

考虑一维原子链的振动，取周期边条件，有¹：

$$\ddot{x} = -Ax, \quad (-A)_{ij} = \delta_{i-1,j} + \delta_{i+1,j} - 2\delta_{ij}, \quad x \in \mathbb{C}(t) \quad (2.a.1)$$

单频振动 $x(t) = x e^{-i\omega t}$ ，注意到 $\frac{\partial^2}{\partial t^2} e^{-i\omega t} = (-i\omega)^2 e^{-i\omega t} = -\omega^2 e^{-i\omega t}$ ，可得：

$$Ax = \lambda x, \quad \lambda = \omega^2, \quad x \in \mathbb{C} \quad (2.a.2)$$

采用固体物理中的符号约定，记平衡时原子间距为 a ，则上式有平面波解：

$$x_n = e^{inaq}, \quad \lambda = \omega^2 = 4 \sin^2 \left(\frac{aq}{2} \right) \quad (2.a.3)$$

其中波矢 $q \in \frac{2\pi}{Na} \cdot \mathbb{Z}$ ，由周期性，可限制 $aq \in (-\pi, \pi]$ 或 $[-\pi, \pi)$ ，恰给出 N 个模式；进一步，

$$\lambda_{\max} = \begin{cases} 4 \sin^2 \left(\frac{\pi}{2} \right) = 4, & N \text{ 为偶数,} \\ 4 \sin^2 \left(\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{2N} \right) = 4 \cos^2 \left(\frac{\pi}{2N} \right), & N \text{ 为奇数,} \end{cases} \quad (2.a.4)$$

$$x_n = \begin{cases} e^{in\pi} = (-1)^n, & N \text{ 为偶数,} \\ (-1)^n \exp \left(-i\pi \frac{n}{N} \right), & N \text{ 为奇数,} \end{cases}$$

① [1] 注： A 的分量能写为这一形式，当且仅当 $N \geq 3$ 。 $N = 2$ 时，编号 $i \pm 1$ 原子等同，实际有：

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 2 \end{pmatrix}$$

$N = 1$ 时，模型退化为一个首尾相连的轻弹簧圈，不存在振动模式， $A = \mathbf{0}$ 。