

# 计及次近邻非谐相互作用下原子链中的 非线性元激发\*

冯培成<sup>1,2)</sup> 王登龙<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup> 湘潭大学物理系, 湘潭 411105)

<sup>2)</sup> 零陵师专物理系, 零陵 425006)

(2002 年 6 月 11 日收到, 2002 年 10 月 19 日收到修改稿)

利用多重尺度法, 研究了谐振、非谐的近邻和次近邻相互作用下单原子链的晶格振动行为, 发现非传播孤子在单原子链 Brillouin 区的任何位置均有可能存在. 与仅考虑最近邻相互作用下的单原子链的孤子群速相比, 此时链中孤子的群速在 Brillouin 中央增大且衰减得更快, 在 Brillouin 区会出现另一个群速为零的位置. 同时, 孤子的幅度也相应增大且最大幅度孤子的位置趋向于 Brillouin 中央.

关键词: 单原子链, 非谐次近邻相互作用, 非传播的孤子

PACC: 0320, 6320, 4325

对于只考虑最近邻原子之间相互作用的线性谐振链, 通常只有链中存在杂质、点缺陷或局域力常数缺陷<sup>[1,2]</sup>, 线性谐振链中才存在着局域振荡模式. 这种外来杂质或缺陷引起的链中晶格杂质局域模<sup>[3]</sup>的振幅大小分布距中心指数衰减, 振动频率可位于系统的线性频率之上或禁带之中, 且杂质局域模在链中是不传播的, 即此局域振荡模式相应的振动频率钉扎于杂质或缺陷处. 近 20 年来, 这一杂质局域模已被人们进行了细致地研究且理论也比较成熟. 然而, 1988 年 Sievers 和 Takeno<sup>[4]</sup>在完整晶格中提出了四次非谐项的非线性链模型, 人们便热心于非谐链中的非线性问题的研究<sup>[5-8]</sup>. Denardo 等<sup>[9]</sup>在非谐点阵中观察到两种非传播的自局域结构: 畴壁 (domain walls) 和扭结孤立子 (kinks). 陈伟中<sup>[10,11]</sup>也在位相匹配或位相不匹配的情况下观察到自局域结构. 在理论方面, Huang 等<sup>[12,13]</sup>在计及最近邻谐振的非谐链中推出链中任何晶格位置均存在反对称性的内在局域模, 即链中既有传播的又有非传播的局域孤子, 且非传播的局域孤子在 Brillouin 区边界上存在, 非传播的局域孤子的振动频率位于 Brillouin 区的声频之上. Bonart 等<sup>[14]</sup>利用旋转波近似方法结合分子动力学数值模拟了考虑次近邻谐振的非谐链中包络孤立

子的具体特征. 我们<sup>[15-17]</sup>曾解析地研究了考虑次近邻谐振和最近邻三次、四次非谐相互作用下的单原子链中孤子的性质. 总之, 对于完整晶格的单原子链, 其任意位置都可能存在局域振荡模式——呼吸子等非线性元激发. 由于仅仅计及最近邻的非谐作用, 则人们一直认为非传播的局域孤子固定在 Brillouin 区的边界.

对于晶格振动是一种集体运动, 这种集体运动表现为格波在晶格中的传播, 其等价的元激发是声子<sup>[3]</sup>. 仅仅考虑原子链最近邻谐振相互作用, 链中有许多现象并不能很好地描述. 对于一些原子或分子晶体<sup>[18]</sup>, 当其四极矩比较显著而双极矩较小时, 即四极矩与四极矩的相互作用占主要地位, 则仅仅考虑链中的最近邻格点的相互作用就能达到要求的近似程度, 如利用非线性链的内在局域模的性质解释一些固体的低温比热的特性<sup>[19]</sup>. 但在特殊情况或精确度要求更高的情况下, 计算原子链中的某些物理规律就必须考虑双极矩与双极矩的相互作用<sup>[20]</sup>, 即必须考虑次近邻格点之间的相互作用. 如分子晶体中的激发转移 (excitation transfer)<sup>[18]</sup>和生物聚合物电子振动的能量输运 (vibron energy transport)<sup>[21]</sup>就必须涉及于次近邻之间的相互作用. 对于研究金属的某

\* 国家自然科学基金 (批准号 59871044 和 10005007) 及湖南省自然科学基金 (批准号 00JJY2007) 资助的课题.

些输运特性<sup>[22]</sup>亦如此. Bonart 等<sup>[14]</sup>考虑了次近邻谐振和最近邻四次非谐作用的单原子链的单一格点的势能为

$$V = \frac{1}{2} k_2 (u_{n+1} - u_n)^2 + \frac{1}{2} k'_2 (u_{n+2} - u_n)^2 + \frac{1}{4} O_4(l) u_n^4 + \frac{1}{4} k_4 (u_{n+1} - u_n)^4, \quad (1)$$

其中第二项为次近邻谐振项,  $u_n = u_n(t)$  是非线性点阵中第  $n$  个质量为  $M$  的原子的位移,  $k_i$  ( $i = 2, 4$ ) 是最近邻点阵中相互作用的力常数,  $k'_2$  是次近邻点阵的相互作用力常数,  $O_4$  是非谐次(四次方)的格点势( on-site potential )常数. 他们采用旋转波近似( rotating wave approximation )结合分子动力学模拟链中存在包络孤子. 我们<sup>[16]</sup>曾考虑次近邻谐振和三次方、四次方非谐相互作用的非线性点阵的单一格点的势能为

$$V = \frac{1}{2} k_2 (u_{n+1} - u_n)^2 + \frac{1}{2} k'_2 (u_{n+2} - u_n)^2 + \frac{1}{3} k_3 (u_{n+1} - u_n)^3 + \frac{1}{4} k_4 (u_{n+1} - u_n)^4, \quad (2)$$

得出链中存在包络孤子、扭结包络孤子和反扭结包络孤子. 根据双势阱模型<sup>[22, 23]</sup>, 本文考虑最近邻和次近邻非谐的共同相互作用出发, 从而链的单一格点的势能可以写成

$$V = \frac{1}{2} k_2 (u_{n+1} - u_n)^2 + \frac{1}{2} k'_2 (u_{n+2} - u_n)^2 + \frac{1}{4} O_4(l) u_n^4 + \frac{1}{4} k_4 (u_{n+1} - u_n)^4 + \frac{1}{4} k'_4 (u_{n+2} - u_n)^4, \quad (3)$$

因此, 整个单原子链的 Hamiltonian 为

$$H = \sum_n \left[ \frac{p_n^2}{2M} + \frac{1}{2} k_2 (u_{n+1} - u_n)^2 + \frac{1}{2} k'_2 (u_{n+2} - u_n)^2 + \frac{1}{4} O_4(l) u_n^4 + \frac{1}{4} k_4 (u_{n+1} - u_n)^4 + \frac{1}{4} k'_4 (u_{n+2} - u_n)^4 \right]. \quad (4)$$

对(4)式进行简单的运算就可得到其运动方程为

$$\frac{d^2 u_n}{dt^2} - I_2 (u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) - I'_2 (u_{n+2} + u_{n-2} - 2u_n) - O_4(l) u_n^3 - I_4 [(u_{n+1} - u_n)^3 + (u_{n-1} - u_n)^3] - I'_4 [(u_{n+2} - u_n)^3 + (u_{n+2} - u_n)^3] = 0, \quad (5)$$

式中  $I_i = \frac{k_i}{M}$ ,  $I'_i = \frac{k'_i}{M}$  ( $i = 2, 4$ ). 在此, 我们采用多

重尺度法<sup>[24]</sup>, 令

$$u_n(t) = \epsilon u^{(1)}(\xi_n, \tau, \phi_n) + \epsilon^2 u^{(2)}(\xi_n, \tau, \phi_n) + \epsilon^3 u^{(3)}(\xi_n, \tau, \phi_n) + \dots = \sum_{v=1}^{\infty} \epsilon^v u^{(v)}(\xi_n, \tau, \phi_n). \quad (6)$$

式中  $\epsilon$  为有限小的参数,  $u_{ij}^{(v)} = u^{(v)}(\xi_i, \tau, \phi_j)$ . 多重尺度的“慢”变量  $\xi_n = \epsilon(na - \lambda t)$ ,  $\tau = \epsilon^2 t$ , 而“快”变量  $\phi_n = nka - \omega t$  表示行波的相位,  $k, \omega$  分别是行波的波数和频率,  $a$  为晶格常数,  $\lambda$  是待定参数. 然而由于原子链的空间具有离散性<sup>[3]</sup>, 我们采用准离散近似<sup>[25]</sup>进行处理,

$$\frac{d^2}{dt^2} = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - 2\lambda\epsilon \frac{\partial^2}{\partial t \partial \xi_n} + \lambda^2 \epsilon^2 \frac{\partial^2}{\partial \xi_n^2} + 2\epsilon^2 \frac{\partial^2}{\partial t \partial \tau} - 2\lambda\epsilon^2 \frac{\partial^2}{\partial \tau \partial \xi_n} + \epsilon^4 \frac{\partial^2}{\partial \tau^2}. \quad (7)$$

利用(7)式, 将(6)式代入(5)式, 比较  $\epsilon$  的各次幂有

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} u_{n,n}^{(1)} - I_2 (u_{n,n+1}^{(1)} + u_{n,n-1}^{(1)} - 2u_{n,n}^{(1)}) - I'_2 (u_{n,n+2}^{(1)} + u_{n,n-2}^{(1)} - 2u_{n,n}^{(1)}) = 0, \quad (8)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} u_{n,n}^{(2)} - I_2 (u_{n,n+1}^{(2)} + u_{n,n-1}^{(2)} - 2u_{n,n}^{(2)}) - I'_2 (u_{n,n+2}^{(2)} + u_{n,n-2}^{(2)} - 2u_{n,n}^{(2)}) = 2\lambda \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \xi_n} u_{n,n}^{(1)} + I_2 a \frac{\partial}{\partial \xi_n} (u_{n,n+1}^{(1)} - u_{n,n-1}^{(1)}) + 2I'_2 a \frac{\partial}{\partial \xi_n} (u_{n,n+2}^{(1)} - u_{n,n-2}^{(1)}), \quad (9)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} u_{n,n}^{(3)} - I_2 (u_{n,n+1}^{(3)} + u_{n,n-1}^{(3)} - 2u_{n,n}^{(3)}) - I'_2 (u_{n,n+2}^{(3)} + u_{n,n-2}^{(3)} - 2u_{n,n}^{(3)}) = 2\lambda \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \xi_n} u_{n,n}^{(2)} - \left( \lambda^2 \frac{\partial^2}{\partial \xi_n^2} + 2 \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \tau} \right) u_{n,n}^{(1)} + I_2 a \frac{\partial}{\partial \xi_n} (u_{n,n+1}^{(2)} - u_{n,n-1}^{(2)}) + I_2 \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi_n^2} (u_{n,n+1}^{(1)} + u_{n,n-1}^{(1)}) + I'_2 \left[ 2a \frac{\partial}{\partial \xi_n} (u_{n,n+2}^{(2)} - u_{n,n-2}^{(2)}) + 2a^2 \frac{\partial^2}{\partial \xi_n^2} (u_{n,n+2}^{(1)} + u_{n,n-2}^{(1)}) \right] + O_4 (u_{n,n}^{(1)})^3 + I_4 [(u_{n,n+1}^{(1)} - u_{n,n}^{(1)})^3 + (u_{n,n-1}^{(1)} - u_{n,n}^{(1)})^3] + I'_4 [(u_{n,n+2}^{(1)} - u_{n,n}^{(1)})^3 + (u_{n,n-2}^{(1)} - u_{n,n}^{(1)})^3]. \quad (10)$$

由于(8)式是线性波动方程, 从而具有一般形式的格波解

$$u_{n,n}^{(1)} = A_0(\tau, \xi_n) + A(\tau, \xi_n) e^{i\phi_n} + A^*(\tau, \xi_n) e^{-i\phi_n}, \quad (11)$$

于是,我们可得出考虑次近邻相互作用的色散关系

$$\omega^2 = 4I_2 \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) + 4I_2' \sin^2(ka). \quad (12)$$

在图 1 中,我们得出具体的色散关系曲线.

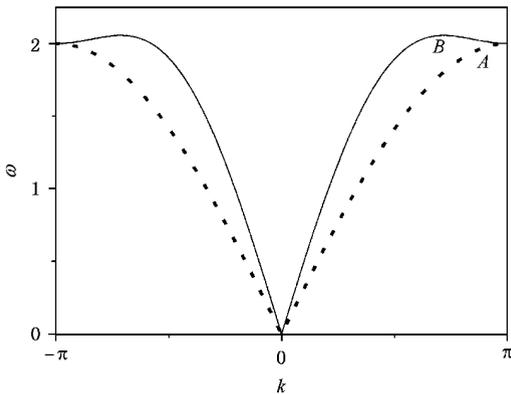


图 1 单原子链的色散关系(实线是考虑次近邻相互作用下单原子链的色散关系,虚线表示只计及最近邻相互作用下单原子链的色散关系.图中各参数的相对量为  $I_2 = 1.0, I_2' = 0.4, a = 1.0$ )

图中实线是考虑次近邻相互作用下链的色散关系,虚线表示只计及最近邻相互作用链的色散关系.通过比较这两条曲线有:考虑次近邻相互作用后,原子链色散关系的极大值的位置在图中的 B 处,而原来的极大值(Brillouin 区边界)A 点现为次极大值.通过消除(9)式中  $\epsilon$  的二阶近似方程中的久期项<sup>[26]</sup>得到

$$\lambda = \frac{I_2 a}{\omega} \sin(ka) + \frac{2I_2' a}{\omega} \sin(2ka) = V_g, \quad (13)$$

式中  $V_g = \frac{d\omega}{dk}$  为链中声子传播的群速.

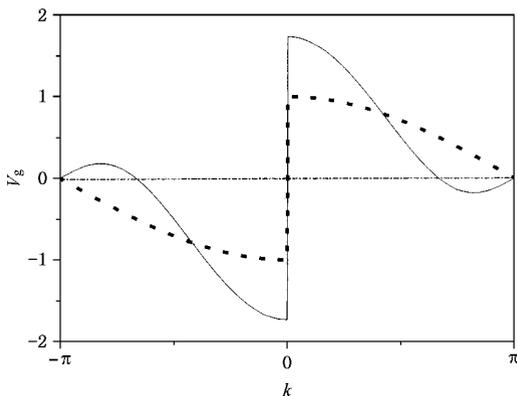


图 2 单原子链中的孤子在第一 Brillouin 区的群速(实线是考虑次近邻相互作用下链中孤子的群速,虚线表示只计及最近邻相互作用链中孤子的群速.图中各参数的相对量同图 1)

图 2 示出了链中孤子的群速在第一 Brillouin 区的变化情况.实线是考虑次近邻相互作用下链中孤子的群速,虚线表示只计及最近邻相互作用链中孤子的群速.两者相比,前者在第一 Brillouin 区中央增大再向两边衰减;而且衰减得比后者更快.从而,在第一 Brillouin 区中出现了一个新的群速为零的位置,其相应频率位于 Brillouin 区声频之间.通过消除(10)式中  $\epsilon$  的三阶近似方程中的久期项<sup>[26]</sup>可以得到

$$i \frac{\partial A}{\partial \tau} + P \frac{\partial^2 A}{\partial \xi_n^2} + Q|A|^2 A = 0, \quad (14)$$

其中

$$P = \frac{1}{2} \frac{d^2 \omega}{dk^2};$$

$$Q = \frac{3}{2\omega} \left\{ O_4 - \frac{I_4}{I_2} \omega_1^4 - 16 \frac{I_4'}{I_2} \omega_1^4 \left( 1 - \frac{\omega_1^2}{4I_2} \right)^2 \right\},$$

式中  $\omega_1$  为图 1 中仅仅计及最近邻相互作用的链中的色散关系.

然后通过变换  $A_0 = u_0/\epsilon, A = u/\epsilon, \xi_n = \epsilon(na - V_g t) = \epsilon X_n, \tau = \epsilon^2 t$ , 可将(14)式化为非线性薛定谔方程

$$i \frac{\partial u}{\partial t} + P \frac{\partial^2 u}{\partial X_n^2} + Q|u|^2 u = 0. \quad (15)$$

利用反散射变换<sup>[26]</sup>,可得出上式的解<sup>[26]</sup>为

$$u = \left[ \frac{2P}{Q} \right]^{\frac{1}{2}} k_0 \operatorname{sech} k_0 [(n - n_0)a - V_g t] e^{i(k_0^2 P n - \phi_0)}, \quad (16)$$

式中  $k_0, \phi_0$  是积分常数,  $n_0$  是任意积分整数.因此,整个晶格的位移有如下解的表达式:

$$u_n(t) = 2 \left[ \frac{2P}{Q} \right]^{\frac{1}{2}} k_0 \operatorname{sech} k_0 [(n - n_0)a - V_g t] \times \cos [kna - (\omega - k_0^2 P)t - \phi_0]. \quad (17)$$

(17) 式为典型的包络孤子.在图 1 中的 Brillouin 区边缘 A 点,  $k = \pm k_B = \pm \pi/a, V_g = \frac{d\omega}{dk} = 0$ , 从而(17)式变为

$$u_n(t) = 2 \left[ \frac{2P}{Q} \right]^{\frac{1}{2}} k_0 \operatorname{sech} k_0 [(n - n_0)a] \times \cos [kna - (\omega - k_0^2 P)t - \phi_0] \quad (18)$$

即在 A 点为非传播的包络孤子.同样,在色散关系图 1 中的是极大值 B 点,  $V_g = \frac{d\omega}{dk} = 0$ , 且  $\omega = \omega_{\max} > \omega_{\pm k_B}$  说明在 B 点一样也存在非传播的包络孤子.因此,在考虑次近邻相互作用下,非传播的包络孤子的相应频率既有利于 Brillouin 区声频之上又有位于

Brillouin 区声频之间,并不像杂质局域模钉扎于某处,而是在 Brillouin 区的任何位置均有可能存在.

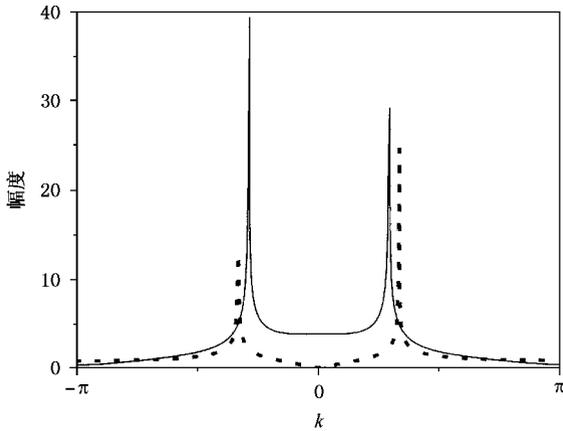


图3 单原子链中的孤子在第一 Brillouin 区的幅度(虚、实线分别表示考虑次近邻相互作用前、后链中孤子的幅度.图中各参数的相对量为  $I_2 = 1.0, I'_2 = 0.4, \rho = 1.0, O_4 = 0.8, I_4 = 0.6, I'_4 = 0.2$ )

当然,如果不考虑次近邻的相互作用,在  $B$  点不可能存在非线性元激发.然而,当考虑次近邻相互作用时,单原子链中的非线性元激发的幅度也发生了相应的变化(如图3).虚、实线分别表示考虑次近邻相互作用前、后链中孤子的幅度.显然,计及次近邻相互作用链后非线性元激发的幅度增大,且最大幅度的非线性元激发的位置趋向于 Brillouin 区的中央.这较为合理地解释了文献[9—11]的实验所观察到的非线性元激发最明显的位置是在 Brillouin 区的中央.

另外,如果完整地考虑系统运动方程(即如(2)式,  $k_3, k'_3 \neq 0$ )时,其多重尺度展开一样,只是计算上更复杂些.原子的位移只不过是在现有的基础上叠加一个以局域模为中心的反对称分布的静态“直流”分量.

- [ 1 ] Barker A S and Sievers A J 1975 *Rev. Mod. Phys.* **47** Suppl. 2
- [ 2 ] Sievers A J and Takeno S 1988 *Solid State Commun* **67** 1023
- [ 3 ] Flash S and Willis C R 1998 *Phys. Rep.* **295** 181
- [ 4 ] Sievers A J and Takeno S 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 970
- [ 5 ] Mei F X and Shang M 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 1901( in Chinese )  
[ 梅凤翔、尚玫 2000 物理学报 **49** 1901 ]
- [ 6 ] Zhong R C, Chen X W, Mei F X 2000 *Chin. Phys.* **9** 801
- [ 7 ] Chen X W 2002 *Chin. Phys.* **11** 441
- [ 8 ] Guo Y X 2001 *Chin. Phys.* **10** 181
- [ 9 ] Denardo B, Galvin B, Greenfield A, Larraza A, Putterman S and Wright W 1992 *Phys. Rev. Lett.* **68** 1730
- [ 10 ] Chen W Z 1992 *Acta Phys. Sin.* **42** 1567( in Chinese ) [ 陈伟中 1992 物理学报 **42** 1567 ]
- [ 11 ] Chen W Z 1994 *Phys. Rev. B* **49** 15063
- [ 12 ] Huang G X, Shi Z P and Xu Z X 1993 *Phys. Rev. B* **47** 14561
- [ 13 ] Shi Z D and Huang G X 1991 *Phys. Rev. B* **44** 12601
- [ 14 ] Bonart D, Rossler T and Page J B 1998 *Physica D* **113** 123
- [ 15 ] Wang D L, Yan X H and Tang T 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 1736( in Chinese ) [ 王登龙、颜晓红、唐 翌 2000 物理学报 **49** 1736 ]
- [ 16 ] Feng P C, Wang D L and Tang T 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1213( in Chinese ) [ 冯培成、王登龙、唐 翌 2001 物理学报 **50** 1213 ]
- [ 17 ] Wang D L, Yan X H, Tang T, Ding J W and Cao J X 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1201( in Chinese ) [ 王登龙、颜晓红、唐 翌、丁建文、曹觉先 2001 物理学报 **50** 1201 ]
- [ 18 ] Davydov A S 1971 *Theory of Molecular Excitons*( Plenum, New York )
- [ 19 ] Kittel C 1966 *Introduction to Solid States Physics*( 3rd ed. John Wiley and Sons, New York ) Chap. 3 and 5
- [ 20 ] Muto V, Lomdahl P S and Christiansen P L 1990 *Phys. Rev. A* **42** 7452
- [ 21 ] Scott A C 1992 *Phys. Rep.* **217** 1
- [ 22 ] Remoissent M 1995 *Waves Called Solitons: Concepts and experiments* 2nd ed.( New York: Springer-Verlag Berlin Heidelberg )
- [ 23 ] Remoissent M 1986 *Phys. Rev. B* **33** 2386
- [ 24 ] Chen Y S, Tang Y *et al* 1992 *Contemporary Analytical Methods in Nonlinear Dynamics*( Beijing: Science Press ) p30( in Chinese ) [ 陈予恕、唐 云等编 1992 非线性动力学中的现代分析方法(北京:科学出版社)第30页 ]
- [ 25 ] Tsuyui A 1972 *Prog. Theor. Phys.* **48** 1196
- [ 26 ] Ablowitz M and Segur H 1985 *Soliton and Inverse Scattering Transform*( SIAM Philadelphia )

# Nonlinear elementary excitations in a monoatomic chain with second nearest neighbour anharmonic interaction \*

Feng Pei-Cheng<sup>1,2)</sup> Wang Deng-Long<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup>*( Department of Physics ,Xiangtan University ,Xiangtan 411105 ,China )*

<sup>2)</sup>*( Department of Physics ,Lingling College ,Lingling 425006 ,China )*

( Received 11 June 2002 ; revised manuscript received 19 October 2002 )

## Abstract

By using a multiple scales method ,we study the lattice vibration of a monoatomic chain taking into account the nearest neighbour and the second next nearest neighbour harmonic and anharmonic interactions. It is shown that nonpropagating solitons exist in any position of the Brillouin zone. Compared with that of a soliton in monoatomic chains with only nearest-neighbour interactions ,the group velocity at the centre of the Brillouin zone is enhanced but attenuates more rapidly. In addition a new position of zero velocity for the soliton is found in the first Brillouin. Our results show that the amplitude of this kind of soliton increases and the location of the soliton with the largest amplitude is close to the centre of the Brillouin zone.

**Keywords :** monoatomic chain , anharmonic second neighbor interactions , nonpropagating solitons

**PACC :** 0320 , 6320 , 4325

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China( Grant Nos. 59871044 and 10005007 )and by the Natural Science Foundation of Hunan Province ,China( Grant No. 00JJY2007 ).