一维 Klein-Gordon/Fermi-Pasta-Ulam 混合原子链中非线性参数作用的研究*

周　倩† 　吕彬彬　田　强
（北京师范大学物理系，北京　100875）

（2008 年 7 月 3 日收到；2008 年 8 月 4 日收到修改稿）

采用推广的旋转平面波近似对一维非线性 Klein-Gordon/Fermi-Pasta-Ulam 混合原子链的运动方程进行简化，数值求解得到该系统中存在的离散呼吸子解. 研究了系统中各非线性参数对该振动模的直流、一阶简谐项和二阶简谐项三个分量的对称性的影响以及对系统中局域模的影响.

关键词：Klein-Gordon/Fermi-Pasta-Ulam 混合原子链，推广的旋转平面波近似，离散呼吸子，对称性
PACC：6320R，6320P，0547

1. 引　　言

非线性晶格中本征局域振动模（ILM）的研究引起越来越广泛的兴趣[1,2]. ILM 的形成是系统的非线性和色散在一定条件下达到平衡的结果. ILM 的研究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[3—5].

近年来，很多科学家在非线性晶格振动领域做出了突出的贡献[6—8]. 研究的问题主要集中在寻找弱非线性系统中局域化解的类型及其产生和存在的条件. 由于非线性系统中运动方程的复杂性，使得解析解的求解变得非常困难. 一般来说，系统要经过合理的近似和处理，才能得到有意义的解析或数值结果. 早期的研究通常不考虑三次非线性势函数，从而使研究大大简化. 但是，实际的系统或晶格中，三次非线性势函数是普遍存在的.

本文研究一维 Klein-Gordon/Fermi-Pasta-Ulam（KG/FPU）混合原子链，该模型中同时包含在位和相互作用二次、三次和四次势函数，是一个一般的模型. Johansson 曾用离散非线性薛定谔近似的方法研究过该模型中的平面波调制不稳定性和产生热力学离散呼吸子（DB）的统计学条件[8]. 但是由于三次非线性势函数存在所导致的复杂性，Johansson 并没有给出整个系统的 DB 解. 另外，在以往的工作中，对非线性晶格中存在的局域解类型研究较多，对各个非线性参数在振动局域化过程中起的作用研究较少. 本文采用推广的旋转平面波近似（ERWA），研究一般的一维非线性 KG/FPU 混合原子链中非线性参数的作用.

2. 运动方程和 ERWA

具有三次非线性势函数的一维 KG/FPU 混合原子链的哈密顿量可以写为

$$H = \sum_{i=1}^{N}\left[\frac{1}{2}\dot{u}_i^2 + V(u_i) + W(u_{i+1} - u_i)\right], \quad (1)$$

其中

$$V(u) = \frac{\omega_0^2}{2}u^2 + \frac{\alpha}{3}u^3 + \frac{\beta}{4}u^4$$

是系统的在位势函数；

$$W(u) = \frac{\kappa_2}{2}u^2 + \frac{\kappa_3}{3}u^3 + \frac{\kappa_4}{4}u^4$$

是系统中最近邻原子之间的相互作用势函数；i 为原子序数. 原子质量 m 和晶格常数 α 均取为 1.

2.1. 运动方程

由哈密顿量可以得到系统中第 i 个原子的运动

* 国家自然科学基金面上项目（批准号：10574011）和北京师范大学创新研究群体计划项目资助的课题.

† E-mail：zhouqian@mail.bnu.edu.cn

方程为

$$\begin{aligned}\ddot{u}_i = &-\omega_0^2 u_i - \alpha u_i^2 - \beta u_i^3 \\ &+ K_2(u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i) \\ &+ K_3[(u_{i+1} - u_i)^2 - (u_i - u_{i-1})^2] \\ &+ K_4[(u_{i+1} - u_i)^3 - (u_{i-1} - u_i)^3], \end{aligned} \tag{2}$$

这是一组耦合非线性方程组.

在线性情况下,由于系统的离散性导致的本征振动模的色散关系为

$$\omega^2 = \frac{\omega_0^2}{m} + \frac{4\kappa^2}{m}\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right). \tag{3}$$

定义

$$\omega_1^2 = \omega^2(q=0) = \frac{\omega_0^2}{m},$$

$$\omega_2^2 = \omega^2\left(q = \frac{\pi}{a}\right) = \frac{\omega_0^2}{m} + \frac{4\kappa_2}{m}.$$

ω_1 和 ω_2 分别对应于色散关系中振动频率的最小值和最大值.

2.2. ERWA

ERWA[9] 是在原有的旋转平面波近似(RWA)[10] 的基础上,假设系统的解除了包含一阶简谐项之外还包含直流项和二阶简谐项,即

$$\begin{aligned} u_i(t) = &a_i^{(0)} + a_i^{(1)}\cos(\omega_b t) \\ &+ a_i^{(2)}\cos(2\omega_b t), \end{aligned} \tag{4}$$

其中 ω_b 是所求 DB 解的频率.

将试探解(4)代入运动方程(2),忽略高于二阶简谐项的振动项和时间导数项,整理得到关于系数 $a_i^{(0)}$, $a_i^{(1)}$ 和 $a_i^{(2)}$ 的方程组.求解这个系数方程组,可以得到系统中的非线性振动模式.

由于所研究的晶格振动是弱非线性下的小振幅振动,解应该是振幅缓慢变化的调制平面波.基于此,可以对各级系数的量级进行合理的假设,即

$$a_i^{(0)} \sim \varepsilon^2, a_i^{(1)} \sim \varepsilon, a_i^{(2)} \sim \varepsilon^2,$$
$$\varepsilon \text{ 是个小量}. \tag{5}$$

将(4)式代入(2)式利用 ERWA 和(5)式精确到三阶小量,可以得到系数方程组.

常数部分

$$\begin{aligned} 0 = &-\omega_0^2 a_i^{(0)} - \frac{1}{2}a|a_i^{(1)}|^2 \\ &+ K_2(a_{i+1}^{(0)} - a_{i-1}^{(0)} - 2a_i^{(0)}) \\ &+ \frac{1}{2}K_3[(a_{i+1}^{(1)} - a_i^{(1)})^2 \\ &- (a_i^{(1)} - a_{i-1}^{(1)})^2]. \end{aligned} \tag{6}$$

一阶简谐项部分

$$\begin{aligned} -\omega_b^2 a_i^{(1)} = &-\omega_0^2 a_i^{(1)} - \alpha a_i^{(1)}(2a_i^{(0)} + a_i^{(2)}) \\ &- \frac{3}{4}\beta|a_i^{(1)}|^2 a_i^{(1)} \\ &+ K_2(a_{i+1}^{(1)} + a_{i-1}^{(1)} - 2a_i^{(1)}) \\ &+ K_3[2(a_{i+1}^{(1)} - a_i^{(1)})(a_{i+1}^{(0)} - a_i^{(0)}) \\ &+ (a_{i+1}^{(1)} - a_i^{(1)})(a_{i+1}^{(2)} - a_i^{(2)}) \\ &- 2(a_i^{(1)} - a_{i-1}^{(1)})(a_i^{(0)} - a_{i-1}^{(0)}) \\ &+ (a_i^{(1)} - a_{i-1}^{(1)})(a_i^{(2)} - a_{i-1}^{(2)})] \\ &+ \frac{3}{4}K_4[(a_{i+1}^{(1)} - a_i^{(1)})^2 \\ &+ (a_{i-1}^{(1)} - a_i^{(1)})^2]. \end{aligned} \tag{7}$$

二阶简谐项部分

$$\begin{aligned} -4\omega_b^2 a_i^{(2)} = &-\omega_0^2 - \frac{1}{2}\alpha|a_i^{(1)}|^2 \\ &+ K_2(a_{i+1}^{(2)} + a_{i-1}^{(2)} - 2a_i^{(2)}) \\ &+ \frac{1}{2}K_3[(a_{i+1}^{(1)} - a_i^{(1)})^2 \\ &- (a_i^{(1)} - a_{i-1}^{(1)})^2]. \end{aligned} \tag{8}$$

3. 计算结果和分析

不失一般性,在进行数值计算时,选择 $\omega_0 = 0.5$, $K_2 = 1$, $\omega_b = 2.1$.其中 ω_b 的选择是根据非共振条件,令其值略大于线性色散关系中振动频率的最大值 ω_2.

3.1. 三次非线性相互作用势函数的作用

取 $K_3 = 0.5$, $K_4 = \alpha = \beta = 0$,数值计算方程组(6)—(8),得到系统中的 DB 解,见图 1(a).相应的各级系数值见图 1(b).

从图 1 中可以看出在三次非线性相互作用势函数的作用下,DB 解是关于中心原子奇对称的解.将这个解分解成为(4)式所示的形式并观察其各项的振幅(图 1(b)),可以看出其中更细致的对称性.在所取参数情况下,直流项和二阶简谐项具有关于中心原子的奇对称性,而一阶简谐项则具有偶对称性.

3.2. 四次非线性相互作用势函数的作用

取 $K_4 = 0.5$, $K_3 = \alpha = \beta = 0$,数值求解方程组(6)—(8)得到系统中的局域解见图 2(a),与之相应的各级系数值见图 2(b).

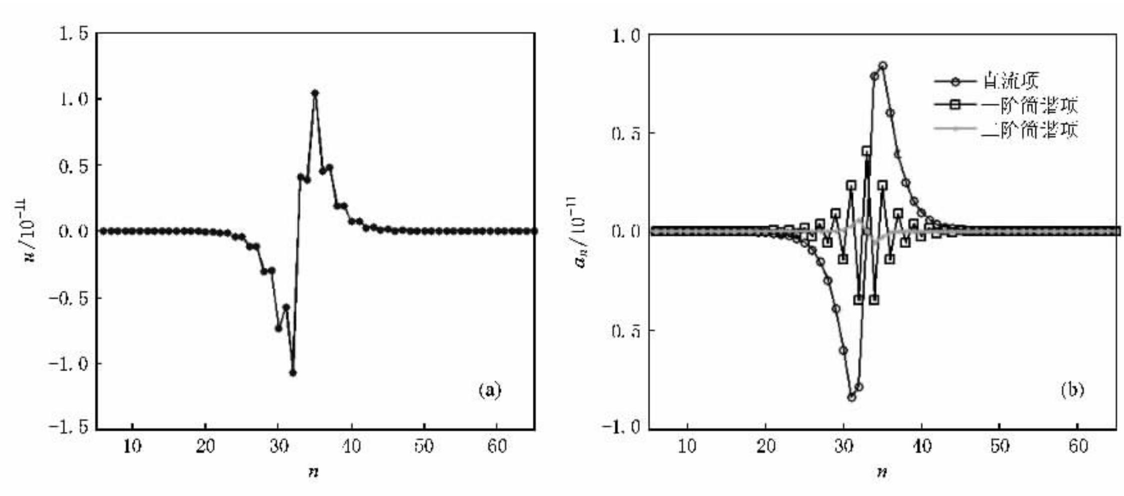

图 1　三次相互作用势函数作用下系统的离散呼吸子解

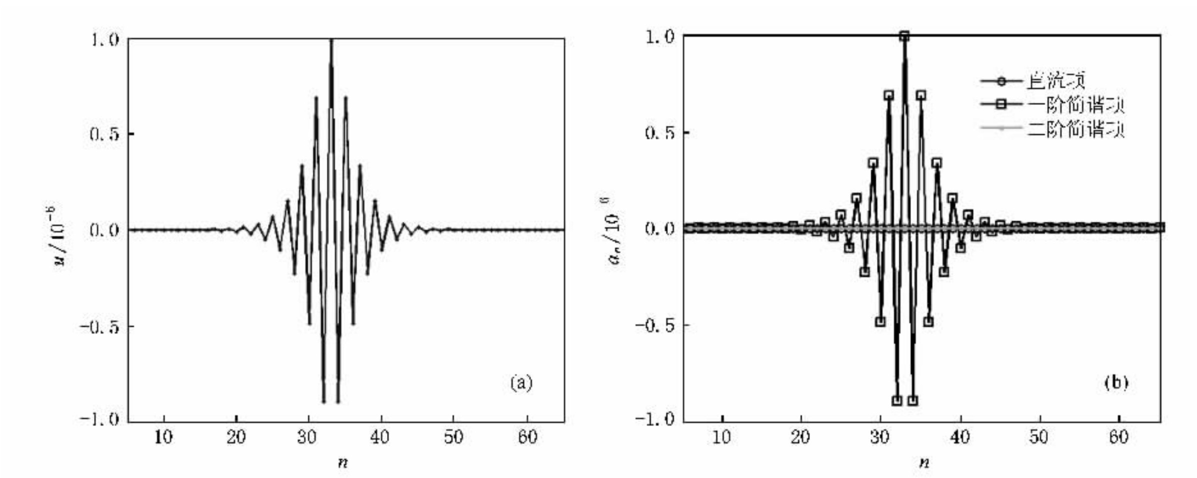

图 2　四次相互作用势函数作用下系统的离散呼吸子解

从图 2(a)中可以看出，在四次非线性相互作用势函数的作用下，系统中的 DB 解是关于中心原子偶对称的解. 同样将这个解分解成为(4)式所示的形式并观察各项的振幅，结果见图 2(b). 从图 2(b)中可以看出四次非线性相互作用势函数的作用是产生偶对称的一阶简谐项，并且不产生直流项和二阶简谐项. 对比图 1 和图 2 可以看出试探解(4)中所出现的直流项和二阶简谐项是由于三次非线性势函数的加入导致的. 这也证明了在一个没有三次相互作用势函数的一维单原子链中，旋转平面波近似是一个有效且合理的近似.

3.3. 三次非线性在位势函数的作用

取 $\alpha=0.5$，$K_3=K_4=\beta=0$，同样的方法计算得到系统中的 DB 解见图 3(a)，相应的解的各阶系数的数值结果见图 3(b).

从图 3 中可以看出三次在位势函数的作用是产生偶对称的直流项和二阶简谐项. 这是与三次相互作用势函数最明显的区别. 并且通过比较图 3(b)和图 1(b)中各阶系数的相对大小，三次在位势函数对直流项和二阶简谐项的相对作用小于三次相互作用势函数.

3.4. 四次非线性在位势函数的作用

取 $\beta=0.5$，$K_3=K_4=\alpha=0$，同样进行数值计算得到在四次在位势函数作用下，系统中的 DB 解，见图 4(a). 相应的解的各阶系数的大小，见图 4(b).

从图 4 中可以看出四次在位势函数作用下将得到偶对称的 DB 解，并且不会导致 DB 解中出现直流或是二阶简谐项的分量. 从这一点上说，四次在位势

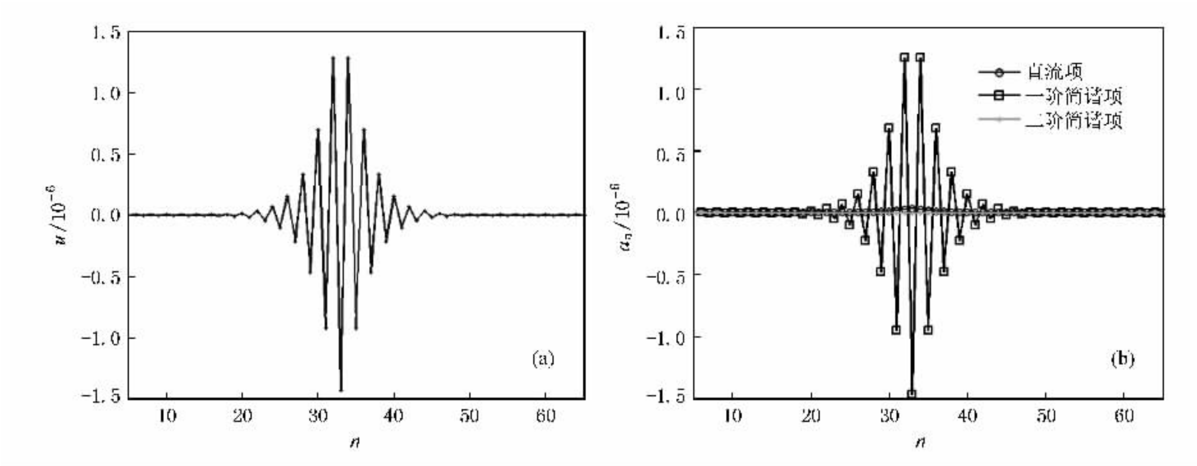

图 3 三次在位势函数作用下系统的离散呼吸子解

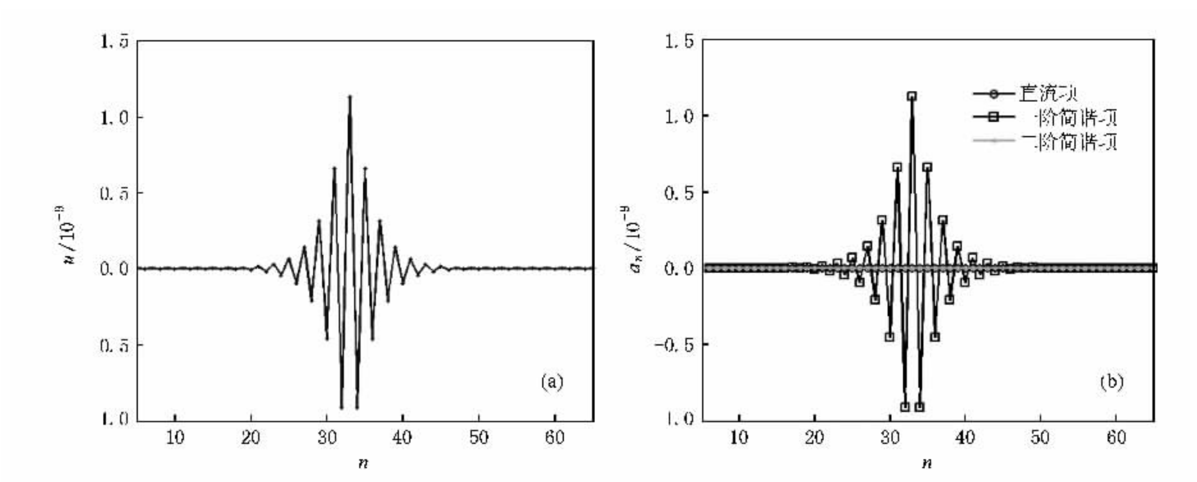

图 4 四次在位势函数作用下系统中的离散呼吸子解

函数的作用与四次相互作用势函数是类似的.

4. 讨论和结论

4.1. 方法的可行性

在旋转平面波近似中,假设系统的解的形式为 $u_i = a_i \cos\omega t$. 将其带入系统运动方程并忽略时间导数项和高于一阶简谐项的所有项,从而将原运动方程转化为一个关于 $\cos\omega t$ 的系数的代数方程组. 求解该代数方程组就可以得到系统中可能存在的解. 由于三次非线性势函数在运动方程中体现为解的偶次幂. 这直接导致了与三次势函数相关的项是常数项和二阶简谐项. 因此要想在系数代数方程中体现三次势函数的作用,必须要考虑二阶简谐项和常数项. 这就是文中 ERWA 方法提出的缘由[9].

文中所采用的解的形式(4)是合理的,主要表现在两个方面. Konotop 已经证明在双原子窄带隙晶格中,三次势函数的存在将会导致二次谐波的产生[11]. 另一方面,形如(4)式的解实际上是对真实的解进行 Fourier 展开并在二阶简谐项处截断. 该方法是由 Marín 等人提出的[7]. 一般来说解的 Fourier 展开将会有无穷项. 因此在进行计算的时候要根据精度的要求和非线性势的特殊作用进行截断. 从上面的分析中已经可以看出三次项的作用是产生直流项和二阶简谐项,并且根据量级假设(5)式以及第 3 节中得到的结果的量级都可以确定截断到二阶简谐项是合理的. 另外,Franchini 应用 ERWA 法研究 LiI 原子链[9],得到的一阶简谐项和二阶简谐项的最大振幅之间的关系与用分子动力学(MD)模拟得到的强度谱是一致的. 这也证明了文中所采用的振幅量级假设是合理的.

4.2. 结　论

采用 ERWA，数值求解一维 KG/FPU 混合原子链中的局域振动模得到：第一，直流项的产生是由三次非线性势函数引起的．这个结论已经由 Hu Bambi 的一系列研究所证明[12]．本文通过相对简单的方法将这个性质直观地表现出来．第二，所有的非线性势的作用主要体现在对一阶简谐项的影响上．原因主要是我们所研究的非线性系统是弱非线性小振幅的振动，这就决定了我们所得到的解是对线性条件下平面波解的调制．一阶简谐振动是主要的，因此非线性的作用也表现的较为明显．第三，二阶简谐振动主要是由三次非线性势函数引起的．当某个原子开始以一定的频率做简谐振动的时候，系统中的三次非线性作用会使这个初始振动转化成带有直流项和二阶简谐振动并具有特定的对称性的解，而系统中的相互作用会使得初始的振动能量传递给相邻的原子．

另外，不同的非线性参数引起 DB 解的对称性是不同的．三次非线性相互作用势的作用是产生反对称的直流项和二阶简谐振动项；三次非线性在位势的作用则是产生对称的直流项和二阶简谐振动项．

[1] Dorignac J，Zhou J，Campbell D K 2008 *Physica* D **237** 486

[2] Li M S，Tian Q 2007 *Acta Phys*. *Sin*. **56** 1041（in Chinese）［李宓善 田　强 2007 物理学报 **56** 1041］

[3] Schwarz U T，English L Q，Sievers A J 1999 *Phys*. *Rev*. *Lett*. **83** 223

[4] Trias E，Mazo J J，Orlando T P 2000 *Phys*. *Rev*. *Lett*. **84** 741

[5] Xie A，van der Meer L，Hoff W，Austin R H 2000 *Phys*. *Rev*. *Lett*. **84** 5435

[6] Aubry S 2006 *Physica* D **216** 1

[7] Marín J L，Aubry S，Floria L M，1998 *Physica* D **113** 283

[8] Johansson M 2006 *Physica* D **216** 62

[9] Franchini A，Bortolani V，Wallis R F 2002 *J*. *Phys*.：*Condens Matter* **14** 145

[10] Lv B B，Zhou Q，Tian Q 2008 *Journal of Beijing Normal University*（Natural Science）**44** 11（in Chinese）［吕彬彬、周　倩、田　强 2008 北京师范大学学报（自然科学版）**44** 11］

[11] Konotop V V 1996 *Phys*. *Rev*. E **54** 4266

[12] Hu Bambi，Huang G X，Velarde M G 2000 *Phys*. *Rev*. E **62** 2827

The effect of nonlinear parameters in one-dimensional mixed Klein-Gordon/Fermi-Pasta-Ulam chain*

Zhou Qian† Lü Bin-Bin Tian Qiang

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

(Received 3 July 2008; revised manuscript received 4 August 2008)

Abstract

The possible discrete breathers are obtained numerically in the system of one-dimensional mixed Klein-Gordon/Fermi-Pasta-Ulam chain on the basis of simplified motion equations by using extended rotating plane wave approximation. Furthermore, the effect of each nonlinear parameter on the static, first-order harmonic and second-order harmonic components of the discrete breathers is investigated.

Keywords: mixed Klein-Gordon/Fermi-Pasta-Ulam chain, extended rotating plane wave approximation, discrete breathers, symmetry

PACC: 6320R, 6320P, 0547

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10574011) and Innovative Research Group Foundation of Beijing Normal University.

† E-mail: zhouqian@mail.bnu.edu.cn