

补充材料:

二元氧化物 Yb_3TaO_7 的非晶状热传导机理*

王学智^{1)†} 汤雨婷²⁾ 车军伟³⁾ 令狐佳璐¹⁾ 侯兆阳¹⁾

1) (长安大学理学院应用物理系, 西安 710064)

2) (湖南大学机械与运载工程学院, 汽车车身先进设计制造国家重点实验室, 长沙 410082)

3) (西安交通大学物理学院, 教育部物质非平衡合成与调控重点实验室, 西安 710049)

一维双原子链的声子色散关系

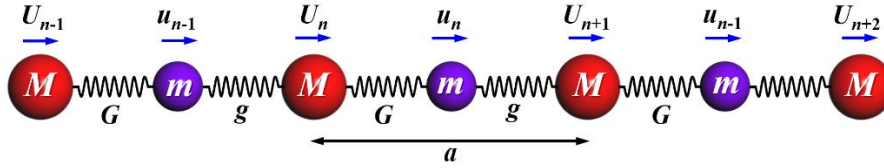


图 S1 一维双原子链

Fig. S1. One-dimensional diatomic chain.

各原子偏离平衡位置的位移如图 S1 所示, 考虑最近邻原子相互作用的简谐振动能为

$$E = \frac{1}{2} \sum_n \left[G(U_n - u_n)^2 + g(u_{n-1} - U_n)^2 \right]. \quad (\text{S1})$$

因此, 原子 M 的运动方程为

$$\begin{aligned} M \frac{\partial^2 U_n}{\partial t^2} &= - \frac{\partial E}{\partial U_n} \\ &= -G(U_n - u_n) - g(U_n - u_{n-1}) \\ &= -(G + g)U_n + gu_{n-1} + Gu_n. \end{aligned} \quad (\text{S2})$$

原子 m 的运动方程为

$$\begin{aligned} m \frac{\partial^2 U_n}{\partial t^2} &= -\frac{\partial E}{\partial U_n} \\ &= -g(u_n - U_{n+1}) - G(u_n - U_n) \\ &= -(G + g)u_n + gu_{n+1} + Gu_n. \end{aligned} \quad (\text{S3})$$

假设方程(S1)和方程(S2)的通解为平面波形式, 即

$$U_n = \sum_k \tilde{U}_k \exp(i[kna - \omega_k t]), \quad (\text{S4})$$

$$u_n = \sum_k \tilde{u}_k \exp(i[kna - \omega_k t]). \quad (\text{S5})$$

将(S4)式和(S5)式代入(S2)式和(S3)式可得

$$-M\omega_k^2 \tilde{U}_k = -(G + g)\tilde{U}_k + (G + g \exp(-ika))\tilde{u}_k, \quad (\text{S6})$$

$$-m\omega_k^2 \tilde{u}_k = -(G + g)\tilde{u}_k + (G + g \exp(ika))\tilde{U}_k. \quad (\text{S7})$$

将上面两式写成矩阵形式为

$$\begin{pmatrix} M\omega_k^2 - (G + g) & G + g \exp(-ika) \\ G + g \exp(ika) & m\omega_k^2 - (G + g) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{U}_k \\ \tilde{u}_k \end{pmatrix} = 0. \quad (\text{S8})$$

若上式有解, 则

$$[M\omega_k^2 - (G + g)][m\omega_k^2 - (G + g)] = [G + g \exp(ika)][G + g \exp(-ika)]. \quad (\text{S9})$$

由此, 得到一维双原子链的声子色散关系为

$$\omega_k^2 = \frac{(M + m)(G + g)}{2Mm} \pm \frac{\left((M + m)^2 (G + g)^2 - 16MmGg \sin^2(ka/2) \right)^{1/2}}{2Mm}. \quad (\text{S10})$$