

不变本征算符方法求解含不同在位势的一维双原子链的色散关系

任益充[†] 范洪义

(中国科学技术大学, 材料科学与工程系, 合肥 230026)

(2013年3月12日收到; 2013年4月1日收到修改稿)

本文运用全量子化的不变本征算符方法, 求解了含有不同简谐在位势的一维双原子链模型, 得到其色散关系并讨论了不同在位势系数之比和力常数对于色散关系高频支和低频支的影响, 分析发现在位势的存在使得低频支和低频支的频谱都有一定程度的抬高; 在一定的条件下, 布里渊区边界的高频支与低频支存在交点, 意味着在某些在位势下, 高频支与低频支的频隙为零.

关键词: 在位势, 一维双原子链, 不变本征算符方法, 色散关系

PACS: 63.70.+h, 87.10.Hk, 63.10.+a

DOI: 10.7498/aps.62.156301

1 引言

晶格振动是晶体中的原子在作集体的振动, 振动的传播表现为格波. 传统的求解方法是以牛顿方程为基础, 写出晶格的振动方程, 而后设其有行波解和周期性条件代入求解即可得出其色散关系, 但其本质上晶格振动方程仍然是经典的而非量子的, 且求解复杂有相当的局限性. 不变本征算符方法 (Invariant Eigen-Operator method, IEO)^[1] 是从 Heisenberg 思想出发, 关注能级的间隙, 同时结合 Schrodinger 算符的物理意义, 把本征态的思想推广到不变本征算符的概念, 从而使 Heisenberg 方程的用途更加广泛, 借助不变本征算符方法, 利用 Heisenberg 方程, 无需涉及系统的具体量子态和波函数, 就可以简介方便地得到量子系统的能量本征值信息.

原子链中的原子不但存在相互作用势能, 同时可能存在与邻近原子无关的在位 (on-site) 势能^[2]. 近年来随着生物神经信号传输、聚合物中能量输运、约瑟夫森结阵列等方面的研究, 作为神经、聚合物、约瑟夫森结阵列等一维基本模型的一维原

子链的研究得到拓展, 特别是具有在位势的一维 Klein-Gordon 双原子链^[3] 和 β -FPU 双原子链^[4] 备受关注, 这些非线性双原子链具有二次 (简谐) 和四次 (非简谐) 在位势, 晶格振动在频隙中产生呼吸子^[5], 即空间局域的时间周期振动.

在位势对晶格振动色散关系的影响同样引起了人们的极大关注, 例如, 2006年田强等人^[6] 研究了在位势对于一维双原子链长声学波的影响, 发现在位势使色散关系声频支在布里渊区中心的振动频率不再为零, 并且随在位势的增大而增大; 2009年潘雪琴等人^[7] 研究了具有在位势的一维双原子链的低频支长波振动图像, 发现原胞中两种院子的振幅不再一致, 低频支长波膜不再是原胞质心的运动. 然而, 具有不同在位势系数的双原子链的色散关系目前尚无相关研究, 本文将采取全量子化的不变本征算符方法来求解含有简谐在位势的一维双原子链, 并分析研究在位势系数和力常数等参数对晶格振动色散关系的影响.

2 不变本征算符方法的引入^[1]

不变本征算符的思想来源于最基本的

[†] 通讯作者. E-mail: ryeh@mail.ustc.edu.cn

Schrödinger 方程和 Heisenberg 方程, 众所周知 Schrödinger 方程

$$i \frac{d}{dt} \psi = H \psi \quad (1)$$

对于不含时的哈密顿量 H ($\frac{\partial H}{\partial t} = 0$), 其定态 Schrödinger 方程为 $H \psi = E \psi$. 当转到 Heisenberg 绘景时, 力学量算符 \hat{O}_e 的随时间演化受 Heisenberg 方程支配

$$i \frac{d}{dt} \hat{O}_e = [\hat{O}_e, H], \quad (2)$$

若算符 \hat{O}_e 满足

$$[\hat{O}_e, H] = \lambda \hat{O}_e, \quad (3)$$

则

$$i \frac{d}{dt} \hat{O}_e = \lambda \hat{O}_e. \quad (4)$$

算符 \hat{O}_e 在 $i \frac{d}{dt}$ 的作用下是“不变量”. 这样如果算符满足 (4) 式, 则称其为系统的一个“一阶”不变本征算符. 在引入的算符本征方程中, 本征值 λ 与哈密顿量的本征能谱有密切关系, 其对应的是系统的能级之差.

假设 $\{|\phi_i\rangle\}$ 是哈密顿量 H 的本征态集构成 Hilbert 空间的完备集. $|\phi\rangle_a$ 与 $|\phi\rangle_b$ 是其中任意两个非简并本征态, 对应能量本征值分别为 E_a 和 E_b , 即

$$\begin{aligned} H|\phi\rangle_a &= E_a|\phi\rangle_a, \\ H|\phi\rangle_b &= E_b|\phi\rangle_b. \end{aligned} \quad (5)$$

再根据 (3) 式有

$$\begin{aligned} {}_a\langle\phi|[\hat{O}_e, H]|\phi\rangle_b &= {}_a\langle\phi|\hat{O}_e H - H \hat{O}_e|\phi\rangle_b \\ &= (E_a - E_b) {}_a\langle\phi|\hat{O}_e|\phi\rangle_b \\ &= \lambda {}_a\langle\phi|\hat{O}_e|\phi\rangle_b. \end{aligned} \quad (6)$$

由于 \hat{O}_e 为非零算符, 必然存在 $|\phi\rangle_a$ 与 $|\phi\rangle_b$ 使得 ${}_a\langle\phi|\hat{O}_e|\phi\rangle_b \neq 0$, 则

$$\lambda = E_a - E_b, \quad (7)$$

即 λ 代表了系统的能级差. 按照 (2) 式, 若一次微商不满足算符方程, 则做二次微商并结合 Heisenberg 方程, 若能使下式成立:

$$\left(i \frac{d}{dt}\right)^2 \hat{O}_e = [[\hat{O}_e, H], H] = \lambda \hat{O}_e, \quad (8)$$

则称 \hat{O}_e 为系统的“二阶”不变本征算符. 此时 $\sqrt{\lambda}$ 就是两个相邻能记得能隙. 用类似 (6) 式的方法

$${}_a\langle\phi|[[\hat{O}_e, H], H]|\phi\rangle_b$$

$$\begin{aligned} &= {}_a\langle\phi|\hat{O}_e H^2 - 2H \hat{O}_e H + H^2 \hat{O}_e|\phi\rangle_b \\ &= (E_a - E_b) {}_a\langle\phi|\hat{O}_e|\phi\rangle_b \\ &= \lambda {}_a\langle\phi|\hat{O}_e|\phi\rangle_b. \end{aligned} \quad (9)$$

当矩阵元 ${}_a\langle\phi|\hat{O}_e|\phi\rangle_b \neq 0$, 两个态的能量间隔为 $E_b - E_a = \sqrt{\lambda}$.

不变本征算符方法从算符入手直接关注哈密顿量的能谱, 与常规的 Schrödinger 方程方法大相径庭, 在某些复杂系统中系统的本征态难以求解, 但 IEO 方法直接求解其能量间隔有其天然的优势, 下面将以全量子花的不变本征算符方法求解含有不同简谐在位势的一维双原子链的色散关系.

3 含有不同简谐在位势的一维双原子链的色散关系

设相邻原子之间平衡距离为 a 的一维双原子链, 原子质量分别为 m_1 与 m_2 , 以算符 \hat{X}_{2n} 和 \hat{P}_{2n} 表示第 n 个原胞内质量为 m_1 的原子离开平衡位置的位移和速度, 其在位势则为 $\frac{1}{2} \eta \hat{X}_{2n}^2$. 以算符 \hat{X}_{2n+1} 和 \hat{P}_{2n} 表示第 n 个原胞内质量为 m_2 的原子离开平衡位置的位移和速度, 其在位势则分别为 $\frac{1}{2} \eta_1 \hat{X}_{2n}^2$ 和 $\frac{1}{2} \eta_2 \hat{X}_{2n+1}^2$, 在简谐近似下, 具有不同在位势的一维双原子链晶格振动哈密顿量为

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_n \left\{ \frac{\hat{P}_{2n}^2}{2m_1} + \frac{\hat{P}_{2n+1}^2}{2m_2} + \frac{1}{2} \lambda (\hat{X}_{2n} - \hat{X}_{2n+1})^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \lambda (\hat{X}_{2n+1} - \hat{X}_{2n+2})^2 + \frac{1}{2} \eta_1 \hat{X}_{2n}^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \eta_2 \hat{X}_{2n+1}^2 \right\}. \end{aligned} \quad (10)$$

计算各原子的动量算符和位置算符与哈密顿量 \hat{H} 的对易关系, 有

$$\begin{aligned} [\hat{P}_{2m}, \hat{H}] &= i \{ \lambda \hat{X}_{2m+1} + \lambda \hat{X}_{2m-1} - \hat{X}_{2m} (2\lambda + \eta_1) \}, \\ [\hat{P}_{2m+1}, \hat{H}] &= i \{ \lambda \hat{X}_{2m} + \lambda \hat{X}_{2m+2} \\ &\quad - \hat{X}_{2m+1} (2\lambda + \eta_2) \}, \end{aligned} \quad (11)$$

和

$$[\hat{X}_{2n}, \hat{H}] = \frac{i}{m_1} \hat{P}_{2n}, \quad [\hat{X}_{2n+1}, \hat{H}] = \frac{i}{m_2} \hat{P}_{2n+1}. \quad (12)$$

构造不变本征算符 \hat{F} , 令

$$\hat{F} = \sum_m (f_{2m} \hat{P}_{2m} + f_{2m+1} \hat{P}_{2m+1}), \quad (13)$$

计算 \hat{F} 与哈密顿量 \hat{H} 的对易关系, 代入 (11) 式与 (12) 式可得

$$[F, H] = \sum_m \{ i\hat{X}_{2m}[f_{2m+1}\lambda + f_{2m-1}\lambda - f_{2m}(2\lambda + \eta_1)] + i\hat{X}_{2m+1}[f_{2m}\lambda + f_{2m+2}\lambda - f_{2m+1}(2\lambda + \eta_2)] \}. \quad (14)$$

再次对易后有

$$\begin{aligned} & [[\hat{F}, \hat{H}], \hat{H}] \\ &= \sum_m \{ \hat{P}_{2m}[f_{2m}(2\lambda + \eta) - \lambda(f_{2m+1} + f_{2m-1})]/m_1 + \hat{P}_{2m+1}[f_{2m+1}(2\lambda + \eta) - \lambda(f_{2m} + f_{2m+2})]/m_2 \} \\ &= \omega^2 \sum_m (f_{2m}\hat{P}_{2m} + f_{2m+1}\hat{P}_{2m+1}). \end{aligned} \quad (15)$$

逐项比较后有

$$\begin{aligned} & f_{2m}(2\lambda + \eta_1) - \lambda(f_{2m+1} + f_{2m-1}) \\ &= f_{2m}m_1\omega^2 f_{2m+1}(2\lambda + \eta_2) - \lambda(f_{2m} + f_{2m+2}) \\ &= f_{2m+1}m_2\omega^2. \end{aligned} \quad (16)$$

ω^2 须有解存在, 所以

$$\begin{aligned} & \frac{1}{m_1} \left\{ (2\lambda + \eta_1) - \frac{\lambda(f_{2m+1} + f_{2m-1})}{f_{2m}} \right\} \\ &= \frac{1}{m_2} \left\{ (2\lambda + \eta_2) - \frac{\lambda(f_{2m} + f_{2m+2})}{f_{2m+1}} \right\}. \end{aligned} \quad (17)$$

令 $f_{2m} = \xi \cos 2m\theta$, $f_{2m+1} = \xi' \cos(2m+1)\theta$ 代入上式,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{m_1} \left\{ (2\lambda + \eta_1) - \frac{2\lambda\xi' \cos \theta}{\xi} \right\} = \omega^2, \\ & \frac{1}{m_2} \left\{ (2\lambda + \eta_2) - \frac{2\lambda\xi \cos \theta}{\xi'} \right\} = \omega^2, \end{aligned} \quad (18)$$

所以

$$\frac{\xi'}{\xi} = \frac{(2\lambda + \eta_1) - m_1\omega^2}{2\lambda \cos \theta} = \frac{2\lambda \cos \theta}{(2\lambda + \eta_2) - m_2\omega^2}. \quad (19)$$

有方程

$$\begin{aligned} & m_1m_2\omega^4 - \omega^2[(2\lambda + \eta_1)m_2 + (2\lambda + \eta_2)m_1] \\ &+ (2\lambda + \eta_1)(2\lambda + \eta_2) - 4\lambda^2 \cos^2 \theta = 0, \end{aligned} \quad (20)$$

解得

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{1}{2} \left\{ \frac{2\lambda + \eta_1}{m_1} + \frac{2\lambda + \eta_2}{m_2} \pm \left[\left(\frac{2\lambda + \eta_1}{m_1} - \frac{2\lambda + \eta_2}{m_2} \right)^2 + \frac{16\lambda^2 \cos^2 \theta}{m_1m_2} \right]^{1/2} \right\}. \quad (21)$$

若 $m_1 = m_2$ 且 $\eta_1 = \eta_2$ 即两原子完全相同时则回到文献中含有在位势的一维单原子链的情况. 另

外, 根据 (21) 式可以看出色散关系分为两支分别是高频支和低频支, 在没有在位势的情况下即为固体物理中的光学波和声学波. 因此, 在位势的存在影响着晶格振动的色散关系, 进而影响着晶格的物理特性. 下面分多种情况讨论不同在位势系数对一维双原子链的色散关系的影响.

4 一维双原子链振动色散关系

在晶格振动色散关系的研究中, 通常选取波矢在简约布里渊区, 因此下面仅考虑在简约布里渊区的色散关系图, 其他布里渊区的情况可通过对称平移而得到. 此外, 我们在作图的过程中选取 $\omega_0 = \sqrt{\lambda/m_1} = 1$ 假定两原子质量为 $m_1/m_2 = 1/4$, 这一处理对所得的结果没有影响. 图 1 中我们考虑不同在位势系数和力常数对色散关系低频支的影响, 并选取 $\eta_1/\lambda = 0.5$, 而图 2 考虑色散关系高频支在不同在位势系数和力常数下的变化规律, 这里我们以假定 $\eta_2/\eta_1 = 2$, 图 3 是在在位势系数对频隙 $\Delta\omega = \omega_+ - \omega_-$ 的影响.

从图 1 和图 2 看出两个在位势系数之比和力常数显著的影响着晶格振动的色散关系, 尤其在在位势和力常数之比中可以看出在位势的存在使色散关系 $\omega(q)$ 各处均有不同程度的升高. 现着重考察布里渊区底部和顶部的色散关系, 即 $\theta = 0$ 和 $\theta = \pi/2$ 的情况, 根据 (21) 式不难得到晶格振动声频支底为

$$\begin{aligned} \omega_{\pm}^2(0) &= \frac{1}{2m_1m_2} \left\{ m_2(2\lambda + \eta_1) + m_1(2\lambda + \eta_2) \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{[m_2(2\lambda + \eta_1) - m_1(2\lambda + \eta_2)]^2 + 16\lambda^2 m_1m_2} \right\}. \end{aligned} \quad (22)$$

显然, 若晶格中无在位势的存在, 无论两原子质量比和力常数如何变化, 低频支的长波极限 $\omega_{\pm}^2(\theta \rightarrow 0) \rightarrow 0$, 当若有在位势存在时则 $\omega_{\pm}^2(\theta \rightarrow 0) > 0$, 这是在位势存在的显著标志, 并且随着在位势和力常数之比的增大而 $\omega_{-}(0)$ 呈非线性增加. 对于低频支布里渊区顶部有

$$\begin{aligned} \omega_{\pm}^2\left(\frac{\pi}{2}\right) &= \frac{1}{2m_1m_2} \left\{ m_2(2\lambda + \eta_1) + m_1(2\lambda + \eta_2) \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{[m_2(2\lambda + \eta_1) - m_1(2\lambda + \eta_2)]^2} \right\}. \end{aligned} \quad (23)$$

由此可以看出, 它不仅与两原子的质量和力常数有关, 而且也与在位势系数之比有关, 当在位势系

数之比 (η_2/η_1) 增大时, 低频支布里渊区顶部也呈现非线性增加, 而当位势系数之比 $\eta_2/\eta_1 \rightarrow \infty$ 时, $\omega_-^2\left(\frac{\pi}{2}\right)$ 趋向于某极限值. 从整体上看, 随着位势系数与力常数之比的逐渐增大, 低频支布里渊区地部和顶部之差逐渐减小, 这是因为, 当简谐在位势不断增大, 远远大于力常数时, 一维双原子链就逐渐演化成两种独立的谐振子, 从而布里渊区底部和顶部趋于一致.

对于晶格振动的高频支, 同样研究其布里渊区底部和顶部. 在长波极限下, 有

$$\omega_+^2(0) = \frac{1}{2m_1m_2} \left\{ m_2(2\lambda + \eta_1) + m_1(2\lambda + \eta_2) + \sqrt{[m_2(2\lambda + \eta_1) - m_1(2\lambda + \eta_2)]^2 + 16\lambda^2 m_1 m_2} \right\}. \quad (24)$$

可以看出, 在位势的存在引起了高频支顶 $\omega_+(0)$ 的显著升高; 而不同在位势系数之对其变化规律影响是: 当 η_2/η_1 增大时 $\omega_+(0)$ 显著增大, 反之则趋于

一常数. 在布里渊区的边界 ($q \rightarrow \frac{\pi}{2}$), 格波频率为

$$\omega_{\pm}^2\left(\frac{\pi}{2}\right) = \frac{1}{2m_1m_2} \left\{ m_2(2\lambda + \eta_1) + m_1(2\lambda + \eta_2) \pm \sqrt{[m_2(2\lambda + \eta_1) - m_1(2\lambda + \eta_2)]^2} \right\}.$$

这表明在位势使得晶格振动频隙变宽, 同时由图 2 不难看出, 对于高频支, 其最大值与最小值均随在位势的增加而增加, 但最大值与最小值之差却随在位势增加而减小.

最后, 考察整个布里渊区的色散关系, 不难发现, 晶格的色散关系与布里渊区底部和顶部的变化规律相同, 而且随着在位势的增大, 色散关系受布里渊区的影响越来越小, 布里渊区中心和边界逐渐趋向一致, 而有图 3 可以发现, 高频支与低频支的频隙间隔 $\Delta\omega$ 随着在位势的增加先减小后增加, 且由 (21) 式可知 $\frac{2\lambda + \eta_1}{m_1} = \frac{2\lambda + \eta_2}{m_2}$ 时在布里渊区边界有 $\Delta\omega = 0$ 存在, 这意味着高频支与低频支在布里渊区底部有交点存在, 这是常规的晶格振动所没有的.

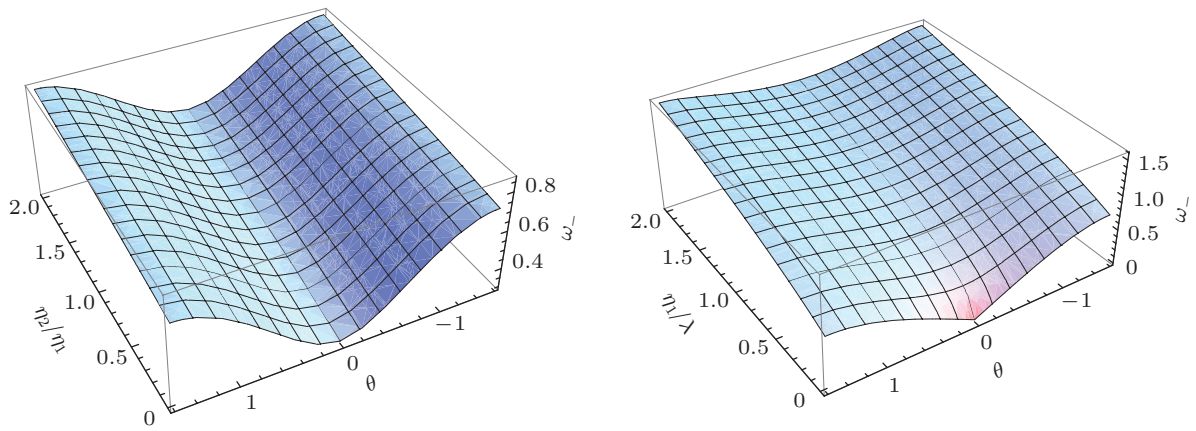


图 1 在位势和力常数对色散关系低频支的影响

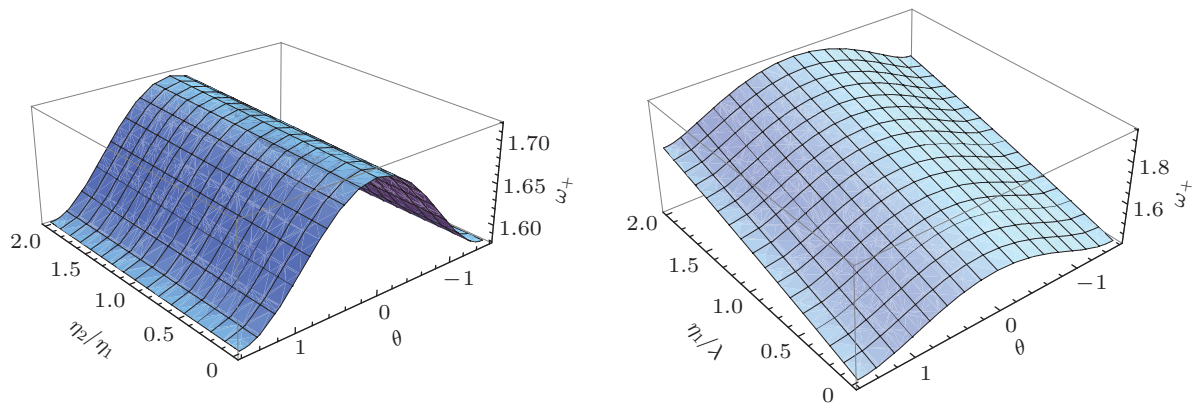


图 2 在位势和力常数对色散关系高频支的影响

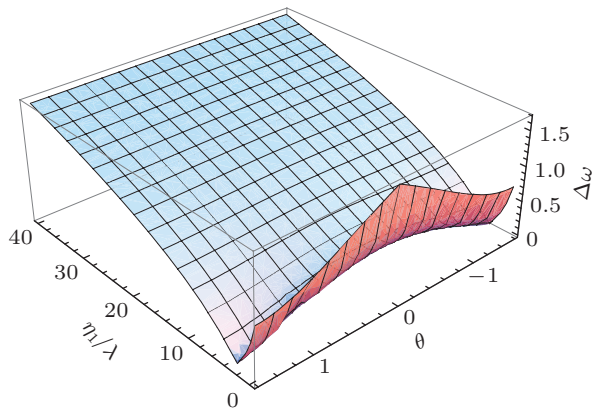


图3 在位势对频隙间隔的影响

5 结论

在固体物理学有关晶格振动的常规教学和

科研中,一般只考虑原子间的相互作用势能,然而当原子处于特定的介质或场中时,原子链还存在与邻近原子无关的在位势,对于不同的原子,其在位势系数也不同.本文采用不同于经典格波法的 IEO 方法研究了含有不同简谐在位势的一维双原子链的色散关系,并分析了不同在位势系数之比以及和力常数之比对于色散关系的影响.发现: 1) 在位势使得 $\omega_-(0) \neq 0$, 出现了能隙且该能隙随着在位势的增大而非线性增大. 2) 随着在位势的增大,色散关系受布里渊区的影响变小,当在位势足够大时 $\omega_{\pm}(\theta)$ 几乎不随 θ 的改变而变化,这时的原子链近似于谐振子. 3) 随着在位势的变化若 $\frac{2\lambda + \eta_1}{m_1} = \frac{2\lambda + \eta_2}{m_2}$, 则在布里渊区边界处 $\Delta\omega = 0$ 即高频支与低频支相交,此时 $\omega_+(\pm\frac{\pi}{2}) = \omega_-(\pm\frac{\pi}{2})$, 这是以往的文献所未提及的,其物理应用尚有待于实验上的进一步探索.

- [1] Fan H Y, Li C 2004 *Phys. Lett. A* **321** 75
 [2] Gorbach A V, Johansson M 2003 *Phys. Rev. E* **67** 066608
 [3] Zhou Q, Lü B B, Tian Q 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 0411 (in Chinese) [周倩, 吕彬彬, 田强 2009 物理学报 **58** 0411]
 [4] Maniadis P, Zolotaryuk A V, Tsironis G P 2003 *Phys. Rev. E* **67** 046612
 [5] 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]
 [6] Tian Q, Hong F N 2006 *College Physics* **25**(4) 17 (in Chinese) [田强, 洪馥男 2006 大学物理 **25**(4) 17]
 [7] Pan X Q, Liu B C, Tian Q 2009 *College Physics* **28**(5) 11 (in Chinese) [潘学琴, 刘炳灿, 田强 2009 大学物理 **28**(5) 11]

Solving dispersion relations of one-dimensional diatomic chain with on-site potential by invariant eigen-operator method

Ren Yi-Chong[†] Fan Hong-Yi

(*Department of Materials Science and Engineering, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China*)

(Received 12 March 2013; revised manuscript received 1 April 2013)

Abstract

The dispersion law of a one-dimensional diatomic lattice with on-site potential cross on its dispersion relation is solved under the harmonic approximation with quantized invariant eigen-operator method (IEO) and the influences of on-site potential and force constant are discussed. It is shown that due to the existence of on-site potential the lattice vibration spectra induced are shifted. Under certain conditions, the point of intersection exist between optical branch and acoustic branch in the boundary of Brillouin zone, which means the frequency gap between optical branch and acoustic branch is zero.

Keywords: on-site potential, one-dimensional diatomic lattice, invariant eigen-operator method, dispersion law

PACS: 63.70.+h, 87.10.Hk, 63.10.+a

DOI: 10.7498/aps.62.156301

[†] Corresponding author. E-mail: rych@mail.ustc.edu.cn