

含有格点势的一维 Fibonacci 链热传导性质的研究*

徐 慧[†] 崔麦玲 马松山

(中南大学物理科学与技术学院,长沙 410083)

(2009 年 10 月 19 日收到;2010 年 1 月 25 日收到修改稿)

用传输矩阵的方法,研究了格点势(on-site 势)对一维 Fibonacci 链的热传导性质(透射系数、Lyapunov 指数及热导率 κ)的影响. 研究表明:当固定原子质量比和力作用常数比时,随着格点势的增大,低频区域的透射系数减小,对应的 Lyapunov 指数增大,透射谱向高频方向移动. 同时,格点势越大,同样大小的体系对应的 κ 越小,当格点势足够大时, κ 会趋近零. 在热导率 κ 对振动频率 ω^2 作图中, κ 呈现台阶式缓慢上升的趋势,且在高频端趋于某一稳定值.

关键词: on-site 势, Fibonacci 链, 传输矩阵, 透射系数

PACC: 6670, 6740K

1. 引 言

过去的 20 年中,在分子器件的实现及应用的带动下^[1-3],无论是非线性动力学还是统计物理领域,低维系统中的热传导问题成为研究的热点. 文献[4-6]用分子动力学方法分别研究了 Fermi-Pasta-Ulam (FPU)链、双原子 Toda 晶格链、含有杂质和质量无序的 FPU 链等体系的热传导性质. 研究发现,它们的热传导行为都不满足 Fourier 热传导定律,其热导率 κ 随体系粒子数 N 的增大而增大,呈现出一种幂指数关系 $k \propto N^\alpha$ ($0 < \alpha \leq 1$), 这种行为现在被称为反常的热传导现象(anomalous heat conduction)^[7]. 2002 年, Narayan 和 Ramaswamy^[8]通过分析一维流体的热输运性质,从理论上证明了具有总动量守恒的一维体系中反常的热输运行为存在的合理性,并且得到了 $k \propto N^{0.33}$ 的标度关系. 此外,对于一些含有格点势的一维体系,例如,文献[9-12]中分别研究了 Ding-a-Ding 模型、Ding-Dong 模型、Frenkel-Kontoroval (FK)模型、 Φ^4 链等的热传导性质. 格点势破坏了体系的动量守恒,研究表明,当体系达到一定的大小后,这些体系的 κ 收敛.

近 10 年来,人们利用解析方法和数值方法研究了各种一维链的热传导^[13-17]. 根据以往的研究成果,在一维的可积系统中,比如简谐链、单原子 Toda

模型等,在链上不能形成温度梯度,其热传导不满足 Fourier 定律;对于一维的不可积系统,其中一些如 FK 链等模型可以在链上形成梯度分布, $dT/dx \propto N^{-1}$, 同时其 κ 是一个与系统尺寸无关的常数,这些系统还是遵循 Fourier 热传导定律的;而包括 FPU 模型以及双原子 Toda 模型在内的另一些不可积系统,在链上温度仍然可以形成梯度分布, $dT/dx \propto N^{-1}$, 但 κ 正比于 $N^{\alpha-1}$, 其中参数 α 由具体系统的特点决定. 在这样的系统中,虽然有非线性存在,但却没有正常的热传导. 因此,什么样的系统具有正常的热传导性质是当前非常活跃的课题之一. 对于第一类可积系统,人们主要研究了两种情况^[13],一种是均匀链,一种是随机链. 对于这两种系统已经发现 $J \propto N^{\alpha-1}$, 其中对于前者 $\alpha = 1$, 对于后者 $\alpha = 0.5$. 本文选取的研究模型正是居于均匀链和随机链之间的准周期链——Fibonacci 链.

自从 Shechtman 等^[18]在实验中发现准晶这种特殊结构的固态物质以来,数学家、物理学家们对准晶的电学性质、热学性质、光学性质、磁学性质等等进行了广泛的研究,并从理论上构造了许多准周期序列模型探讨它们的物理规律,如 Fibonacci 模型、广义 Fibonacci 模型、Penrose 模型等. Fibonacci 模型作为最简单的一种准周期模型,在模拟计算中可简单等效为一维简谐振子链,格点原子之间除了存在相互作用势能外,同时可能存在与邻近原子无

* 中国高等学校博士点专项科研基金(批准号:20070533075)和湖南省科技计划(批准号:2009FJ3004)资助的课题.

[†] E-mail: cmpxhg@mail.csu.edu.cn

关的外在势能,即格点(on-site)势能.格点势的存在相当于把一个简谐振子链放入可调制的外场中,我们可通过调节格点势的大小来改变体系的热传导性质.因此,研究格点势中 Fibonacci 链的热传导性质对于了解准周期体系的热传导性质有着很重要的意义.

此外,文献[19],[20]从弹性波方程出发,利用传输矩阵的方法研究了 n -mer 体系、准周期 Fibonacci 链等模型的声子热传导性质,但并未考虑格点势对其的影响.本文在其基础上重点考虑了格点势的作用,进一步研究了一维 Fibonacci 链的热传导性质.

2. Fibonacci 链模型和计算方法

Fibonacci 链由下列递推关系生成^[21]: $S_{m+1} = \{S_m/S_{m-1}\}$, 其中 $m \geq 1$, 称为 Fibonacci 代.在本文中,我们取 $S_0 = B, S_1 = A$, 其中 A, B 分别代表两种不同类型的格点原子,这样构造的 $\{S_m\}$ 序列具有如下的结构形式: $A, AB, ABA, ABAAB, ABAABABA, ABAABABAABAAB, \dots$.

令 F_m 为第 m 代序列的格点原子数,习惯上被称为 Fibonacci 数,遵循递推关系 $F_{m+1} = F_m + F_{m-1}$, 初始条件为 $F_0 = 1, F_1 = 1$.

只考虑最近邻格点之间的相互作用(紧束缚近似下),一维 Fibonacci 链原子的运动方程可表示为:

$$-m_i \omega^2 \mu_i = K_{i+1,i}(\mu_{i+1} - \mu_i) + K_{i,i-1}(\mu_{i-1} - \mu_i) + V_i \mu_i, \quad (1)$$

其中 μ_i 是第 i 个格点偏离平衡位置的位移, m_i 是第 i 个格点的质量, ω 是振动频率, $K_{i+1,i}$ 和 $K_{i,i-1}$ 是最近邻原子间的力作用常数, V_i 是第 i 个原子的格点势.在本文中,我们设两种格点原子的质量分别为 m_A 和 m_B , 最近邻原子的力作用常数设为 K_{AA} , K_{AB} 和 K_{BA} 三种(从 Fibonacci 链的建构机理可以看出,链中不可能有两种 B 型原子处于最近邻状态).为简单起见,我们特设 $K_{AB} = K_{BA}$, 并令 $\beta = m_B/m_A$ (即原子质量比), $\gamma = K_{AA}/K_{AB}$ (即力作用常数比).则(1)式可变换成下列递归形式:

$$\begin{pmatrix} \mu_{i+1} \\ \mu_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_i & -K_{i,i-1} \\ K_{i,i+1} & K_{i,i+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_i \\ \mu_{i-1} \end{pmatrix} = P_i \begin{pmatrix} \mu_i \\ \mu_{i-1} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

其中 $a_i = K_{i,i-1} + K_{i,i+1} + V_i - m_i \omega^2$, P_i 是 μ_i 和 μ_{i+1} 之间的传输矩阵.因此,总的传输矩阵可表示为:

$$M(N, \omega) = \prod_{i=1}^N P_i = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}, \quad (3)$$

N 是整条链中的原子数, $M_{i,j}$ 为总传输矩阵的矩阵元.我们可以定义总传输矩阵的迹为 $\text{Tr}M$, 声子在允带区域中 ω 需满足下列条件^[22]

$$|\text{Tr}M| \leq 2. \quad (4)$$

从总传输矩阵的矩阵元中,我们可以求出透射系数 $t(N, \omega)$ 和 Lyapunov 指数 $\Gamma(N, \omega)$, 表达式如下:

$$t(N, \omega) = 4 \sin^2 K / D(N, \omega), \quad (5a)$$

$$\Gamma(N, \omega) = \frac{1}{N} \ln(M_{11}^2 + M_{12}^2 + M_{21}^2 + M_{22}^2), \quad (5b)$$

其中 $D(N, \omega) = [M_{12} - M_{21} + (M_{11} - M_{22}) \cos K]^2 + (M_{11} + M_{22})^2 \sin^2 K$, $\cos K = 1 - m_A \omega^2 / 2K_{AA}$.

为进一步研究该体系的热传导性质,有必要计算出它的 κ .我们考虑的是 Rubin-Green 热源^[23,24], 链首尾两端的两个原子分别连着平衡温度为 T_L 和 T_R 的两个热库.利用 Rubin-Green 公式:

$$J = \frac{T_L - T_R}{4\pi} \int_0^\infty t^2(N, \omega) d\omega, \quad (6)$$

我们可以计算体系的热流密度 J .为了计算方便(由于 $\omega > 3.5$ 时, $t(N, \omega)$ 大都已为零),我们令 $S(N) = \int_0^{3.5} t^2(N, \omega) d\omega$, 利用矩形方法可先求出 $S(N)$.再根据 Fourier 定律: $J = k \nabla T \approx k(T_L - T_R)/N = k \Delta T / N$, 我们可以得到体系的 κ :

$$\kappa = \frac{S(N)N}{4\pi}. \quad (7)$$

3. 结果和讨论

在本文中,我们固定 β 和 γ 的值,主要考虑格点势变化,计算了 $N = 610, \beta = 2, \gamma = 1.2, V(A) = V(B) = 0, 0.5, 1, 1.5$ 四种情况的 $t(N, \omega), \Gamma(N, \omega)$ 以及 κ , 并重点讨论了格点势对它们的影响.

图 1 给出了 $\beta = 2, \gamma = 1.2$ 时不同格点势的 $t(N, \omega)$ 与 ω^2 的关系.从图 1(a)中,我们可看出声子在低频区域(小于 0.80)的 $t(N, \omega)$ 很高,几乎接近 1,而在高频区域(大于 1.85)的 $t(N, \omega)$ 为零.同时,对比图 1(a)~(d),可以发现格点势对 $t(N, \omega)$ 有很大的影响.对不同的格点势设置,只有特定 ω 的声子才有较大的 $t(N, \omega)$, 对应于图中的共振峰,系统对这些声子态是透明的.格点势取值不同,共振峰的位置和高度也不同.因此,通过适当设置格点

势,可以使特定的声子态具有大的 $t(N, \omega)$,从而找出所需要的声子态.同时,还可发现:格点势越大,声子在低频区域的 $t(N, \omega)$ 越小,低频区带隙宽度变大,即透射谱会向高频方向移动.因此,可以通过调节格点势来实现低频区带隙宽度的调节,有效地阻隔某些 ω 范围内的弹性波,从而可用于制作带阻滤波器^[25].

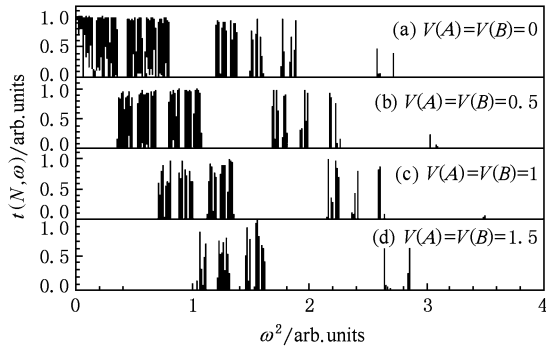


图1 $t(N, \omega)$ 与 ω^2 的关系 $N = 610, \beta = 2, \gamma = 1.2$

为了进一步验证上述变化规律,我们又计算了 $\beta = 1.5, \gamma = 2$ 的情况(如图2),可以得出相同的结论.我们通过多次尝试发现:当 β 和 γ 取不同的固定值时,格点势对 $t(N, \omega)$ 的影响规律相同,都是随着格点势的增大,声子在低频区域的 $t(N, \omega)$ 减小,透射谱向高频方向移动.当 β 和 γ 取不同值时,体系的声子输运特性相应会发生变化,我们将在后续论文中阐述.

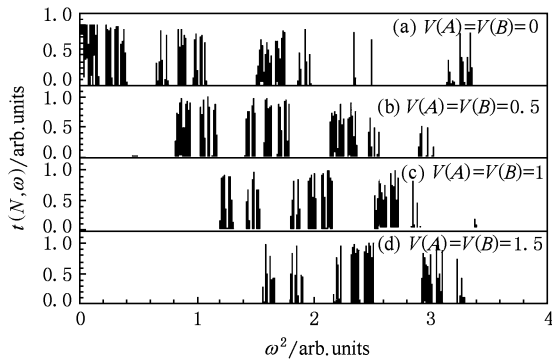


图2 $t(N, \omega)$ 与 ω^2 的关系 $N = 610, \beta = 1.5, \gamma = 2$

我们认为, $t(N, \omega)$ 对格点势的这种较强的依赖关系,原因在于当格点势较大时,界面存在较强的散射作用,相当于有较高的势垒存在,所以系统也就具有较小的 $t(N, \omega)$. 声子要向前传输,必须克服势垒的阻碍,须具有较大的能量,因此透射谱会向高频方向移动.

图3所示为不同格点势下的 $\Gamma(N, \omega)$ 和 ω^2 的关系.从图3(a)可看出,在低频区域, $\Gamma(N, \omega)$ 非常小,随着 ω 的增大, $\Gamma(N, \omega)$ 的峰值增大,表现为波峰逐渐升高.对照图3中的(a) — (d),可以发现格点势对 $\Gamma(N, \omega)$ 有影响.随着格点势增大,低频区域的 $\Gamma(N, \omega)$ 逐渐增大,图3(b)中低频区开始出现波峰,表示出现了带隙.图3(c)和(d)中带隙宽度进一步增大.我们知道, $\Gamma(N, \omega)$ 谱和 $t(N, \omega)$ 谱有一定的对应关系, $t(N, \omega)$ 为零的区域对应于 Lyapunov 谱中的峰值,即 $t(N, \omega)$ 较小时, $\Gamma(N, \omega)$ 较大,反之亦然.因此从 Lyapunov 谱中也可看出透射谱是向高频方向移动的.

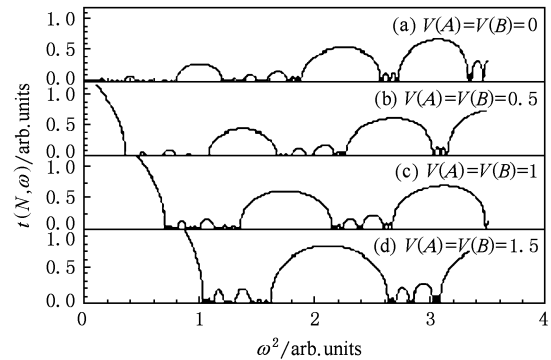


图3 $\Gamma(N, \omega)$ 与 ω^2 的关系 $N = 610, \beta = 2, \gamma = 1.2$

图4显示的是不同格点势的 κ 与系统大小 N 的关系.由图4可知, κ 随 N 的增大而增大.同时, κ 对格点势同样有较强的依赖关系,格点势越大,同样大小的体系对应的 κ 越小,即 κ 对 N 的依赖性会减弱.当格点势足够大时, κ 会趋近零.我们通过对图4中曲线 a, b, c, d 数据拟合,分别得出以下指数关系: $\kappa \propto N^{0.88}, \kappa \propto N^{0.72}, \kappa \propto N^{0.56}, \kappa \propto N^{0.42}$. 可以看出 κ 和 N 同样满足关系式 $\kappa \propto N^\alpha$, 并且格点势越

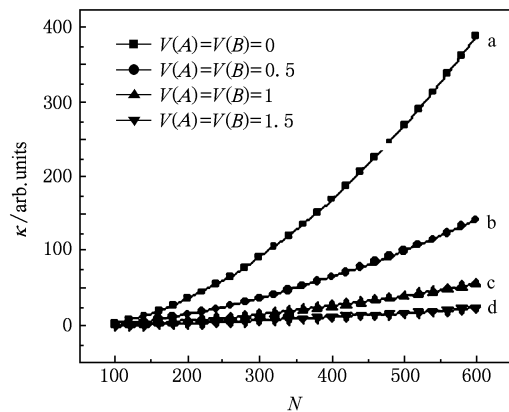


图4 κ 与 N 的关系 $\beta = 2, \gamma = 1.2$

大, α 值越小.

图 5 表示的是不同格点势的 κ 和 ω 的关系. 我们可以发现: 随着 ω 的增加, κ 整体上呈现台阶式上升的趋势. 与相应的 $t(N, \omega)$ 相比, 可发现在平台处的 ω 区域刚好对应着 $t(N, \omega)$ 谱中的禁带区域 (即带隙位置), 上升处的 ω 对应着共振峰处的 ω (即共振频率); 而在高频区, 由于 $t(N, \omega)$ 为零, 所以 κ 谱线在高频端趋于某一稳定值. 这主要是因为 κ 源于声子的振动模, 声子只能在允带区域内传播, 在禁带区域不能传播, 故在禁带区域会出现平台; 而在出现共振峰时, 体系重新为声子传播打开了通

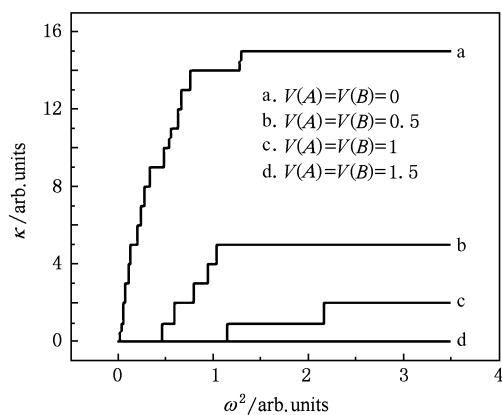


图 5 κ 与 ω^2 的关系 $N = 610, \beta = 2, \gamma = 1.2$

道, 故 κ 会急剧上升. 所以, 随着 ω 的增加, 体系 κ 呈现出台阶式上升的特性.

同时, 对照图 5 中曲线 a—d, 我们可发现: 随着格点势的增大, 体系的 κ 下降. 并且随着格点势的增大, 平台数目减少, 宽度增大, 这和透射谱中的带隙数目减少、带隙宽度增大相对应. 原因同样在于格点势增大, 界面的散射能力增强, 相当于有更高的势垒存在, 使声子向前传输更困难, 从而导致 $t(N, \omega)$ 和 κ 的下降.

4. 结 论

1) 利用传输矩阵的理论, 计算了含有格点势的一维 Fibonacci 链的 $t(N, \omega)$ 和 $\Gamma(N, \omega)$. 结果发现: 当原子质量比和力作用常数比取不同的固定值时, 格点势对其的影响规律均相同, 即随着格点势的增大, 低频区域的 $t(N, \omega)$ 会减小, 对应的 $\Gamma(N, \omega)$ 会增大, 透射谱会向高频方向移动.

2) 根据 Rubin-Green 公式进一步计算了含有格点势的一维 Fibonacci 链的 κ . 发现当固定原子质量比和力作用常数比时, 格点势越大, 同样大小的体系对应的 κ 越小, 当格点势足够大时, κ 会趋近零. 在 κ - ω^2 图中, κ 会呈现台阶式缓慢上升的趋势, 且在高频端趋于某一稳定值.

- [1] Lin S 2003 *Permanent Magnetism Organization and Vacuum Breaker* (Beijing: Mechanical Industry Press) (in Chinese) [林莘 2003 永磁机构与真空断路器 (北京: 机械工业出版社)]
- [2] Li J J 2005 *Pragmatic Technology of High School Pressure Switch Equipment* (Beijing: Mechanical Industry Press) (in Chinese) [李建基 2005 高中压开关设备实用技术 (北京: 机械工业出版社)]
- [3] Chaly A, Polyanov V, Zakharov V 2005 *The Fifth International Conference on Power Transmission & Distribution Technology* Beijing October 12—14, 2005 p147
- [4] Lepri S, Livi R, Politi A 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 1896
- [5] Hatano T 1999 *Phys. Rev. Lett.* **59** R1
- [6] Li B, Zhao H, Hu B 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 63
- [7] Li X X, Tang Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 6556 (in Chinese) [李新霞、唐翌 2006 物理学报 **55** 6556]
- [8] Narayan O, Ramaswamy S 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 200601
- [9] Giulio C, Joseph F, Franco V, William M V 1984 *Phys. Rev. Lett.* **52** 1861
- [10] Prosen T, Robnik M 1992 *J. Phys. A* **25** 3449
- [11] Hu B, Lei Y 2005 *Chaos* **15** 015119
- [12] Savin A V, Gendelman O V 2003 *Phys. Rev. E* **67** 041205
- [13] Tong P Q, Li B W, Hu B B 1999 *Phys. Rev. B* **59** 8639
- [14] Rubin R J, Green W L 1971 *Math. Phys.* **12** 1686
- [15] Lepri S, Livi R, Poiti A 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 1896
- [16] Kaburaki H, Machida M 1993 *Phys. Lett. A* **181** 85
- [17] Hu B, Li B W, Zhao H 1998 *Phys. Rev. E* **57** 2992
- [18] Shechtman D, Blech I, Gratias D 1984 *Phys. Rev. Lett.* **53** 1951
- [19] Cao L S, Peng R W, Zhang R L, Zhang X F, Wang M, Huang X Q, Hu A, Jiang S S 2005 *Phys. Rev. B* **72** 214301
- [20] Enrique M 1999 *Phys. Rev. B* **61** 10
- [21] Huang X Q, Gong C D 1998 *Phys. Rev. B* **58** 739
- [22] Bellissard J, Iochum B, Scoppola E, Testard D 1989 *Math. Phys.* **125** 527
- [23] Rubin R J, Greer W L 1971 *Math. Phys.* **12** 1686
- [24] Connor A J O, Lebowitz J L 1974 *Math. Phys.* **15** 692
- [25] Cao Y J, Yang X 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3620 (in Chinese) [曹永军、杨旭 2008 物理学报 **57** 3620]

Heat conduction in one-dimensional Fibonacci chain with on-site potential^{*}

Xu Hui[†] Cui Mai-Ling Ma Song-Shan

(College of Physical Science and Technology, Central South University, Changsha 410083, China)

(Received 19 October 2009; revised manuscript received 25 January 2010)

Abstract

By making use of the method of transfer matrix, we study the behaviors of heat conduction in one-dimensional Fibonacci chain under the influence of on-site potential (including transmission coefficient, Lyapunov coefficient and heat conduction). The results show that, with the on-site potential increasing while fixing the ratios of atom mass and force constant, the transmission coefficient of the low-frequency region decreases, and the corresponding Lyapunov coefficient increases, and the transmission spectrum moves to the higher frequency region. Meanwhile, with the increasing of on-site potential, the heat conductivity of the system decreases. When the on-site potential is large enough, the thermal conductivity of the system will tend to zero. In the curve of $\kappa-\omega^2$, the thermal conductivity shows a slowly increasing trend in steps, and tends to a certain value in the high-frequency region.

Keywords: on-site potential, Fibonacci chain, transfer matrix, transmission coefficient

PACC: 6670, 6740K

^{*} Project supported by the Doctoral Program Foundation of Institutions of Higher Education, China (Grant No. 20070533075) and the Hunan Provincial Science and Technology Project of China (Grant No. 2009FJ3004).

[†] E-mail: cmpxhg@mail.csu.edu.cn