色为 P 原子，质量为 m ；蓝色为 Q 原子，质量为 M ；黄色为单个原胞的质心。

图示为小范围内晶格振动的大致情况，以及该种情况在色散关系中的定位。

取 $N = 4000$ 。通过按钮选择声学波或光学波，通过滑块调节Q和P原子的质量比以及第一布里渊区内q的方向和大小，并控制画面的开始或停止。

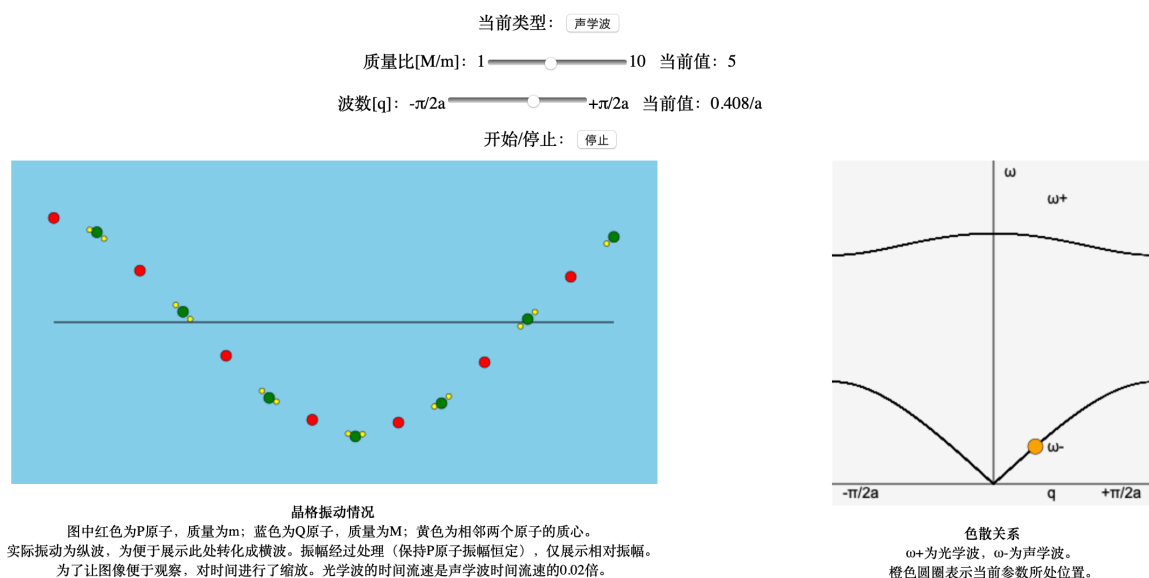


图 2: 网页图示部分

2. 实际的振动模式为纵波，也就是 P、Q 原子振动方向与横轴平行，但是为了方便演示并体现出函数关系，用纵向位移代替横向位移。即，横向对应原子在位置上的分布，纵向表示当前振动的位移。
3. 空间的尺度：图中的原子和质心仅表示位置，实际原子大小及其和距离的比例关系并不在图像上体现，这是为了演示方便。此外，振动的位移也是相对位移，并且将红色的 P 原子振幅 A 设为定值。实际上，该模型在不附加条件的情况下也只能给出相对位移 $\frac{B}{A}$ ，因此这一点是合理的。
4. 时间的尺度：常规参数下，光学波的振动频率要比声学波快很多，并且就显示效果而言二者的频率都过快。因此为了让图示清晰，对时间流速进行了放慢，并且光学波的时间流速设置为声学波时间流速的 0.02 倍。

色散关系函数图像中，上下两支曲线分别代表光学波和声学波，曲线会随质量比参数的改变而改变，图像上的黄点表示当前色散类型和波数在图像上的对应位置。

3.2 JavaScript 脚本的编写

JavaScript 脚本用来控制参数并绘制 Canvas 图像。编写了 main.js 脚本，并引用了用于动画绘制的脚本 utils.js。mian.js 脚本分为四大部分，分别为定义、函数、事件和初始化。

定义部分中，标记了网页中的两个 Canvas 元素和各按钮、滑块元素，并且定义了一系列用于图像绘制的变量。如图 3所示。

函数部分中，定义了多个函数，如图 4所示。它们的作用如下：

`updateInfo()` 在网页初始化时，根据按钮和滑块数据记录参数，并调用 `drawOmef()` 函数。

```

1 // Canvases
2 var vibf = document.getElementById("vibration_figure"),
3     convibf = vibf.getContext("2d"),
4     omef = document.getElementById("omega_figure"),
5     conomef = omef.getContext("2d");
6
7 // Get Elements
8 var massRange = document.getElementById("massRange"),
9     waveRange = document.getElementById("waveRange"),
10    typeButton = document.getElementById("typeButton"),
11    startButton = document.getElementById("startButton");
12 mass = document.getElementById("mass");
13 wave = document.getElementById("wave");
14
15 // Plot Variables
16 var st = 40; // interval in vibf
17 var ST = 2;
18 var x_arr = new Array(14),
19     y_arr = new Array(14);
20
21 // Physical Variables
22 var N = 4000; // cell numbers
23 var type = true, // true = Acounstics, false = Optics
24     paused = true;
25 var A = 100, B = 100; // amplitude of P & Q
26 var x = 0, y = 0, X = 0, Y = 0; // coordinates of vibf & omef
27 var t = 0; // time
28 var h = 0, q = 0; // wavenumber
29 var r = 5; // radius of P & Q
30 var omega = 1; // angular frequency
31 var M = 1; // mass of Q

```

图 3: JavaScript 代码定义部分

drawOmef() 绘制色散关系图像。

drawVibf() 绘制晶格振动情况动画的一帧。

draw(currentTime) 控制时间流速，调用 **drawVibf()** 函数，进行晶格振动情况动画的绘制。

cX(x) 和 **iY(Y)** 进行图像绘制中必要的坐标换算。

事件部分中，定义了四个事件对网页中按钮和滑块的变化做出响应，在按钮或滑块对应的参数改变时，及时将参数变化传递到程序中，并重新绘制色散关系图像。

初始化部分中，在网页初始化过程中运行 **updateInfo()** 和 **draw()** 函数，分别进行色散关系图像的绘制和晶格振动情况动画的绘制。最后两个部分如图 5 所示。

最终效果：网页初始化时，图像就能够正确显示。在任意时刻用按钮或滑块改变参数，图像都能够实时响应。

```

33 // Functions
34 > function updateInfo() {...
41 }
42
43 > function drawOmef() {...
110 }
111
112 > function drawVibf() {...
174 }
175
176 > function draw(currentTime) {...
187 }
188
189 > function cX(x) {...
191 } // x: px -> real
192
193 > function iY(Y) {...
195 } // y: real -> px

```

图 4: JavaScript 代码函数部分

```

198 // Events
199 > waveRange.onChange = function (e) {...
204 }
205
206 > massRange.onChange = function (e) {...
210 }
211
212 > startButton.onclick = function (e) {...
222 }
223
224 > typeButton.onclick = function (e) {...
235 }
236
237 // Initialization
238 conomef.font = "14px Arial";
239 conomef.fillStyle = "black";
240 updateInfo();
241 draw();

```

图 5: JavaScript 代码事件部分和初始化部分

3.3 调试并进行实验

运行网页，进行适当的调试，进行实验。

1. 点击开始，让晶格振动情况动画开始运作。
2. 切换声学波和光学波，观察二者的不同特点。

3. 改变质量比，观察图像的变化。
4. 改变波数，观察图像的变化。

4 实验结果和分析

点击开始按钮，晶格振动情况动画开始运作。

切换声学波和光学波。可以发现，在长波近似（波数 q 的绝对值较小）下，声学波中振动情况类似连续介质中的振动情况，两种原子振动方向相同，振幅几乎相等，如上面的图 2 所示；光学波中两种原子振动方向相反，质心振幅很小，如图 6 所示。

图示为小范围内晶格振动的大致情况，以及该种情况在色散关系中的定位。

取 $N = 4000$ 。通过按钮选择声学波或光学波，通过滑块调节 Q 和 P 原子的质量比以及第一布里渊区内 q 的方向和大小，并控制画面的开始或停止。

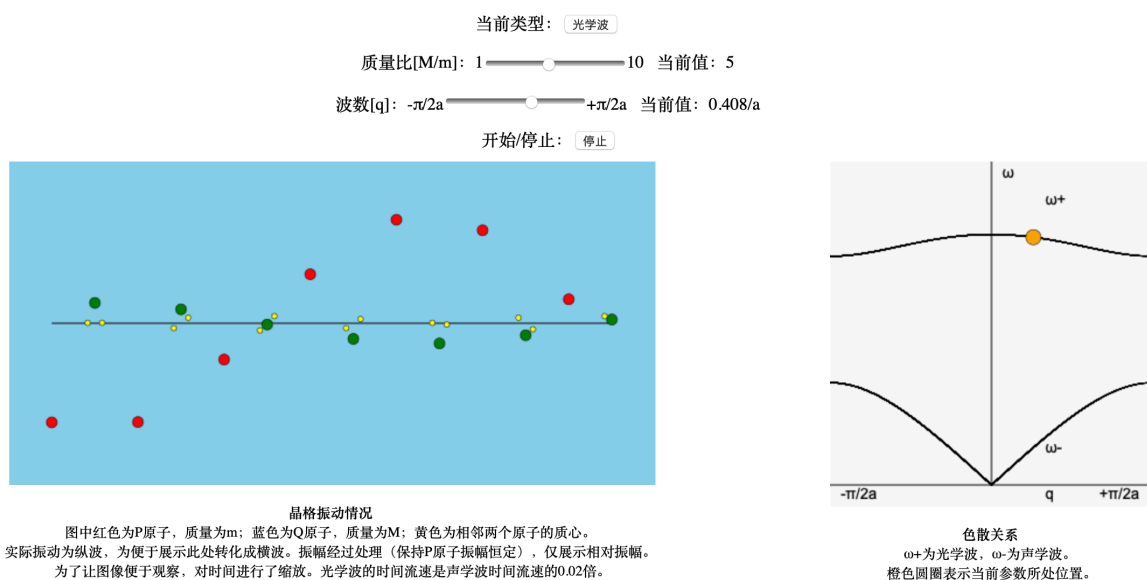


图 6: 光学波长波极限图示

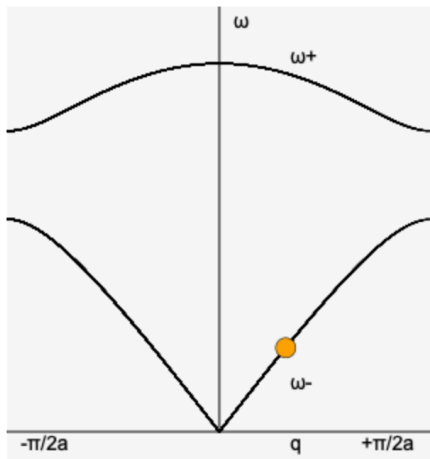
改变质量比，可以发现随着 $\frac{M}{m}$ 的增大，光学波和声学波的频率均降低，且色散关系图像趋于平缓，如图 7 和 8 所示。

改变波数，可以发现相对振幅和频率都在发生变化。对于声学波，波数绝对值越大，频率越大；对于光学波，波数绝对值越大，频率越低。在质量比不为 1 的情况下（若质量比为 1，模型退化为一维单原子链，光学波消失），光学波频率最小值大于声学波频率最大值，光学波总是比声学波频率高。

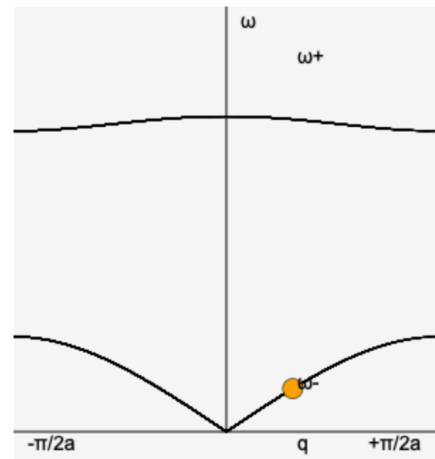
5 实验结论

通过对图示的观察，可以直观地验证以下结论：

1. 长波近似下，声学波两种原子振动几乎一致，可以视作连续介质；光学波两种原子振动相反，相邻原子质心位置几乎不变。



色散关系
 $\omega+$ 为光学波， $\omega-$ 为声学波。
 橙色圆圈表示当前参数所处位置。



色散关系
 $\omega+$ 为光学波， $\omega-$ 为声学波。
 橙色圆圈表示当前参数所处位置。

图 7: 质量比 $\frac{M}{m}$ 较小时的色散关系

图 8: 质量比 $\frac{M}{m}$ 较大时的色散关系

2. 随着质量比 $\frac{M}{m}$ 的增大，频率降低，色散关系图像趋于平缓。
3. 声学波波数绝对值越大，频率越大；光学波波数绝对值越大，频率越低。
4. 光学波频率高于声学波。

参考文献

[1] 黄昆、韩汝琦, 固体物理学. 北京: 高等教育出版社, 1988