计算物理学 (A) 第二次大作业 第 1 题

截止日期：5 月 28 日

1 求解一维谐振子链

图1是一维谐振子链的示意图，虚线为每个谐振子的平衡位置。总共有 N 个谐振子，相邻谐振子间距为 a。用 q_n 来表示第 n 个谐振子相对于平衡位置的偏移量。考虑周期性的边界条件，即谐振子链首尾相连 $(q_{N+1} = q_1)$，则该体系的拉氏量可以写为

$$L = T - V = \sum_{n=1}^{N} \frac{m}{2} \dot{q_n}^2 - \sum_{n=1}^{N} \frac{\kappa}{2} (q_{n+1} - q_n)^2 \tag{1}$$

其中 m 为每个谐振子的质量，κ 为弹性系数。由此可以写出谐振子的运动方程

$$m\ddot{q_n} = \kappa(q_{n+1} + q_{n-1} - 2q_n) \tag{2}$$

注意到当 $a \to 0$ 时有极限

$$\frac{q_{n+1} - 2q_n + q_{n-1}}{a^2} \to \frac{\partial^2}{\partial x^2} q(x,t) \tag{3}$$

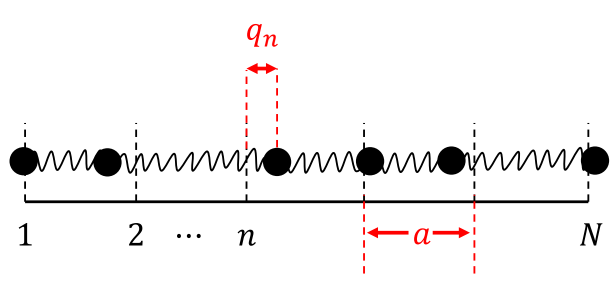

图 1: 一维谐振子链

其中 $x = na$. 方程2变成波动方程

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - v^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)q(x,t) = 0 \tag{4}$$

其中 $v = \sqrt{a^2\kappa/m}$. 在傅里叶变换下，方程4简化成对角形式

$$(\omega^2 - v^2k^2)q_{k,\omega} = 0 \tag{5}$$

由此得到色散关系 $\omega^2 = v^2k^2$. 受此启发，对于离散方程2我们可以采取相同办法来分析其频谱特征，只是傅里叶变换要变成离散傅里叶变换

$$q_n(t) = \sum_k \frac{e^{ikan}}{\sqrt{N}}a_k(t), \quad a_k(t) = \sum_n \frac{e^{-ikan}}{\sqrt{N}}q_n(t) \tag{6}$$

上述变换6应将方程2变成对角形式

$$\ddot{a}_k + \omega_k^2 a_k = 0 \tag{7}$$

ω_k 关于 k 的关系即为色散方程。下面我们从矩阵变换的角度来思考这个问题：

方程2可以写出矩阵方程

$$m\ddot{q} = \kappa Aq, \quad q = \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ \vdots \\ q_n \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} -2 & 1 & & & 1 \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & -2 & 1 \\ 1 & & & 1 & -2 \end{pmatrix} \tag{8}$$

所谓的傅里叶变换其实是在将矩阵 A 进行对角化，所以 A 的本征值应为方程7中的 $-\omega_k^2$，本征矢构成能将 A 对角化的变换矩阵，就应对应坐标变换6。这就给出了一个数值求解一维谐振子链色散关系的方法：

试求：

1. 数值求解矩阵 A 的本征值和本证矢，本征值即为 N 个本征频率 $-\omega_k^2$，对本征矢（列向量）构成的变换矩阵的每一行做快速傅里叶变换，得到每个 ω_k 对应的 k. 画出 ω_k 关于 k 的变化曲线。

2. 将坐标变换式6代入方程2，得到解析的色散关系表达式，将其与数值解比较。

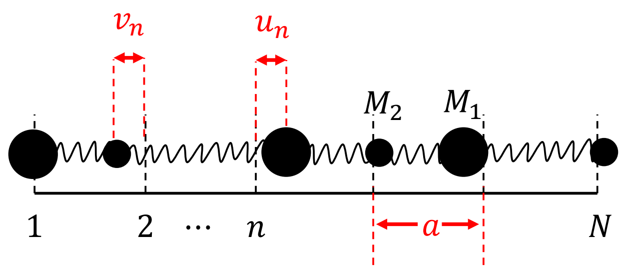

图 2: 一维双原子链

3. 如图2所示，为一维双原子链，$M1, M2$ 分别表示两种原子的质量。分别用 u_n, v_n 表示两种原子关于平衡位置的偏移量，则相应的运动方程为

$$\begin{aligned} M_1 \ddot{u_n} &= \kappa \left(v_{n-1} - 2u_n + v_n\right) \\ M_2 \ddot{v_n} &= \kappa \left(u_n - 2v_n + u_{n+1}\right) \end{aligned} \tag{9}$$

用上文所述的方法数值求解一维双原子链的色散关系。改变 $M1/M2$ 的大小，探究变化规律。结果可与解析结果

$$\omega^2 = \frac{\kappa}{M_1 M_2}\left(M_1 + M_2 \pm \sqrt{M_1^2 + M_2^2 + 2M_1M_2\cos(ka)}\right) \tag{10}$$

进行比较。