

一维 Frenkel-Kontorova (FK) 模型原子链的相变研究*

韩秀琴¹⁾ 姜虹¹⁾ 石玉仁¹⁾ 刘妍秀¹⁾ 孙建华¹⁾ 陈建敏²⁾ 段文山^{1)†}

1) (西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)

2) (固体润滑国家重点实验室, 中国科学院兰州化学物理研究所, 兰州 730000)

(2010 年 10 月 29 日收到; 2011 年 3 月 4 日收到修改稿)

文章基于一维 Frenkel-Kontorova 模型, 研究了边界原子的初始速度对原子链运动状态的影响, 数值模拟结果表明: 当 $v < v_1$ 时, 原子处于“振荡区”, 当 $v_1 < v < v_2$ 时, 原子处于“混沌区”, 当 $v > v_2$ 时, 原子处于“均匀区”. 同时我们发现临界速度 v_1 和 v_2 随原子数目和垫底势高度的变化而变化.

关键词: Frenkel-Kontorova (FK) 模型, 相变

PACS: 68.35.Rh, 05.45.Pq, 05.45.-a

1. 引言

Frenkel-Kontorova (FK) 模型^[1-5]认为当两固体表面相接触时, 上层固体薄膜由一维的线性晶格链组成, 下层固体薄膜用一周期势场^[6-11]来表示. 它是凝聚态物理中的一个典型模型, 可被广泛应用在很多领域, 例如, 超离子导体^[12]、排挤子^[13]、超导体中的漩涡晶格^[14, 15]、电荷密度 (CDW)^[16]、胶体^[17]、热传导^[2, 18]、公度-不公度 (CI) 相变^[19]、维格纳晶体^[20]、金属格点^[21, 22]等, 特别是对于固体摩擦现象, FK 模型已经受到越来越多的关注, 并把它作为深入了解纳米摩擦学领域^[23]复杂问题的一种理论工具.

到目前为止, 对一维 FK 模型已有大量的研究^[24-29]. 本文我们借助标准一维 FK 模型研究了原子链中边界上单个原子初始条件对于原子链的运动状态的影响. 结果表明: 一维原子链的运动状态对其边界原子的初始速度具有较强的敏感性, 我们用最大李雅普诺夫指数描述了这种敏感性.

2. 理论模型

我们研究的系统由 N 个相同的原子构成的一维原子链组成, 同时该系统受到周期性垫底的相互

作用, 此时, 系统的哈密顿量由下式给出:

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{1}{2} p_i^2 + V(x_i) + U(x_{i+1} - x_i) \right]. \quad (1)$$

其中, x_i 表示第 i 个原子的位置, p_i 表示相应的动量, $V(x_i)$ 为周期性垫底势, $U(x_{i+1} - x_i)$ 为链中原子间的相互作用, 在标准 FK 模型^[7, 30]中

$$V(x_i) = \frac{db}{2\pi} \left[1 - \cos \frac{2\pi x_i}{b} \right],$$

$$U(x_{i+1} - x_i) = \frac{1}{2} k (x_{i+1} - x_i - a)^2.$$

其中 d 为垫底势的高度, k 为弹性系数, b 表示垫底势的周期, a 表示晶格常数^[31] (相邻原子间的平衡距离).

当 $N=2$, $a=b=2\pi$ 时, 系统的哈密顿量为

$$H_2 = \frac{1}{2} p_1^2 + \frac{1}{2} p_2^2 + d(1 - \cos x_1) + d(1 - \cos x_2) + \frac{1}{2} k (x_2 - x_1 - a)^2. \quad (2)$$

对应的正则方程为

$$\frac{dx_1}{dt} = p_1, \quad (3)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = p_2, \quad (4)$$

$$\frac{dp_1}{dt} = -d \sin x_1 + k(x_2 - x_1 - a), \quad (5)$$

$$\frac{dp_2}{dt} = -d \sin x_2 + k(x_1 - x_2 + a). \quad (6)$$

* 国家自然科学基金 (批准号: 10875098) 和西北师范大学科技创新工程基金 (批准号: NWNNU-KJCXGC-03-48) 资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: duanws@nwnu.edu.cn

我们用四阶龙格-库塔算法求解方程(3)—(6), 并选择自由边界条件. 初始条件为 $x_1(t=0) = 0$, $x_2(t=0) = a$; 除原子链中左边界上原子的初始速度不为零(沿 x 轴正方向)外其他原子的初始速度均为零. 时间步长 $dt = 0.001$. 弹性系数 $k = 1.0$.

3. 计算结果与分析

3.1. 边界原子的初始速度 v 对原子链运动状态的影响

图1反映了一维原子链中边界原子的不同初始速度对原子链运动状态的影响. 当一维原子链中边界原子的初始速度比较小时, 两个原子在各自的平衡位置($x_1(t=0) = 0$, $x_2(t=0) = a$)附近做准周期运动, 如图1(a)所示; 当初始速度大于临界值 v_1 ($v_1 = 1.234795$) 时, 原子就会离开自己的平衡位置, 呈现出如图1(b)和(c)所示的运动轨迹, 在图1(b)中, 原子开始时在各自的平衡位置附近做准周期振荡, 随着时间的演化, 原子的运动方向将沿 x 负方向, 而在图1(c)中, 当初速度继续增大时, 如

图1(c)所示, 原子开始沿 x 轴正向运动, 随后又做准周期振荡; 当边界原子的初始速度超过临界速度 v_2 ($v_2 = 1.2347954$) 时, 原子会一直沿 x 轴正方向运动, 如图1(d)所示. 为了考察上述结果的普适性, 我们借助最大李雅普诺夫指数进一步刻画了边界原子的初始速度对原子链运动状态的影响.

最大李雅普诺夫指数 λ_1 与边界原子的初始速度 v 的关系, 如图2所示. 从图2中我们可以看到, 当边界原子的初始速度 $v < v_1$ 时, 最大李雅普诺夫指数 $\lambda_1 \leq 0$, 此时原子在各自的平衡位置附近做准周期振荡, 如图1(a)所示, 我们把这个相变区域定义为“振荡区”; 当 $v_1 < v < v_2$ 时, 最大李雅普诺夫指数 $\lambda_1 > 0$, 即, 当 $t > 0$ 时, 原子离开自己的平衡位置, 其运动轨迹呈现出如图1(b)和图1(c)所示的情况, 我们把这一相变区域定义为“混沌区”; 而当 $v > v_2$ 时, 最大李雅普诺夫指数 $\lambda_1 \leq 0$, 在这个相变区, 原子离开自己的平衡位置一直沿 x 轴正方向运动, 该区称为“均匀区”. 我们将 v_1 和 v_2 分别定义为第一相变临界速度和第二相变临界速度. 综上所述, 原子链的运动状态对其边界原子的初始速度具有较强的敏感性.

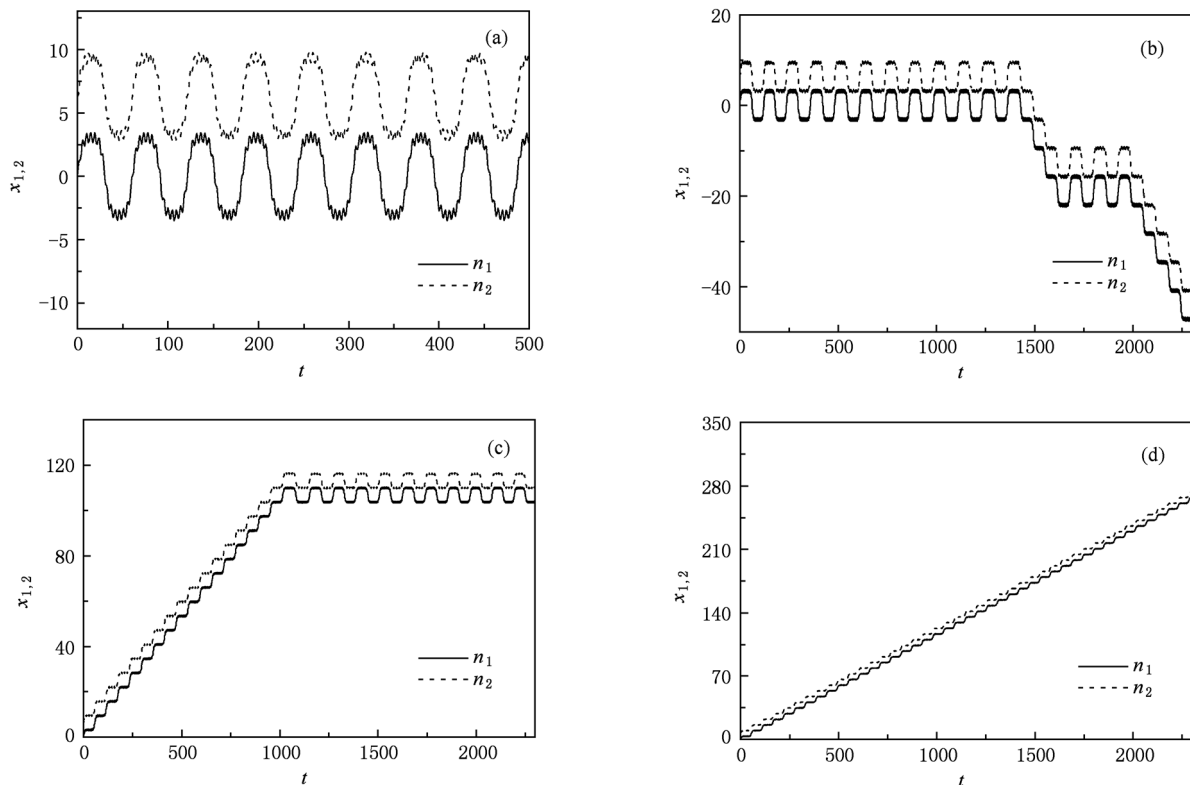


图1 一维原子链中原子的位置随时间的变化关系, $d = 0.1$, $N = 2$ (a) $v = 1.234794$; (b) $v = 1.234795$; (c) $v = 1.2347952$; (d) $v = 1.2347954$

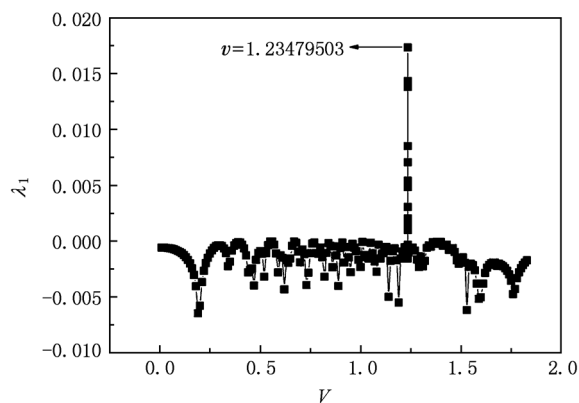


图2 $N = 2$, $d = 0.1$ 时, 最大李雅普诺夫指数 λ_1 和一维原子链中边界原子的初始速度 v 的关系

3.2. 外参数对第一相变临界速度和第二相变临界速度的影响

前面我们研究了原子数目 $N = 2$ 的情况, 当原子数目较多时, 上述结论仍然适用, 但第一相变临界速度 v_1 和第二相变临界速度 v_2 发生了变化. 两个相变临界速度与原子链中原子数目 N 的关系, 如图3所示, 我们观察到, 两个相变临界速度随原子数目

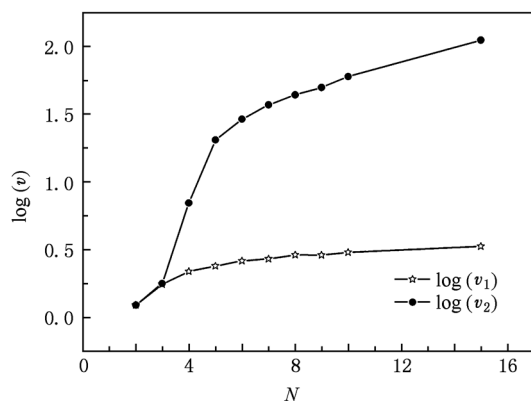


图3 $d = 0.1$ 时, 两个相变临界速度与原子链中原子数目 N 之间的关系

的增加而增大, 同时我们还发现, 当原子链中原子的数目比较少时, 两个相变临界速度相差比较小, 但随着原子数目的增多, 两个相变临界速度相差会逐渐增大, 进而会影响3个相变区域的变化.

我们还研究了一维原子链中垫底势的高度 d 对第一相变临界速度 v_1 和第二相变临界速度 v_2 的影响, 两个相变临界速度和垫底势高度 d 的关系, 如图4所示. 从图4中我们发现两个相变临界速度随垫底势高度的增加而增大, 也就是说垫底势高度会影响一维原子链中3个相变区域的变化.

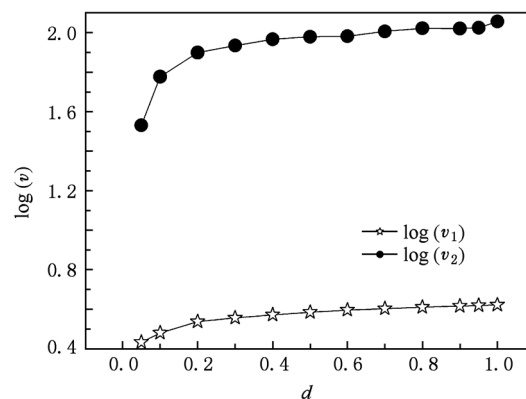


图4 $N = 10$ 时, 两个相变临界速度与垫底势高度 d 的关系

4. 结 论

以上研究表明: 1) 一维原子链的运动状态对其边界原子的初始速度具有较强的敏感性. 根据边界原子的初始速度对原子链运动状态的影响程度, 我们将原子链的运动状态分为3个相变区域, 它们分别是振荡区 ($v < v_1$)、混沌区 ($v_1 < v < v_2$) 和均匀区 ($v > v_2$); 2) 外参数 (如原子数目 N 和垫底势的高度 d) 会使得两个相变临界速度发生变化, 进而影响一维原子链的运动状态.

[1] Xu H B, Xu A G, Wang G R, Chen S G 2000 *Chin. Phys.* **9** 0611
 [2] Hu B, Yang L 2005 *Chaos* **15** 015119
 [3] Vanossi A, Roder J, Bishop A R, Bortolani V 2003 *Phys. Rev. E* **67** 016605
 [4] Vanossi A, Franchini A, Bortolani V 2002 *Surf. Sci.* **502**—**503** 437
 [5] Li H B, Zhao H, Wang Y H 2002 *Phys. Lett. A* **298** 361

[6] Tekic J, Braun O M, Hu B 2005 *Phys. Rev. E* **71** 026104
 [7] Braun O M, Zhang H, Hu B, Tekic J 2003 *Phys. Rev. E* **67** 066602
 [8] Braun O M, Bishop A R, Roder J 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 3692
 [9] Vanossi A, Manini N, Divitini G, Santoro G E, Tosatti E 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 056101
 [10] Wang C L, Duan W S, Hong X R, Chen J M 2008 *Appl. Phys.*

- Lett.* **93** 153116
- [11] Li X L, Liu F, Lin M M, Chen J M, Duan W S 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 2589 (in Chinese) [李晓礼、刘 锋、林麦麦、陈建敏、段文山 2010 物理学报 **59** 2589]
- [12] Boyce J B, Huberman B A 1979 *Phys. Rep.* **51** 189
- [13] Paneth H R 1950 *Phys. Rev.* **80** 708
- [14] Blatter G 1994 *Rev. Mod. Phys.* **66** 1125
- [15] Higgins M J, Bhattacharya S 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 3029
- [16] Gruner G 1988 *Rev. Mod. Phys.* **60** 1129
- [17] Reichhardt C, Olson Reichhardt C J 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 108301
- [18] Shao Z G, Yang L, Zhong W R, He D H, Hu B 2008 *Phys. Rev. E* **78** 061130
- [19] Bak P 1982 *Rep. Prog. Phys.* **45** 587
- [20] Reichhardt C, Olson C J, Grønbech-Jensen N, Nori F 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 4354
- [21] Middleton A A, Wingreen N S 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 3198
- [22] Reichhardt C, Olson Reichhardt C J 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 046802
- [23] Qian L M, Luo J B, Wen S Z, Xiao X D 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 2240 (in Chinese) [钱林茂、雒建斌、温诗铸、萧旭东 2000 物理学报 **49** 2240]
- [24] Thorne R E, Hubacek J S, Lyons W G, Lyding J W, Tucker J R 1988 *Phys. Rev. B* **37** 10055
- [25] Thorne R E, Lyons W G, Lyding J W, Tucker J R, Bardeen J 1987 *Phys. Rev. B* **35** 6348
- [26] Thorne R E, Lyons W G, Lyding J W, Tucker J R, Bardeen J 1987 *Phys. Rev. B* **35** 6360
- [27] Thorne R E, Tucker J R, Bardeen J 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 828
- [28] Thorne R E, Tucker J R, Bardeen J, Brown S E, Grüner G 1986 *Phys. Rev. B* **33** 7342
- [29] Kriza G, Quirion G, Traetteberg O, Kang W, Jérôme D 1991 *Phys. Rev. Lett.* **66** 1922
- [30] Li B, Lan J H, Wang L 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 104302
- [31] Zheng Z G, Hu B, Hu G 1998 *Phys. Rev. B* **58** 5453

Phase transition of atomic chain in the one-dimensional Frenkel-Kontorova model*

Han Xiu-Qin¹⁾ Jiang Hong¹⁾ Shi Yu-Ren¹⁾ Liu Yan-Xiu¹⁾ Sun Jian-Hua¹⁾ Chen Jian-Min²⁾ Duan Wen-Shan^{1)†}

¹⁾(College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China)

²⁾(State Key Laboratory of Solid Lubrication, Lanzhou Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Science, Lanzhou 730000, China)

(Received 29 October 2010; revised manuscript received 4 March 2011)

Abstract

The effect of the initial velocity of boundary atom on the motion of an atomic chain is studied by the one-dimensional Frenkel-Kontorova model. The obtained results show that the three phases could be observed in our simulation, these being harmonic phase when $v < v_1$, chaotic phase when $v_1 < v < v_2$ and uniformity phase when $v > v_2$. It is also shown that the two critical velocities (v_1, v_2) are strongly influenced by the number of atoms and the depth of the substrate potential.

Keywords: Frenkel-Kontorova model, phase transitions

PACS: 68.35.Rh, 05.45.Pq, 05.45.-a

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10875098) and the Scientific and Technical Innovation Foundation of Northwest Normal University, China (Grant No. NWNU-KJCXGC-03-48).

† Corresponding author. E-mail: duanws@nwnu.edu.cn