一维交替质量弹簧链的振动模态分析

231503031 汤轶文

June 9, 2025

1 问题背景

在固体物理中，晶格的振动行为对材料的热学、光学和声学性质具有重要影响。本文研究一维交替质量的弹簧-小球系统中正常模的振动特性，该模型可类比于实际晶格中的声子色散关系，并展示了声学支与光学支的分离。

2 物理建模与理论推导

我们考虑一维弹簧链系统，由质量交替为 m_1 和 m_2 的 N 个小球组成，相邻小球由劲度系数为 k 的弹簧连接，忽略阻尼。

系统的势能可以写为:

$$V = \frac{k}{2} \sum_{i=1}^{N-1} (x_{i+1} - x_i)^2$$

引入 $N \times N$ 的刚度矩阵 K，其形式为三对角矩阵:

$$K = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \ddots & \vdots \\ 0 & -1 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & 2 & -1 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

质量矩阵为对角矩阵 $M = \mathrm{diag}(m_1, m_2, m_1, m_2, \ldots)$。牛顿第二定律写为矩阵形式:

$$M\ddot{\boldsymbol{x}} + K\boldsymbol{x} = 0$$

令 $\boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{u}e^{i\omega t}$，代入上式得广义特征值问题：

$$K\boldsymbol{u} = \omega^2 M\boldsymbol{u}$$

3 数值实现

我们采用 Python 实现上述模型，对 $A = M^{-1}K$ 进行对角化，获得系统的本征频率 ω 和模态 $\boldsymbol{u}$。

主要参数设置

- 质量 $m_1 = 1.0$, $m_2 = 2.0$
- 弹簧劲度系数 $k = 1.0$
- 系统粒子数 $N = 100$

关键代码

```python
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

N = 100
k = 1.0
m1 = 1.0
m2 = 2.0

K = 2*np.eye(N) - np.eye(N, 1) - np.eye(N, -1)
masses = np.array([m1 if i % 2 == 0 else m2 for i in range(N)])
M = np.diag(masses)
A = np.linalg.inv(M) @ K
omega2, modes = np.linalg.eigh(A)
omega = np.sqrt(omega2)
```

我们对前 $N/2$ 个模态作为声学支，其余作为光学支，并与波矢 q 建立对应关系：

$$q_n = \frac{n\pi}{N/2+1}, \quad n = 1, 2, \ldots, N/2$$

4 计算结果与分析

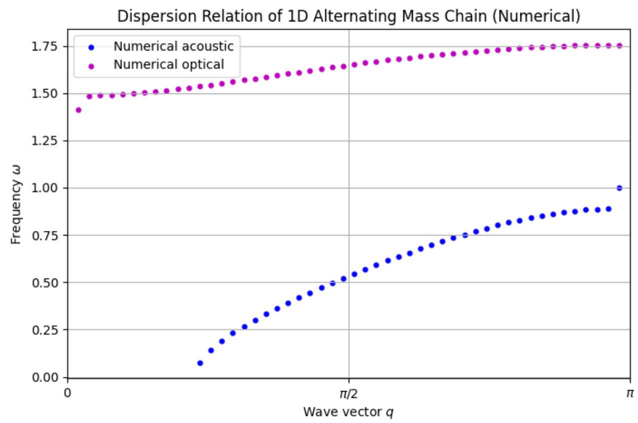

Figure 1: 交替质量弹簧链的色散关系

从图中可以观察到：

- 声学支（蓝色）频率从 0 单调上升，表现为系统整体平移和低频振动模；
- 光学支（紫色）频率较高，表现为相邻质量反向振动；
- 色散关系呈非线性，符合实际晶格动力学中双原子链模型的结果。

5 结论

本研究数值求解了一维交替质量弹簧链的正常模问题。通过对 $M^{-1}K$ 进行对角化，成功获得系统的声学支与光学支振动模态和对应频率。结果验证了交替质量对声子色散关系的显著影响，可为理解固体物理中的晶格动力学行为提供基础模型支持。

附录：完整程序

```python
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

N = 100
k = 1.0
m1 = 1.0
m2 = 2.0

K = 2*np.eye(N) - np.eye(N, k=1) - np.eye(N, k=-1)
masses = np.array([m1 if i % 2 == 0 else m2 for i in range(N)])
M = np.diag(masses)
A = np.linalg.inv(M) @ K
omega2, modes = np.linalg.eigh(A)
omega = np.sqrt(omega2)

q_vals = np.arange(1, N//2+1) * np.pi / (N//2 + 1)

omega_ac = omega[:N//2]
omega_op = omega[N//2:N]

plt.figure(figsize=(8,5))
plt.scatter(q_vals, omega_ac, c='b', s=12, label='Numerical
    acoustic')
plt.scatter(q_vals, omega_op, c='m', s=12, label='Numerical
    optical')
plt.xlabel("Wave vector $q$")
plt.ylabel("Frequency $\omega$")
plt.title("Dispersion Relation of 1D Alternating Mass Chain (
    Numerical)")
plt.grid()
plt.xlim(0, np.pi)
plt.xticks([0, np.pi/2, np.pi], ["0", r"$\pi/2$", r"$\pi$"])
plt.legend()
plt.savefig("dispersion.png")
plt.show()
```