

一维 Klein-Gordon 双原子链中的能隙呼吸子^{*}

李宓善¹⁾ 田 强^{2)†}

1) 北京交通大学理学院, 北京 100044)

2) 北京师范大学物理系, 北京 100875)

(2005 年 7 月 20 日收到, 2006 年 5 月 14 日收到修改稿)

采用旋转波近似, 讨论一维 Klein-Gordon 双原子链中的能隙呼吸子. 在驻波边界条件下数值求解一维 Klein-Gordon 双原子链晶格振动的运动方程组, 得到不同耦合系数、不同非线性系数以及不同原子质量比情况下的以重原子为中心的对称模能隙呼吸子. 随着耦合系数的增大, 原子之间的耦合作用增强, 呼吸子的空间扩展范围增大; 非线性作用越大, 能隙呼吸子局域化越强. 随着原子质量差的增大, 呼吸子在空间越来越局域.

关键词: 能隙呼吸子, 一维 Klein-Gordon 双原子链, 耦合系数, 非线性

PACC: 6320R, 6320P, 0547

1. 引言

晶体中存在由杂质引起的局域振动模, 另一类局域振动模是原子之间的非线性相互作用引起的, 称为本征局域振动模(记作 ILM)^[1-4]. 呼吸子是完整晶体中内在的非线性相互作用产生的一种本征局域振动模, 它是空间局域的时间周期振动模. 呼吸子存在于很多非线性的分立系统和连续介质中. 一维非线性双原子链中能隙呼吸子(记作 GB)的研究^[2-5]近些年来倍受关注, 同时促进了生物神经信号传输、聚合物中能量输运等方面的研究. 神经、聚合物、约瑟夫森结阵列等一维分立系统^[6]的基本物理模型是一维双原子链. 实际原子链系统中往往存在不可忽略的非线性相互作用, 可以在能隙中产生呼吸子.

对于原子之间具有 4 次非简谐相互作用势能的 β -FPU 单原子链, 在硬非线性(4 次非简谐势能项系数大于零)情况下存在频率位于线性色散关系之上的对称^[2,7]和反对称^[2,8]的呼吸子. 在 β -FPU 双原子链中, 对于硬非线性情况, 得到重原子为中心的对称模(记作 HS)呼吸子和轻原子为中心的反对称模(LA)呼吸子; 而对于软非线性(4 次非简谐项势能系数小于零)情况, 得到轻原子为中心的对称模(LS)呼

吸子和重原子为中心的反对称模(HA)呼吸子^[2]. 对于具有在位(on site)4 次非简谐势能的一维 Klein-Gordon 双原子链, 由原子链不连续极限出发, 采用牛顿方法^[9]得到了一维 Klein-Gordon 双原子链在硬非线性情况下的能隙呼吸子^[3].

本文采用旋转波近似(简写 RWA)^[10], 讨论一维 Klein-Gordon 双原子链晶格振动的运动方程, 得到原子振幅的一组非线性代数方程组, 在驻波边界条件下数值求解, 分析一维 Klein-Gordon 双原子链中的能隙呼吸子.

2. 模型

相邻原子之间平衡间距为 a 的一维双原子链, 原子质量分别为 m 与 M ($m < M$), 以 ξ_{2s} 表示第 s 个原胞内质量为 M 的原子离开平衡位置 $x_{2s}^0 = 2sa$ 的位移, 以 ξ_{2s+1} 表示第 s 个原胞内质量为 m 的原子离开平衡位置 $x_{2s+1}^0 = (2s+1)a$ 的位移. 一维 Klein-Gordon 双原子链晶格振动的哈密顿量为

$$H = \sum_n \left[\frac{1}{2} \mu \left[1 + (-1)^n \delta^2 \right] \xi_n^2 + \frac{1}{2} \alpha (\xi_n - \xi_{n-1})^2 + \frac{1}{2} \gamma_2 \xi_n^2 + \frac{1}{4} \gamma_4 \xi_n^4 \right], \quad (1)$$

其中 n 的奇与偶分别代表轻与重原子, C 是最近邻

^{*} 国家教育部高等学校骨干教师计划和北京师范大学创新研究群体计划资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: qtian@bnu.edu.cn

原子之间相互作用的简谐力常数称为耦合系数 γ_2 是在位简谐势能的力常数 γ_4 是在位 4 次方势能的系数即 Klein-Gordon 双原子链中的非线性系数 $\mu = (M + m)/2$, $\delta^2 = (M - m)(M + m)$. γ_2 和 γ_4 为正 本文只讨论 $\gamma_4 > 0$ 的硬非线性情况. 相应的晶格振动运动方程为

$$\mu[1 + (-1)^n \delta^2] \ddot{\xi}_n + \alpha(2\xi_n - \xi_{n+1} - \xi_{n-1}) + \gamma_2 \dot{\xi}_n + \gamma_4 \dot{\xi}_n^3 = 0, \quad (2)$$

简谐近似下, 具有在位势能的一维双原子链晶格振动哈密顿量为

$$H = \sum_s \left[\frac{1}{2} M \dot{\xi}_{2s}^2 + \frac{1}{2} m \dot{\xi}_{2s+1}^2 + \frac{1}{2} \alpha (\xi_{2s} - \xi_{2s+1})^2 + \frac{1}{2} \alpha (\xi_{2s+1} - \xi_{2s+2})^2 + \frac{1}{2} \gamma_2 \xi_{2s}^2 + \frac{1}{2} \gamma_2 \xi_{2s+1}^2 \right], \quad (3)$$

相应的晶格振动运动方程为

$$M \ddot{\xi}_{2s} = -\alpha(2\xi_{2s} - \xi_{2s+1} - \xi_{2s-1}) - \gamma_2 \xi_{2s}, \quad (4a)$$

$$m \ddot{\xi}_{2s+1} = -\alpha(2\xi_{2s+1} - \xi_{2s+2} - \xi_{2s}) - \gamma_2 \xi_{2s+1}, \quad (4b)$$

得到晶格振动色散关系

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{1}{2} \left\{ \frac{2C + \gamma_2}{m} + \frac{2C + \gamma_2}{M} \pm \left[\left(\frac{2C + \gamma_2}{m} - \frac{2C + \gamma_2}{M} \right)^2 + \frac{16C^2 \cos^2(qa)}{Mm} \right]^{1/2} \right\}. \quad (5)$$

记

$$\omega_1^2 = 0, \quad \omega_2^2 = \frac{2C}{M}, \quad \omega_3^2 = \frac{2C}{m},$$

$$\omega_4^2 = 2C \left(\frac{1}{M} + \frac{1}{m} \right) = \frac{2C}{\rho},$$

ω_1 , ω_2 , ω_3 和 ω_4 分别是无在位势时的晶格振动色散关系的声频支底、声频支顶、光频支底和光频支顶的频率. 其中 ρ 是两种原子的约化质量, $\rho = \frac{Mm}{M+m}$. 这时, 色散关系(5)写为

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{1}{2} \left\{ \omega_4^2 + \Omega_m^2 + \Omega_M^2 \pm [(\omega_3^2 - \omega_2^2 + \Omega_m^2 - \Omega_M^2) + 4\omega_3^2 \omega_2^2 \cos^2(qa)]^{1/2} \right\}, \quad (6)$$

其中 $\Omega_m = \sqrt{\frac{\gamma_2}{m}}$ 和 $\Omega_M = \sqrt{\frac{\gamma_2}{M}}$ 分别是具有简谐在位势能的孤立轻、重原子的振动频率.

在布里渊区边界 $q_B = \pi/2a$ 处

$$\omega_{\pm}(q_B) = \begin{cases} \omega_3^2 + \Omega_m^2 = \frac{2C + \gamma_2}{m}, \\ \omega_2^2 + \Omega_M^2 = \frac{2C + \gamma_2}{M}, \end{cases} \quad (7)$$

在位势的存在, 使声频支顶 $\omega_-(q_B)$ 和光频支底 $\omega_+(q_B)$ 有不同程度的升高, 能隙宽度为 $\omega_{\text{gap}} = \omega_+(q_B) - \omega_-(q_B) = \left(\sqrt{\frac{M}{m}} - 1 \right) \omega_-(q_B)$, 简谐在位势能使晶格振动能隙变宽. 在布里渊区中心 $q = 0$, 有

$$\omega_{\pm}(0) = \frac{1}{2} \left\{ \omega_4^2 + \Omega_m^2 + \Omega_M^2 \pm [(\omega_3^2 - \omega_2^2 + \Omega_m^2 - \Omega_M^2) + 4\omega_3^2 \omega_2^2]^{1/2} \right\}, \quad (8)$$

显然 $\omega_-(0) \neq 0$, 在此出现了能隙, 这是有在位势时色散关系的一个显著特征, 且该能隙随在位势的增强而增大. 图 1 是取 $M = 2m$, 对于 $\frac{\gamma_2}{C}$ 分别为 0.4 (虚线), 0.2 (实线) 和 0.1 (点划线) 时的色散关系. $\frac{\gamma_2}{C} = 0$ 时的色散关系就是大家熟知的无在位势的色散关系:

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{1}{2} \left\{ \omega_3^2 + \omega_2^2 \pm [(\omega_3^2 - \omega_2^2) + 4\omega_3^2 \omega_2^2 \cos^2(qa)]^{1/2} \right\}. \quad (9)$$

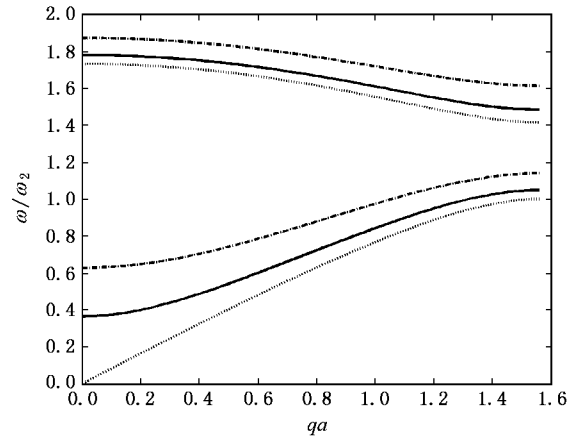


图 1 相互作用势不变情况下不同强度在位势时的色散关系 图中取 $M = 2m$, $\frac{\gamma_2}{C}$ 分别为 0.4 (虚线) 0.2 (实线) 和 0.1 (点划线)

3. 能隙呼吸子

对于由 N 个原子组成的一维 Klein-Gordon 双原

子链 晶格振动运动方程组为

$$M\ddot{\xi}_{2s} = -\alpha(2\xi_{2s} - \xi_{2s+1} - \xi_{2s-1}) - \gamma_2 \xi_{2s} - \gamma_4 \xi_{2s}^3, \tag{10a}$$

$$m\ddot{\xi}_{2s+1} = -\alpha(2\xi_{2s+1} - \xi_{2s+2} - \xi_{2s}) - \gamma_2 \xi_{2s+1} - \gamma_4 \xi_{2s+1}^3, \tag{10b}$$

对于时间周期的能隙呼吸子,可设 $\xi_n(t) = v_n \cos(\omega t)$, 其中 $\omega_-(q_B) < \omega < \omega_+(q_B)$, 即所讨论的局域振动模的频率位于线性能隙中. 采用旋转波近似^[2,10], 即忽略 $2\omega, 3\omega$ 等高次谐波项, 得到

$$(\omega^2 - \omega_-^2(q_B))v_{2s} + \frac{C}{M}(v_{2s+1} + v_{2s-1}) - \frac{\gamma_4}{2M}v_{2s}^3 = 0, \tag{11a}$$

$$(\omega^2 - \omega_+^2(q_B))v_{2s+1} + \frac{C}{m}(v_{2s+2} + v_{2s}) - \frac{\gamma_4}{2m}v_{2s+1}^3 = 0, \tag{11b}$$

令无量纲的能隙呼吸子频率为 $\omega_b = \frac{\omega - \omega_-(q_B)}{\omega_{\text{gap}}}$, 对于能隙中的频率 ω , 有 $0 < \omega_b < 1$; 记无量纲的位移为 $u_n = \frac{v_n}{a}$, 方程经过适当改写, 然后除以 $a\omega_{\text{gap}}^2$, 得到

$$\omega_b \left(\omega_b + \frac{2}{\sqrt{\frac{M}{m}} - 1} \right) u_{2s} + \frac{C/M}{\omega_{\text{gap}}^2} (u_{2s+1} + u_{2s-1}) - \frac{\gamma_4 a^2}{2M\omega_{\text{gap}}^2} u_{2s}^3 = 0, \tag{12a}$$

$$(\omega_b - 1) \left(\omega_b + \frac{\sqrt{\frac{M}{m}} + 1}{\sqrt{\frac{M}{m}} - 1} \right) u_{2s+1} + \frac{C/m}{\omega_{\text{gap}}^2} (u_{2s+2} + u_{2s}) - \frac{\gamma_4 a^2}{2m\omega_{\text{gap}}^2} u_{2s+1}^3 = 0, \tag{12b}$$

令 $b = \frac{M}{m}, c = \frac{C}{\gamma_2}, g = \frac{\gamma_4 a^2}{\gamma_2}$ 分别为原子质量比、无量纲的耦合系数和无量纲的非线性系数, 晶格振动运动方程组简化为

$$\omega_b \left(\omega_b + \frac{2}{\sqrt{b} - 1} \right) u_{2s} + \frac{1}{(\sqrt{b} - 1)^2 \left(2 + \frac{1}{c} \right)} (u_{2s+1} + u_{2s-1}) - \frac{1}{(\sqrt{b} - 1)^2 \left(2 + \frac{1}{c} \right)} \frac{\gamma}{2c} u_{2s}^3 = 0, \tag{13a}$$

$$(\omega_b - 1) \left(\omega_b + \frac{\sqrt{b} + 1}{\sqrt{b} - 1} \right) u_{2s+1} + \frac{b}{(\sqrt{b} - 1)^2 \left(2 + \frac{1}{c} \right)} (u_{2s+2} + u_{2s}) - \frac{b}{(\sqrt{b} - 1)^2 \left(2 + \frac{1}{c} \right)} \frac{\gamma}{2c} u_{2s+1}^3 = 0, \tag{13b}$$

这是 N 个非线性代数方程构成的方程组. 取原子链的原子数 $N = 101, -50 \leq n \leq 50$. 对于重原子为中心($n = 0$)的 HS 模, 给中心重原子一个初位移 u_0 , 可以数值计算得到其他原子的位移 u_n . 对于空间局域的呼吸子解, 在驻波边界条件下 ($u_{50} = u_{-50} = 0$) 进行数值求解. 对于 $\omega_b = 0.25, b = \frac{M}{m} = 1.25, c = \frac{C}{\gamma_2} = 1$ 以及 $g = \frac{\gamma_4 a^2}{\gamma_2} = 1$, 数值计算得到能隙呼吸子各原子的振幅, 如图 2 所示.

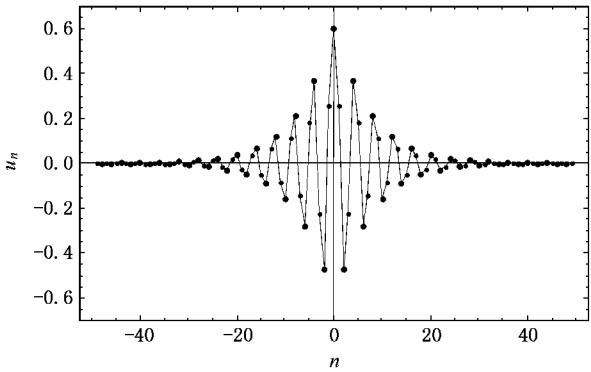


图 2 能隙呼吸子(HS 模) 各原子的振幅

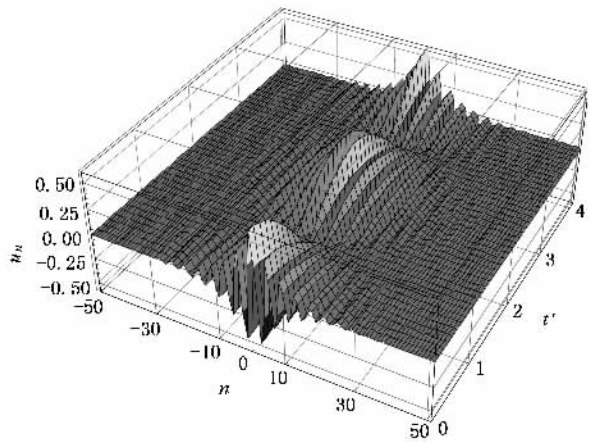


图 3 能隙呼吸子的时空演化

能隙呼吸子的时空演化如图 3 所示, 图中的时

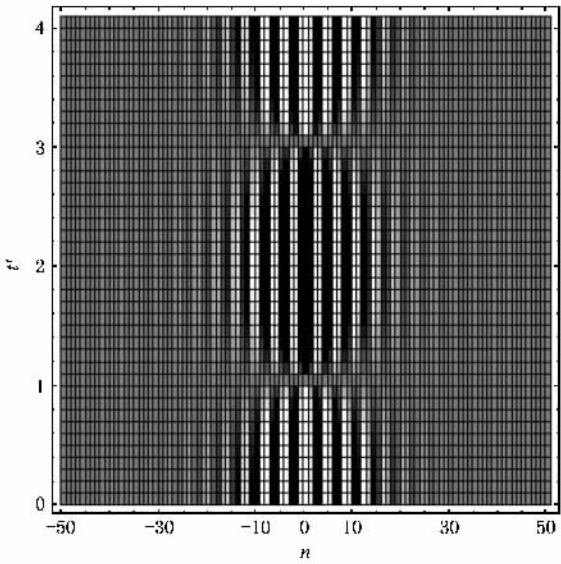


图 4 能隙呼吸子的时空演化灰度图

间是无量纲时间 $t' = \frac{\omega_{\text{gap}}}{2\pi} t$. 图 4 是与图 3 相对应的振幅灰度图,灰度越深振幅越大.

4. 不同参数情况下的能隙呼吸子

4.1. 随耦合系数的变化

对于不同的耦合系数,数值计算得到的能隙呼吸子如图 5 所示. 图中的耦合系数 $c = \frac{C}{\gamma_2}$ 分别为 0.001, 0.01, 0.1, 1 和 5,其他参数与图 2 相同且保持不变,分别为 $\omega_b = 0.25$, $b = \frac{M}{m} = 1.25$ 以及 $g = \frac{\gamma_4 a^2}{\gamma_2} = 1$.

$c = 0.001$ 时,由于原子之间的耦合作用很小,呼吸子的空间扩展范围很小,局域在约一个原胞的范围内,随着耦合系数的增大,原子之间的耦合作用

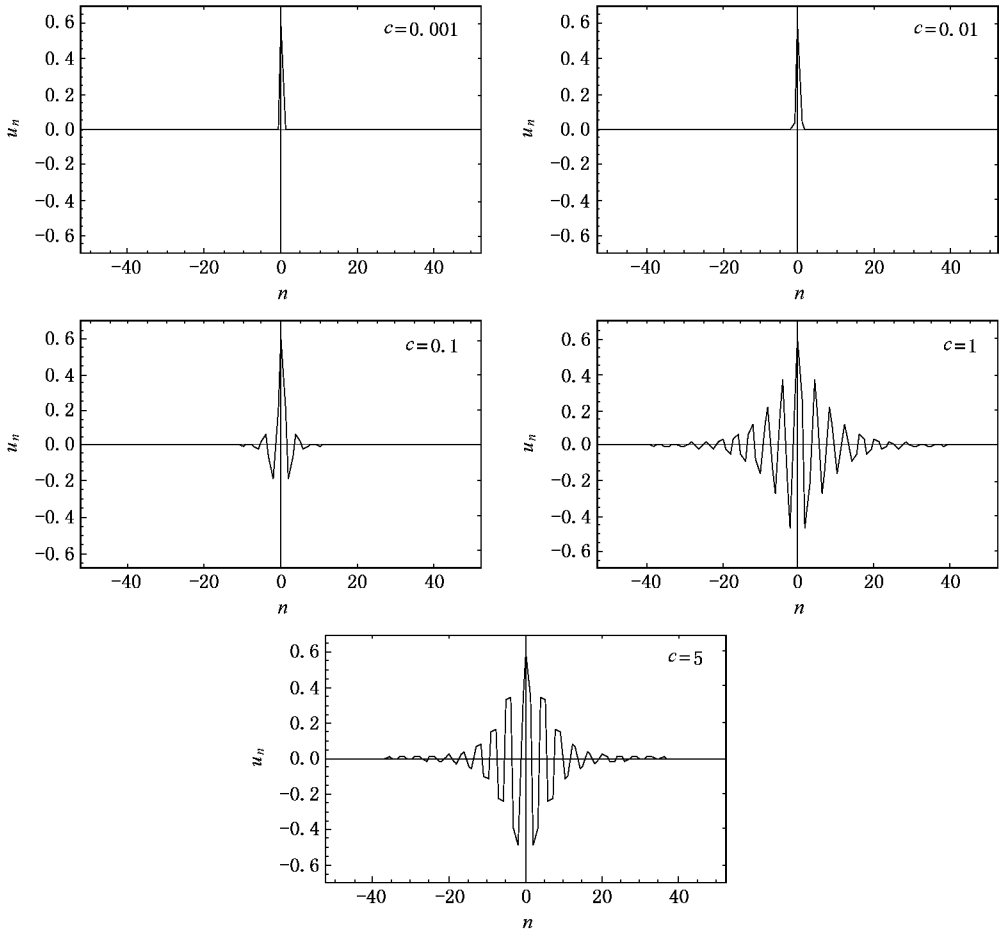


图 5 能隙呼吸子随耦合系数的变化

增强,呼吸子的空间扩展范围增大。

4.2. 随非线性系数的变化

分别对于不同的非线性系数 $g = \frac{\gamma_4 a^2}{\gamma_2}$,数值计

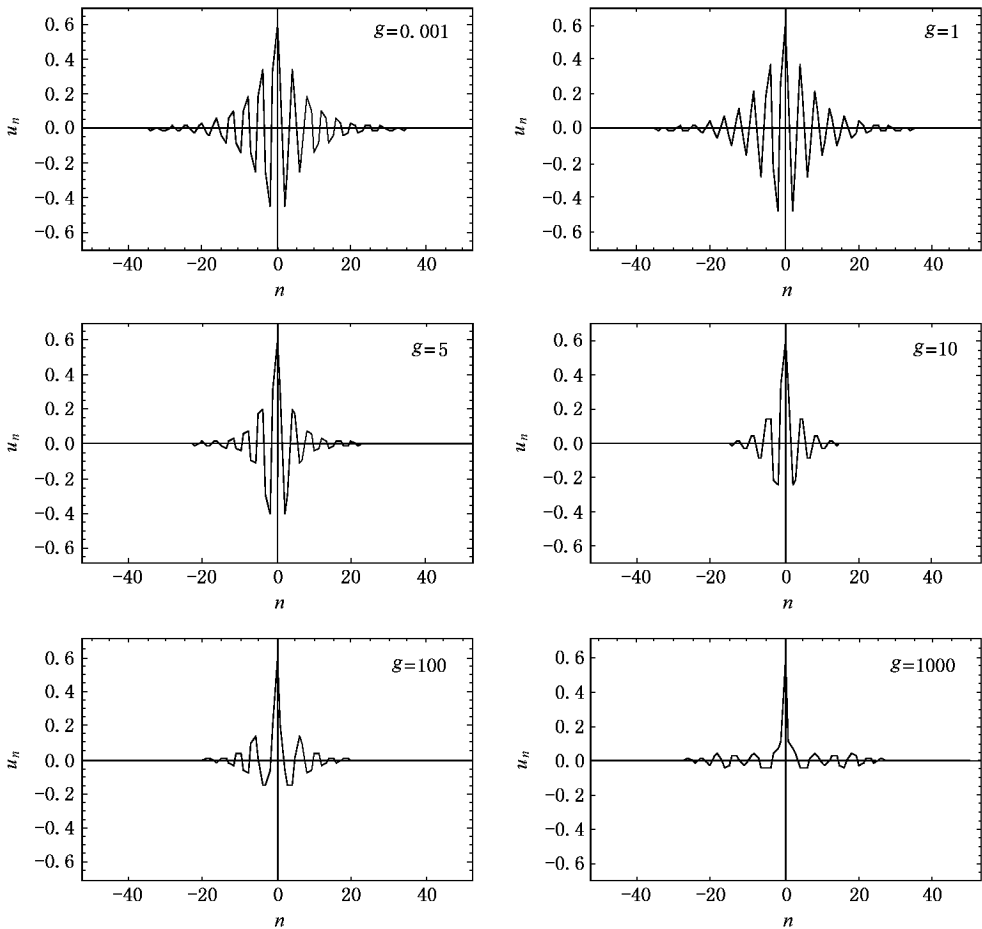


图 6 不同非线性系数情况下的能隙呼吸子

化不大;大于 1 时,随非线性系数的增大,呼吸子越来越局域。非线性作用是空间局域振动模产生的根本原因;非线性作用越大,局域化越强。

4.3. 随原子质量比的变化

不同的双原子链通常具有不同的原子质量比 b ,下面分别对于不同的原子质量比 1.25、2 和 16,数值计算能隙呼吸子,其原子振幅如图 7 所示;图中的其他参数与图 2 相同且保持不变。

原子质量比 2 对应于 O—C 双原子链,原子质量比 16 对应于 O—H 双原子链,在耦合系数、非线性系数等参数不变的情况下,随着原子质量比的增大即原子质量差的增大,呼吸子在空间的扩展范围

算得到的能隙呼吸子如图 6 所示;图中的非线性系数 g 分别为 0.001、1、5、10、100 和 1000,其他参数与图 2 相同且保持不变。

非线性系数与力常数之比小于 1 时,呼吸子变

越来越小即越来越局域。

5. 结 论

一维 Klein-Gordon 双原子链中的原子具有在位的非简谐势能,晶格振动的运动方程为非线性方程。一般情况下,原子链中的非线性作用可以在原子链中产生本征局域振动模。本文讨论了一维 Klein-Gordon 双原子链中以重原子为中心的对称模能隙呼吸子。采用旋转波近似,在驻波边界条件下数值求解一维 Klein-Gordon 双原子链晶格振动的运动方程组,得到不同耦合系数、不同非线性系数以及不同原子质量比情况下的能隙呼吸子。

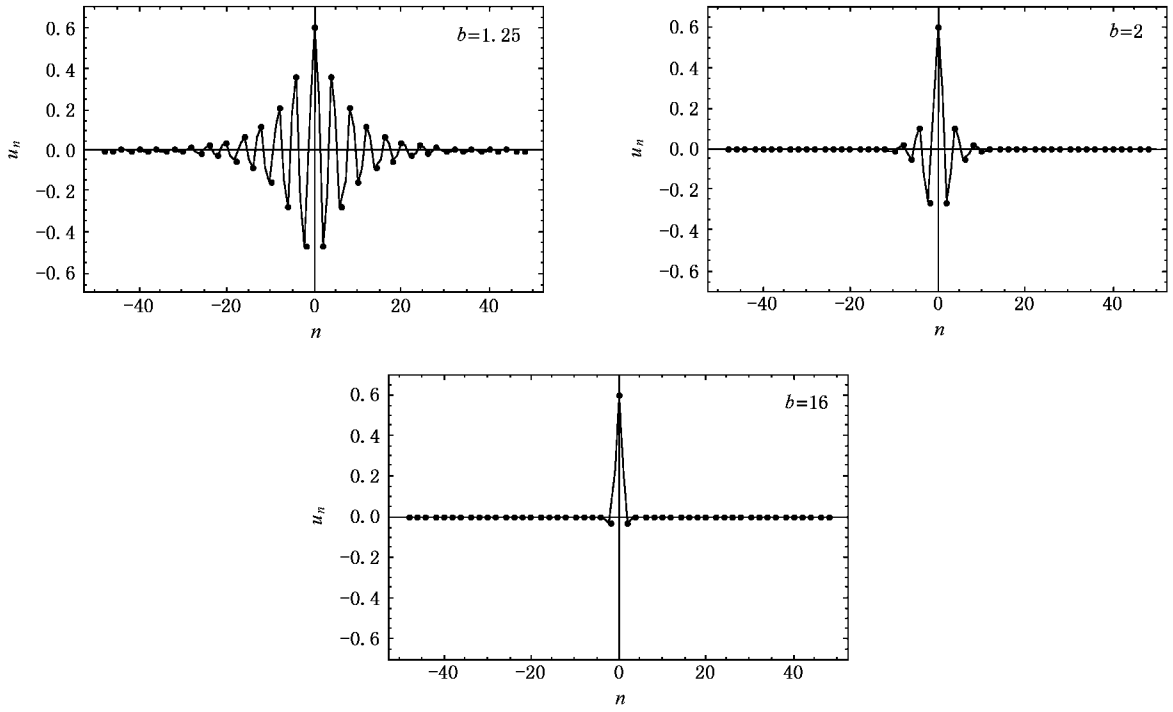


图 7 不同原子质量比的能隙呼吸子

在原子之间耦合系数比较小时,弱的耦合作用使能隙呼吸子的空间扩展范围比较小,随着耦合系数的增大,原子之间的耦合作用增强,呼吸子的空间扩展范围增大.非线性作用是本征空间局域振动模产生的根本原因,非线性作用越大,能隙呼吸子局域

化越强,对于不同的非线性系数,数值计算得到能隙呼吸子,随非线性系数的增大,呼吸子越来越局域.还数值计算了不同原子质量比情况下的能隙呼吸子,随着原子质量比的增大即原子质量差的增大,能隙呼吸子在空间越来越局域.

[1] Campbell D K , Rosenau P , Zaslavsky G M 2005 *Chaos* **15** 015101

[2] Maniadis P , Zolotaryuk A V , Tsironis G P 2003 *Phys. Rev. E* **67** 046612

[3] Gorbach A V , Johansson M 2003 *Phys. Rev. E* **67** 066608

[4] Huang G X 2001 *Chin. Phys.* **10** 523

[5] Tian Q , Wang J P 2002 *Inter. J. Theor. Phys.* **41** 1275

[6] Zolotaryuk A V , Maniadis P , Tsironis G P 2001 *Physica B* **296** 251

[7] Sievers A J , Takeno S 1996 *Phys. Rev. B* **53** 13977

[8] Page J B 1990 *Phys. Rev. B* **41** 7835

[9] Kopidakis G , Aubry S 1999 *Physica D* **130** 155

[10] Flash S , Willis C R 1998 *Phys. Reports* **295** 181



Gap breathers in the one-dimensional Klein-Gordon diatomic chain ^{*}

Li Mi-Shan¹⁾ Tian Qiang^{2)†}

¹⁾ *Institute of Science, Beijing Jiaotong University, Beijing 100044, China*

²⁾ *Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China*

(Received 20 July 2005 ; revised manuscript received 14 May 2006)

Abstract

The gap breathers (GBs) in a one-dimensional Klein-Gordon diatomic chain are studied under rotating-wave approximation (RWA). The analytical investigation of heavy-particle centered symmetric mode (HS mode) has been implemented under the boundary condition of standing waves. We examine the effects of the coupling constant, nonlinear constant and the mass ratio on the GBs. The GB profiles are sensitive to the coupling constant, nonlinear constant and the mass ratio. As the coupling constant increases, the GB profiles become broader. But, with the nonlinearity and the mass ratio increasing, the GB profiles appear more localized.

Keywords : gap breather, one-dimensional Klein-Gordon diatomic chain, coupling constant, nonlinearity

PACC : 6320R, 6320P, 0547

^{*} Project supported by the Foundation for Key Teachers by the Ministry of Education of China and by the Foundation of Research Groups from Beijing Normal University.

[†] Corresponding author. E-mail : qtian@bnu.edu.cn