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)] 令狐佳珺 [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

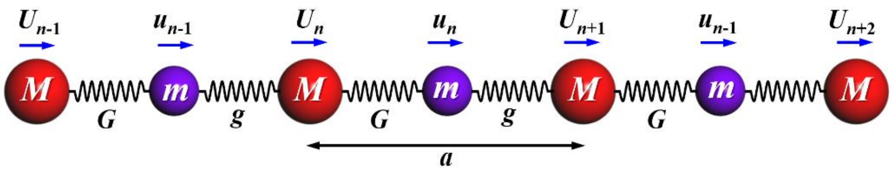

图 S1 一维双原子链

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

$$E=\frac{1}{2}\sum_{n}\left[G\left(U_{n}-u_{n}\right)^{2}+g\left(u_{n-1}-U_{n}\right)^{2}\right]. \tag{S1}$$

因此，原子 M 的运动方程为

$$\begin{aligned}M\frac{\partial^{2}U_{n}}{\partial t^{2}}&=-\frac{\partial E}{\partial U_{n}}\\&=-G\left(U_{n}-u_{n}\right)-g\left(U_{n}-u_{n-1}\right)\\&=-\left(G+g\right)U_{n}+gu_{n}-1+Gu_{n}.\end{aligned} \tag{S2}$$

原子 m 的运动方程为

$$\begin{aligned} m\frac{\partial^2 U_n}{\partial t^2} &= -\frac{\partial E}{\partial U_n} \\ &= -g\left(u_n - U_{n+1}\right) - G\left(u_n - U_n\right) \\ &= -\left(G+g\right)u_n + g u_{n+1} + G u_n . \end{aligned} \tag{S3}$$

假设方程(S1)和方程(S2)的通解为平面波形式，即

$$U_n = \sum_k \tilde{U}_k \exp\left(\mathrm{i}\left[kna - \omega_k t\right]\right), \tag{S4}$$

$$u_n = \sum_k \tilde{u}_k \exp\left(\mathrm{i}\left[kna - \omega_k t\right]\right). \tag{S5}$$

将(S4)式和(S5)式代入(S2)式和(S3)式可得

$$-M\omega_k^2 \tilde{U}_k = -\left(G+g\right)\tilde{U}_k + \left(G + g\exp\left(-\mathrm{i}ka\right)\right)\tilde{u}_k , \tag{S6}$$

$$-m\omega_k^2 \tilde{u}_k = -\left(G+g\right)\tilde{u}_k + \left(G + g\exp\left(-\mathrm{i}ka\right)\right)\tilde{U}_k . \tag{S7}$$

将上面两式写成矩阵形式为

$$\begin{pmatrix} M\omega_k^2 - \left(G+g\right) & G + g\exp\left(-\mathrm{i}ka\right) \\ G + g\exp\left(\mathrm{i}ka\right) & m\omega_k^2 - \left(G+g\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{U}_k \\ \tilde{u}_k \end{pmatrix} = 0 . \tag{S8}$$

若上式有解，则

$$\left[M\omega_k^2 - \left(G+g\right)\right]\left[m\omega_k^2 - \left(G+g\right)\right] = \left[G + g\exp\left(\mathrm{i}ka\right)\right]\left[G + g\exp\left(-\mathrm{i}ka\right)\right]. \tag{S9}$$

由此，得到一维双原子链的声子色散关系为

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