

1. 由 N 个 (N 为大数目) 原子组成一维线性链 (原子间距为 a , 质量为 m , 回复力为 f), 写出其动力学方程, 并利用 $s_n(t) = u(q) \exp[i(qna - \omega t)]$ 的表示来求解

a) 将求得的色散 $\omega(q)$ 与双原子链的情况进行比较。双原子链的色散为:

$$\omega^2 = f \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm f \left[\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4}{M_1 M_2} \sin^2 \frac{qa}{2} \right]^{1/2}$$

b) 证明: 声子的总动量 $\sum_{n=1}^N m \dot{s}_n(t)$ 消失。

c) 证明, 当进行 $s_n(t) = s(x = na, t)$ 的替换, 并且利用泰勒级数定义 $s_{n+1}(t)$ 和 $s_{n-1}(t)$ 的表示, 对于长的波长, 链的动力学方程会转变为弹性波的波动方程。

d) 比较结果中的波速, 与长杆中声波的波速。并确定其有效弹性模量。(提示: 对于长杆, 声波的声速为 $c = \sqrt{E/\rho}$, E 为弹性模量, ρ 为密度)

2. 在 fcc 晶体中, 原子与其最近邻原子用弹簧相联, 计算沿 (100) 方向传播的径向和横向声子的色散关系。利用对称性确定可能的简并度。在其他高对称方向, 同样的考虑是否适用。请指出哪些声子可用线性链运动方程描述。请注意, 原子位移在相平面中的效应。考虑布里渊区边界的声子, 画出其原子的位移。

3. 计算下面系统的热能和比热, 并解释两个结果的差别:

系统 b) 是否对应真实的物理系统

a) 双谐振子系统。

b) 双能级系统。

4. 计算并绘图:

双原子链(质量比 1: 5)中声子的相速度和群速度, 并估计光学模对其热导的贡献。