

耦合Frenkel-Kontorova双链的格波解及其色散关系

苏瑞霞 黄霞 郑志刚

Lattice wave solution and its dispersion relation of two coupled Frenkel-Kontorova chains

Su Rui-Xia Huang Xia Zheng Zhi-Gang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 154401 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20212362

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212362>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

随机激励下Frenkel-Kontorova模型的纳米摩擦现象

Nano-friction phenomena in driven Frenkel-Kontorova model with stochastic excitation

物理学报. 2021, 70(9): 090501 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201254>

螺旋波等离子体中螺旋波与Trivelpiece-Gould波模式耦合及线性能量沉积特性参量分析

Parametric analysis of mode coupling and liner energy deposition properties of helicon and Trivelpiece-Gould waves in helicon plasma

物理学报. 2020, 69(11): 115201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200062>

耦合双泡声空化特性的理论研究

Theoretical study of coupling double-bubbles ultrasonic cavitation characteristics

物理学报. 2018, 67(3): 037802 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20171805>

电子温度对螺旋波等离子体中电磁模式能量沉积特性的影响

Effects of electron temperature on energy deposition properties of electromagnetic modes propagating in helicon plasma

物理学报. 2020, 69(21): 215201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20201018>

强碰撞磁化尘埃等离子体中的漂移波

Drift wave in strong collisional dusty magnetoplasma

物理学报. 2020, 69(17): 175201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200468>

双旋光双反射结构的温度-辐射自稳定性原理和实验研究

Principle and experimental study of self-stability of reflector based on two magneto-optical crystals and two mirrors under effect of temperature and radiation

物理学报. 2019, 68(16): 164202 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190429>

耦合 Frenkel-Kontorova 双链的格波解及其色散关系*

苏瑞霞¹⁾ 黄霞²⁾ 郑志刚^{3)†}

1) (中国矿业大学(北京)理学院物理系, 北京 100083)

2) (华北电力大学数理学院, 北京 102206)

3) (华侨大学信息科学与工程学院, 厦门 361021)

(2021 年 12 月 22 日收到; 2022 年 3 月 16 日收到修改稿)

求解了两条相同的耦合 Frenkel-Kontorova (FK) 链在低温、有限温和高温情况下的格波解及色散关系, 进而研究了耦合 FK 双链的晶格振动特点. 结果表明, 耦合 FK 双链的色散关系包含一个声学支和一个光学支, 两者的频谱范围和频率禁带与 FK 链的恢复力系数、链间耦合强度系数均有关联, 低温和有限温的情况还与外势深度有关系. 并且研究发现当链间耦合强度较小时, 不存在频率禁带; 当链间耦合强度逐渐增加到某一临界值后, 频率禁带出现, 且随着链间耦合强度增加, 频隙不断变大, 这是因为光学支随着链间耦合强度增加不断向高频方向移动. 此外, 还发现带隙结构出现的临界链间耦合强度始终为 FK 链恢复力系数的 2 倍, 并不受温度的影响. 本文还研究了给定链间耦合强度下温度对耦合 FK 双链色散关系的影响规律. 本研究内容可为分析链间界面耦合和温度对晶格的振动特点和物理性质的影响提供理论依据, 从而对于能量输运、热调控等实际应用发挥重要的指导作用.

关键词: 耦合 Frenkel-Kontorova 双链, 链间耦合, 色散关系, 温度, 热传导

PACS: 44.10.+i, 05.45.-a, 63.20.-e, 63.20.D-

DOI: 10.7498/aps.71.20212362

1 引言

目前中国芯片虽已步入世界领先, 但仍存在芯片散热等卡脖子问题^[1-4]. 而解决这些问题的关键步骤一定会涉及到固体中的热传导问题和高性能导热材料. 对于固体中的热传导可以分为电子导热和晶格导热. 对于非金属和一般半导体结构中的热传导主要是晶格的导热, 其来源于晶格振动的格波. 格波是固体物理中典型的集体激发, 它代表系统内所有原子在各自的平衡位置附近振动的一种集体模式. 在简谐近似下格波是相互独立的, 声子

是指格波的量子. 一个格波, 即一种振动模, 称为一个声子模式. 它是晶格原子集体运动状态的激发单元, 因此系统一般状态可看作是这些独立的基本激发单元(声子)的集合. 引入声子概念后, N 个原子的耦合振荡问题在简谐近似下就被约化为无相互作用的理想声子气体来进行理论分析和处理, 由此可以很好地解释晶体热力学性质的微观机制.

最早物理学家们以一维单原子链为固体材料的简化模型, 在简谐近似下研究了一维单原子链的格波理论及色散关系^[5,6]. 考虑到实际固体往往是非线性的, 需加入非线性作用, 而非线性作用的出现使得声子与声子相互作用, 导致色散关系在一般

* 国家自然科学基金(批准号: 51706118, 11875135)、中央高校基本科研业务费专项资金(批准号: 2022YQLX03, 2019QS05)和泉州市科技计划(批准号: 2018C085R)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zgzheng@hqu.edu.cn

情况下很难解析求解. 有些情况温度比较低时, 可将系统的非线性项看作是一个小的微扰, 运用标准力矩阵扰动法可以解析得到色散关系^[7]; 而温度比较高时, 小的非线性微扰近似已不再成立. 近些年来研究学者们提出了声子谱能量密度 (spectral energy density, SED) 方法^[8–10] 和有效声子理论 (effective phonon theory, EPT)^[11–13] 来预测非线性系统的色散关系. 这两种方法在高温下也可以准确地预测非线性系统的色散关系. 但值得注意的是, 上述预测色散关系的理论大多适用于独立的固体结构和独立的晶格链模型. 但在实际应用中, 固体材料往往不是孤立存在的, 最常见的为耦合式结构, 例如广泛应用于芯片散热、航空航天等领域的碳纳米管阵列^[14–17] 和多层石墨烯^[18–22] 等纳米材料. 耦合式的结构会导致界面的出现, 这时除了非线性导致的声子与声子相互作用, 还会出现声子与界面的作用, 从而影响到系统的色散关系. 目前关于这方面的研究还十分匮乏, 因此非常有必要研究耦合系统的格波理论及色散关系.

本文选取耦合 Frenkel-Kontorova (FK) 双链模型来研究耦合系统的格波理论. FK 模型是在 1938 年由 Frenkel 和 Kontorovaza^[23] 两位物理学家在研究晶体位错运动时首次提出. 此模型形式简单, 是一个置于外部周期势场中和最近邻粒子间存在简谐相互作用的原子链模型. 它可以很好地描述广泛的非线性物理现象, 例如电荷密度波的传播、在晶格表面原子吸附层的动力学, 以及磁有序结构中的磁畴壁等; 在凝聚态物理和统计物理研究中也广泛地被用来模拟系统的热传导及声子输运过程. 因此我们采用耦合 FK 双链模型. 本文主要计算了在低温小振动近似、有限温、高温近似情况下耦合 FK 双链的格波解及色散关系. 具体讨论了色散关系曲线的分布情况、频谱范围和带隙结构的影响因素等. 并且给出了温度对耦合 FK 双链色散关系的影响规律. 研究结果可为分析链间界面耦合对晶格的振动特点和物理性质的影响提供理论依据.

2 耦合 FK 双链的色散关系

2.1 耦合 FK 双链模型

考虑两条相同的耦合 FK 链模型 (如图 1 所示), 选取最简单的链间耦合作用, 即链 1 与链 2 通过简谐耦合作用相连接, 耦合强度为 k_c . 为计算方便,

取两条 FK 链的原子质量相同均为 m . $u_{n,j}$ 表示链 n ($n = 1, 2$) 中第 j 个粒子偏离平衡位置的位移. 假设每条链中相邻原子之间的平衡距离为 a , 两条链当中的第 j 个粒子对为一个原胞, 所以原胞的大小为 a .

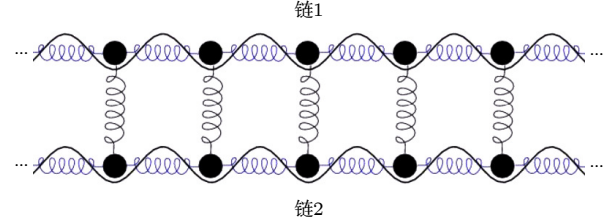


图 1 耦合 FK 双链模型示意图

Fig. 1. Schematics of the coupled FK chains model.

2.2 低温近似下耦合 FK 双链的色散关系

2.2.1 色散关系计算方法

FK 链中相邻原子间的相互作用力是线性恢复力, 设恢复力常数为 k_n ($n = 1, 2$), 外势 $U_n(u_{n,j}) = -V_{\text{sub},n}(2\pi)^{-2} \cos(2\pi u_{n,j})$, $V_{\text{sub},n}$ 为链 n 的外势深度. 则耦合 FK 双链中第 j 个原胞内两个原子的运动方程为

$$\begin{aligned} m\ddot{u}_{1,j} &= k_1(u_{1,j+1} + u_{1,j-1} - 2u_{1,j}) \\ &\quad - \frac{V_{\text{sub},1}}{2\pi} \sin 2\pi u_{1,j} + k_c(u_{2,j} - u_{1,j}), \\ m\ddot{u}_{2,j} &= k_2(u_{2,j+1} + u_{2,j-1} - 2u_{2,j}) \\ &\quad - \frac{V_{\text{sub},2}}{2\pi} \sin 2\pi u_{2,j} - k_c(u_{2,j} - u_{1,j}). \end{aligned} \quad (1)$$

(1) 式很难解析求解, 在低温情况下, 原子的动能较小, 其活动范围主要限制在 FK 链外势的势阱中. 因此, 在低温小振动近似下, 耦合系统相应的运动方程可以写为

$$\begin{aligned} m\ddot{u}_{1,j} &= k_1(u_{1,j+1} + u_{1,j-1} - 2u_{1,j}) \\ &\quad - V_{\text{sub},1}u_{1,j} + k_c(u_{2,j} - u_{1,j}), \\ m\ddot{u}_{2,j} &= k_2(u_{2,j+1} + u_{2,j-1} - 2u_{2,j}) \\ &\quad - V_{\text{sub},2}u_{2,j} - k_c(u_{2,j} - u_{1,j}). \end{aligned} \quad (2)$$

设该方程组有行波解:

$$\begin{aligned} u_{1,j} &= A_1 e^{i(\omega t - qja)}, \\ u_{2,j} &= A_2 e^{i(\omega t - qja)}. \end{aligned} \quad (3)$$

其中, a 为每条链中相邻原子之间的平衡距离, ω 为频率, q 为波数. 将 (3) 式代入 (2) 式中可以得到

关于振幅 A_1 和 A_2 的方程组:

$$\begin{aligned} (-m\omega^2 - 2k_1 \cos aq + 2k_1 + k_c + V_{\text{sub},1})A_1 - k_c A_2 &= 0, \\ (-m\omega^2 - 2k_2 \cos aq + 2k_2 + k_c + V_{\text{sub},2})A_2 - k_c A_1 &= 0. \end{aligned} \quad (4)$$

方程组 (4) 式有非零解的条件是其系数矩阵的行列式等于零, 即

$$\begin{vmatrix} D_1 & -k_c \\ -k_c & D_2 \end{vmatrix} = 0. \quad (5)$$

这里令

$$\begin{aligned} D_1 &= -m\omega^2 - 2k_1 \cos aq + 2k_1 + k_c + V_{\text{sub},1}, \\ D_2 &= -m\omega^2 - 2k_2 \cos aq + 2k_2 + k_c + V_{\text{sub},2}. \end{aligned} \quad (6)$$

由此可得

$$D_1 \times D_2 - k_c^2 = 0, \quad (7)$$

这是关于 ω^2 的一元二次方程, 取相同的外势深度并令 $V_{\text{sub},1} = V_{\text{sub},2} = V$ 求解 (7) 式可得

$$\begin{aligned} \omega_{\pm}^2 &= \frac{1}{m} \left[2(k_1 + k_2) \sin^2 \frac{aq}{2} + k_c + V \right] \\ &\pm \frac{1}{m} \sqrt{4(k_1 - k_2)^2 \sin^4 \frac{aq}{2} + k_c^2}. \end{aligned} \quad (8)$$

因为两条 FK 链相同, 所以 $k_1 = k_2$, 可以得到

$$\begin{aligned} \omega_-^2 &= \frac{1}{m} \left(4k_1 \sin^2 \frac{aq}{2} + V \right), \\ \omega_+^2 &= \frac{1}{m} \left(4k_1 \sin^2 \frac{aq}{2} + 2k_c + V \right). \end{aligned} \quad (9)$$

2.2.2 色散关系结果分析

(9) 式给出了两条相同的耦合 FK 链系统在低温小振动近似下的色散关系. 可以发现声学波的色散关系 (ω_-) 始终与单条 FK 链结果^[24] 完全相同, 并不随链间耦合作用而发生变化; 而光学波的色散关系 (ω_+) 随链间耦合作用增强向高频方向移动. 这是因为对于声学支 ω_- , 第 j 个原胞中的粒子对在做同向运动, 运动完全一致, 像一个刚体一样整体地振动, 因此对应的色散关系与单条 FK 链结果完全相同. 但值得注意的是这里只是色散关系表现形式与单链相同, 仍然是两条链所有原子集体运动的结果. 对于光学支 ω_+ , 第 j 个原胞中的粒子对在做相对振动, 运动完全相反, 运动中保持它们的质心不变, 对应的光学支会受到链间耦合强度的调制. 由 (9) 式的色散关系可以发现, 声学支和光学支的频谱范围 $\Delta\omega_-$ 、 $\Delta\omega_+$ 和频率禁带 $\Delta\omega'$ 与 FK 链的

恢复力系数、外势深度以及链间耦合强度系数均有关联.

现对 (9) 式得到的 ω_+ 和 ω_- 进行数值拟合, 得色散关系曲线如图 2 ($k_1 = k_2 = 1$, $V = 1$, $m = 1$) 所示. 图 2 呈现了不同链间耦合强度 k_c 下的色散关系, 可以看到频率禁带的存在与否取决于链间耦合强度的大小. 当链间耦合强度较小时, 不存在频率禁带 (见图 2(a)), 但光学支位置随着链间耦合强度的增加不断明显升高; 当链间耦合强度增加到某一临界值后, 频率禁带将出现 (见图 2(b)), 并随着链间耦合强度增加, 频隙不断变大 (见图 2(c)). 通过以下计算, 可以得到频隙为 0 的临界链间耦合强度. 令

$$\Delta\omega = \omega_+(0) - \omega_-(\pi/a) = 0. \quad (10)$$

由 (9) 式得

$$\omega_+(0) = \sqrt{(2k_c + V)/m}, \quad (11)$$

$$\omega_-(\pi/a) = \sqrt{(4k_1 + V)/m}. \quad (12)$$

将 (11) 式和 (12) 式代入 (10) 式计算可得

$$k_c = 2k_1. \quad (13)$$

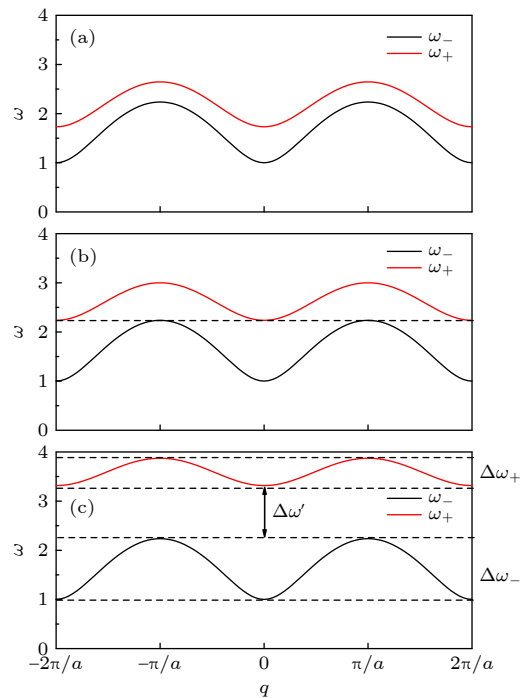


图 2 耦合 FK 双链在低温小振动近似情况下的色散关系 ($k_1 = k_2 = 1$, $V = 1$, $m = 1$) (a) $k_c = 1$; (b) $k_c = 2$; (c) $k_c = 5$

Fig. 2. Dispersion relationship of the coupled FK chains under low temperature approximation with small vibration ($k_1 = k_2 = 1$, $V = 1$, $m = 1$): (a) $k_c = 1$; (b) $k_c = 2$; (c) $k_c = 5$.

由以上计算结果可知, 两条相同耦合 FK 链系统在低温下的临界链间耦合强度为 FK 链恢复力系数的 2 倍, 与外势深度无关. 取 $k_1 = k_2 = 1$, 可得临界链间耦合强度 $k_c = 2$, 与图 2(b) 数值计算结果一致.

2.3 有限温度下耦合 FK 双链的色散关系

2.3.1 色散关系计算方法

第 2.2 节考虑的是耦合 FK 双链模型在低温小振动近似下的情况, 外势泰勒展开的高阶项可以忽略, 而在有限温度, 即温度并不是很低的情况下, 这样的近似是不合理的. 这时需要借助耦合系统的 EPT^[25] 来具体讨论耦合 FK 双链的色散关系及链间耦合对此耦合系统色散关系的影响.

首先给出两条相同的耦合非线性链模型的哈密顿量:

$$H_n = \sum_{j=1}^N \left[\frac{p_{n,j}^2}{2m_n} + V_n(u_{n,j} - u_{n,j-1}) + U_n(u_{n,j}) \right],$$

$$n = 1, 2, \quad H_c = V_{12}(u_{1,j} - u_{2,j}), \quad (14)$$

这里 H_1 , H_2 和 H_c 分别表示链 1、链 2 和耦合项的哈密顿量. $u_{n,j}$ 仍然表示链 n ($n = 1, 2$) 中第 j 个粒子偏离平衡位置的位移, $p_{n,j}$ 是此粒子的动量. N 表示链长, m_n 是每条链粒子的质量 (为方便, 设所

有的粒子质量 $m_n = 1$). 为了不失一般性, 链内相邻粒子相互作用势 $V_n(u_{n,j} - u_{n,j-1})$ 、外势 $U_n(u_{n,j})$ 和链间相互作用势 $V_{12}(u_{1,j} - u_{2,j})$ 的表达式为

$$V_n(u_{n,j} - u_{n,j-1}) = \sum_{s=2}^{\infty} g_s \frac{(u_{n,j} - u_{n,j-1})^s}{s}, \quad (15)$$

$$U_n(u_{n,j}) = \sum_{s=2}^{\infty} \sigma_s \frac{u_{n,j}^s}{s}, \quad (16)$$

$$V_{12}(u_{1,j} - u_{2,j}) = \sum_{s=2}^{\infty} l_s \frac{(u_{1,j} - u_{2,j})^s}{s}. \quad (17)$$

其中, g_s 为链内相邻粒子相互作用强度, σ_s 为外势作用强度, l_s 为链间相互作用强度, $s = 2, 3, 4, \dots$. 根据耦合非线性双链的 EPT^[25], 其重整化声子谱的解析表达式为

$$\omega_{n,k,+}^2 = \alpha_n(\omega_k^2 + \gamma_{n,+}),$$

$$\omega_{n,k,-}^2 = \alpha_n(\omega_k^2 + \gamma_{n,-}), \quad (18)$$

其中, $\omega_{n,k,+}$ 为耦合系统声子谱的光学支, $\omega_{n,k,-}$ 为声学支; $\omega_k = 2 \sin(k/2)$ 是单条简谐链的声子谱 (这里 $k = aq$). 重整化的参数 α_n , $\gamma_{n,+}$ 和 $\gamma_{n,-}$ 为

$$\alpha_n = \frac{\sum_{s=2}^{\infty} g_s \left[\sum_{j=1}^N (u_{n,j} - u_{n,j-1})^s \right]}{\sum_{j=1}^N (u_{n,j} - u_{n,j-1})^2}; \quad (19)$$

$$\gamma_{n,+} = \frac{1}{\alpha_n} \left\{ \frac{\sum_{s=2}^{\infty} \sigma_s \left(\sum_{j=1}^N u_{n,j}^s \right)}{\sum_{j=1}^N u_{n,j}^2} \pm \frac{\sum_{s=2}^{\infty} l_s \left[\sum_{j=1}^N (u_{1,j} - u_{2,j})^s \right]}{\left[\sum_{j=1}^N (u_{1,j} - u_{2,j}) u_{n,j} \right]} \right\}, \quad (20)$$

其中, 对于链 1 ($n = 1$) 取“+”, 对于链 2 ($n = 2$) 取“-”;

$$\gamma_{n,-} = \frac{1}{\alpha_n} \left[\frac{\sum_{s=2}^{\infty} \sigma_s \left(\sum_{j=1}^N u_{n,j}^s \right)}{\sum_{j=1}^N u_{n,j}^2} \right]. \quad (21)$$

上述理论给出的是一般的两条相同耦合非线性链模型的有效声子谱. 对于两条相同的耦合 FK 链模型 (链间耦合作用仍然通过简谐耦合作用相连接), 表达式为

$$V_n(u_{n,j} - u_{n,j-1}) = \frac{k_1(u_{n,j} - u_{n,j-1})^2}{2}, \quad (22)$$

$$U_n(u_{n,j}) = -\frac{V}{(2\pi)^2} \cos(2\pi u_{n,j}), \quad (23)$$

$$V_{12}(u_{1,j} - u_{2,j}) = \frac{k_c(u_{1,j} - u_{2,j})^2}{2}. \quad (24)$$

在有限温度下, 粒子在外势中振动还不太剧烈, 振动较小, 可以对外势 $U_n(u_{n,j})$ 进行泰勒展开, 从而得到耦合 FK 双链模型的重整化的参数 α_n , $\gamma_{n,-}$ 和 $\gamma_{n,+}$ 为

$$\alpha_n = k_1; \quad (25)$$

$$\gamma_{n,-} = \frac{1}{\alpha_n} \left[\frac{\sum_{s=2}^{\infty} \sigma_s \left(\sum_{j=1}^N u_{n,j}^s \right)}{\sum_{j=1}^N u_{n,j}^2} \right], \quad (26)$$

其中 $\sigma_s = (-1)^{s/2+1} V \frac{(2\pi)^{s-2}}{(s-1)!}$ (s 是偶数);

$$\gamma_{n,+} = \gamma_{n,-} \pm \frac{1}{\alpha_n} \left\{ \frac{k_c \left[\sum_{j=1}^N (u_{1,j} - u_{2,j})^2 \right]}{\left[\sum_{j=1}^N (u_{1,j} - u_{2,j}) u_{n,j} \right]} \right\}, \quad (27)$$

其中, 对于链 1 ($n=1$) 取“+”, 对于链 2 ($n=2$) 取“-”.

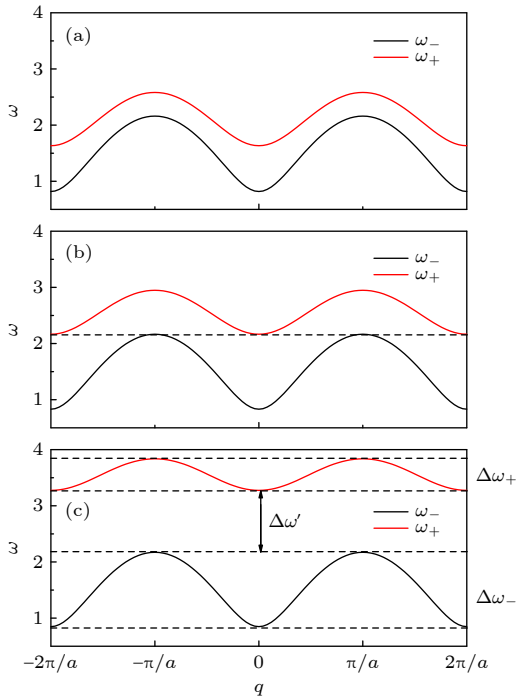


图 3 耦合 FK 双链 ($k_1 = k_2 = 1$, $V = 1$, $m = 1$) 在有限温度 ($T = 0.05$) 下的色散关系 (a) $k_c = 1$; (b) $k_c = 2$; (c) $k_c = 5$

Fig. 3. Dispersion relationship of the coupled FK chains ($k_1 = k_2 = 1$, $V = 1$, $m = 1$) under finite temperature ($T = 0.05$): (a) $k_c = 1$; (b) $k_c = 2$; (c) $k_c = 5$.

2.3.2 色散关系结果分析

对 2.3.1 节的 EPT 计算结果进行数值拟合, 温度 $T = 0.05$ 时的耦合 FK 双链 ($k_1 = k_2 = 1$, $V = 1$, $m = 1$) 的色散关系如图 3 所示, 可以看出色散关系和图 2 相比有所下移. 这是由于有限温度下, 外势的高阶项作用开始明显, 第 3 节会进一步

说明温度对色散关系的影响. 同样图 3 也展示了色散关系随链间耦合作用的变化情况: 当链间耦合强度较小时, 不存在频率禁带 (见图 3(a)); 当链间耦合强度增加到某一临界值后, 频率禁带将出现 (见图 3(b)), 并随着链间耦合强度增加, 频隙不断变大 (见图 3(c)). 通过以下计算, 可得到频隙为 0 的临界链间耦合强度. 令

$$\Delta\omega = \omega_{n,+}(0) - \omega_{n,-}(\pi) = 0, \quad (28)$$

由 (18) 式结合 (25) 式—(27) 式得

$$\omega_{n,+}(0) = \sqrt{k_1 \gamma_{n,+}}, \quad (29)$$

$$\omega_{n,-}(\pi) = \sqrt{k_1 (4 + \gamma_{n,-})}. \quad (30)$$

将 (29) 式和 (30) 式代入 (28) 式计算可得

$$k_c = 2k_1. \quad (31)$$

上述计算结果说明对于两条相同的耦合 FK 链系统, 在有限温度下, 临界链间耦合强度仍为 FK 链恢复力系数的 2 倍 (图 3(b) 数值结果也验证了这一结论), 与外势深度无关, 和低温小振动近似下的结论相同.

2.4 高温近似下耦合 FK 双链的色散关系

2.4.1 色散关系计算方法

在高温区域, 由于粒子动能很大, 会脱离外势的束缚, 这时外势可以忽略, 所以 FK 链又回归到了简谐链, 两条相同耦合 FK 链的色散关系和两条相耦合简谐链的结果相同 (只需令 (9) 式的外势深度 $V = 0$), 即

$$\omega_{-}^2 = \frac{4k_1 \sin^2 \frac{aq}{2}}{m},$$

$$\omega_{+}^2 = \frac{4k_1 \sin^2 \frac{aq}{2} + 2k_c}{m}. \quad (32)$$

2.4.2 色散关系结果分析

由 (32) 式可知, 高温情况下频谱范围和频率禁带仅与 FK 链的恢复力系数、链间耦合强度系数有关联, 与外势深度无关, 这点与低温及有限温的情况有所不同. 图 4 给出了高温下耦合 FK 双链 ($k_1 = k_2 = 1$, $V = 1$, $m = 1$) 的色散关系. 发现在长波极限下, 声学支频率为 0, 光学支也比低温和有限温情况有明显下移, 主要由于高温下粒子运动剧烈, 脱离了外势的约束. 此外, 从图 4 可以看出,

当链间耦合强度逐渐增加到某一临界值后, 频率禁带出现, 并随着链间耦合强度增加, 频隙不断变大, 这在低温、有限温的讨论中已提到, 结论均类似. 按照前面类似的计算方法, 也可得到频隙为 0 的临界链间耦合强度为 $k_c = 2k_1$. 结合低温和有限温的讨论可知: 两条相同的耦合 FK 链系统, 在链间耦合作用为简谐耦合作用时, 临界链间耦合强度始终为 FK 链的恢复力系数的 2 倍, 即 $k_c = 2k_1$, 并不受温度的影响.

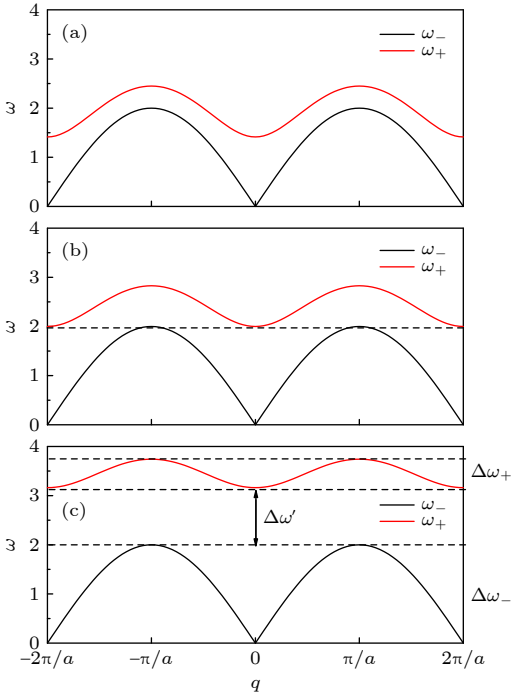


图 4 耦合 FK 双链在高温近似下的色散关系 ($k_1 = k_2 = 1$, $V = 1$, $m = 1$) (a) $k_c = 1$; (b) $k_c = 2$; (c) $k_c = 5$
Fig. 4. Dispersion relation of coupled FK chains under high temperature approximation ($k_1 = k_2 = 1$, $V = 1$, $m = 1$): (a) $k_c = 1$; (b) $k_c = 2$; (c) $k_c = 5$.

上述结论表明 FK 链的恢复力系数越大, 所对应临界链间耦合强度越大. 换言之, 要想使恢复力系数很大的耦合双链出现频隙结构, 链间耦合强度必须足够强. 链间耦合强度的强弱和很多因素有关, 如果耦合固体材料缺乏良好的接触或表面不是很平整, 界面耦合强度系数就会比较弱; 如果耦合固体材料能够彼此很好地接触, 在界面处就可能形成化学键, 导致界面耦合强度系数会很强. 从上述结论发现, 通过改变耦合双链的恢复力系数, 进而能改变带隙结构. 对带隙结构的改变和控制可以指导人们设计一定的声子禁带和允带 (处于禁带频率范围内的振动将被禁止在晶体中传播^[26,27]; 处于通

带频率范围内的振动会传遍整个结构), 可用于模式选择、能量传输、传播的指向性等诸多领域, 对新型功能材料在工程上的应用很有帮助^[28,29].

3 温度对耦合 FK 双链色散关系的影响

第 2 节给出了在低温、有限温 and 高温情况下耦合 FK 双链色散关系的解析表达式, 并分析了色散关系的分布情况、频谱范围和带隙结构的影响因素等. 本节对于相同的耦合 FK 双链, 固定链间耦合强度 k_c , 具体讨论温度对耦合 FK 双链色散关系的影响规律. 但什么温度为低温? 什么温度为高温? 第 2.2 节和第 2.4 节的讨论只是表明在温度足够低和足够高时, 可分别用 (9) 式和 (32) 式计算色散关系, 但并不明确温度具体要低于或高于什么值. 考虑到 EPT 可适用于低温情况, 我们可以用 EPT 来计算具体低温数值下的色散关系, 并与低温小振动近似下的结果对比. 而在高温时, 采用 SED 方法^[8-10]计算具体高温数值下的色散关系, 并与 2.4 节高温解析的结果对比. 下面简单介绍 SED 方法^[8-10], SED 的表达式为

$$\Phi_n(\omega, Q) = \frac{m_n}{4\pi \tau_0 N} \times \left| \int_0^{\tau_0} \sum_{j=1}^N p_{n,j} \exp \left(i2\pi \times \frac{j}{N} Q - i\omega t \right) dt \right|^2, \quad (33)$$

这里 $\Phi_n(\omega, Q)$ 是频率 ω 和波数 q ($q = 2\pi Q/N$, $Q = -\frac{N}{2}, -\frac{N}{2} + 1, \dots, \frac{N}{2} - 1, \frac{N}{2}$, 链常数取值为 1) 的函数. i 是虚数, τ_0 是模拟计算的总时间, N 表示链长, m_n 是每条链粒子的质量. 将分子动力学模拟的粒子动量 $p_{n,j}$ 代入 (33) 式中数值计算, 即可得到声子谱能量密度.

图 5 展示了耦合 FK 双链在 $k_c = 1.0$ 时的色散关系随温度的变化情况 (考虑到 SED 的计算时间成本, 本文只计算了波数 $0 - \pi/a$ (链常数 $a=1$) 范围的色散关系, 但数据足够说明问题). 图 5 中红实线和黑实线是 EPT 的计算结果; 红色和黑色圆点是在低温小振动近似下计算的结果; 红色和黑色方框是高温下计算的解析结果; 等高线图是 SED 方法的计算结果. 从图 5(a) 和图 5(b) 可以发现, 温度 T 低于 0.01 时, EPT 计算的色散关系与低温小振动下的解析结果几乎无差别, 完全吻合. 这说明

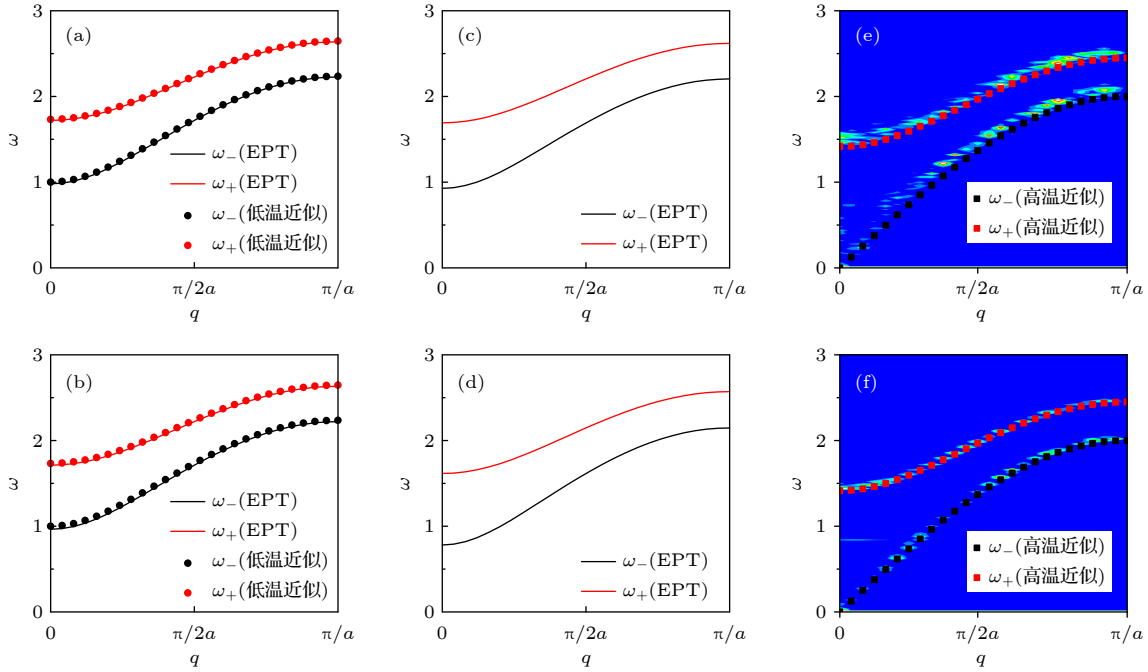


图 5 耦合 FK 双链在不同温度下的色散关系 ($k_1 = k_2 = 1$, $V = 1$, $m = 1$, $k_c = 1.0$) (a) $T = 0.005$; (b) $T = 0.01$; (c) $T = 0.02$; (d) $T = 0.06$; (e) $T = 0.10$; (f) $T = 0.20$

Fig. 5. Dispersion relation of coupled FK chains at different temperature ($k_1 = k_2 = 1$, $V = 1$, $m = 1$, $k_c = 1.0$): (a) $T = 0.005$; (b) $T = 0.01$; (c) $T = 0.02$; (d) $T = 0.06$; (e) $T = 0.10$; (f) $T = 0.20$.

温度低于 0.01 时, 就可以用前面低温小振动近似得到的解析结果去计算色散关系, 并且色散关系分布在此低温区域基本不受温度影响. 当温度升高, 如温度高于 0.01 时 (见图 5(c) 和图 5(d)), 色散关系与图 5(a) 和图 5(b) 相比有明显下移, 且温度越高, 下移幅度越大. 这是由于温度升高, 外势高阶项开始起作用, 并且发现声学支下移幅度较光学支下移幅度大. 因此可以推论在链间耦合强度足够大, 出现频隙结构的耦合系统中, 温度升高频隙会变大. 当温度进一步升高, 例如温度高于 0.1 时 (见图 5(e) 和图 5(f)), 色散关系较图 5(c) 和图 5(d) 有大幅度下移, 声学支在长波极限下频率几乎降为 0, 光学支也有明显下移. 说明在温度高于 0.1 时, 外势对粒子运动影响已经可以忽略, 并且 SED 的计算结果和前面高温解析计算的色散关系完全吻合. 因此温度高于 0.1 时, 就可以用 2.4 节高温解析结果来计算色散关系, 并且色散关系分布在高温区域基本不受温度影响.

4 总 结

本文计算了两条相同的耦合 FK 链系统在低温、有限温和高温情况下色散关系的解析表达式.

研究发现频谱范围、频率禁带与 FK 链的恢复力系数、链间耦合强度系数均有关联, 低温和有限温的情况还与外势深度有关系. 带隙结构出现的临界链间耦合强度始终为 FK 链恢复力系数的 2 倍, 并且不受温度的影响. 进一步研究了给定链间耦合强度下温度对耦合 FK 双链色散关系的影响规律. 发现温度在低于 0.01 时, 色散关系分布基本不受温度影响; 温度在高于 0.01 时, 色散关系有明显下移, 且温度越高, 下移幅度越大, 直至温度上升到 0.1, 声学支在长波极限下频率几乎降为 0. 至此耦合系统脱离外势的影响, 温度再升高色散关系分布将不受温度影响. 此外还给出了低温小振动近似及高温下解析得到的色散关系的温度适用范围. 上述研究结果让我们对链间耦合作用和温度使晶格振动色散关系产生的变化有了具体的认识, 有助于拓宽和加深对耦合材料物理性质的了解, 可以指导实现设计一定的声子禁带和允带, 可用于模式选择、能量传输、传播的指向性等诸多领域, 这对新型功能材料在工程上的应用很有帮助 [28,29]. 此外, 链间耦合作用的存在及温度的变化导致系统色散关系的改变可以帮助我们理解很多传热现象. 例如碳纳米管阵列和多层石墨烯等纳米材料的热导率明显低于单臂碳纳米管 [30] 和单层石墨烯 [31] 的热导率; 温度

升高使得纳米材料热导率降低等. 因此本文研究的结果对于能量输运、热调控等实际应用有着重要的指导意义.

参考文献

- [1] Nelson L A, Sekhon K S, Frita J E 1978 *Proceedings of the 3rd International Heat Pipe Conference* Palo Alto, CA, USA, May 22–24, 1978 p450
- [2] Pop E 2005 *Ph. D. Dissertation* (Stanford, California: Stanford University)
- [3] Krishnan S, Garimella S V, Chrysler G M, Mahajan R V 2007 *IEEE Trans. Adv. Packaging* **30** 462
- [4] Shi L, Dames C, Lukes J R, Reddy P, Duda J, Cahill D G, Lee J, Marconnet A, Goodson K E, Bahk J H 2015 *Nano. Micro. Thermophys. Eng.* **19** 127
- [5] Huang K, Han R Q 1983 *Solid-State Physics* (Beijing: Higher Education Press) p93 (in Chinese) [黄昆, 韩汝琦 1983 固体物理学 (北京: 高等教育出版社) 第93页]
- [6] Lu D, Jiang P 2011 *Solid-State Physics* (Beijing: Higher Education Press) pp52–60 (in Chinese) [陆栋, 蒋平 2011 固体物理学 (北京: 高等教育出版社) 第52—60页]
- [7] Li Z Z 2002 *Solid State Theory* (Beijing: Higher Education Press) pp18–29 (in Chinese) [李正中 2002 固体理论 (北京: 高等教育出版社) 第18—29页]
- [8] Thomas J A, Turney J E, Iutzi R M, Amon C H, McGaughey A J 2010 *Phys. Rev. B* **81** 081411
- [9] Zhu L, Li B 2014 *Sci. Rep.* **4** 4917
- [10] Su R X, Zhang X 2018 *Appl. Thermal Eng.* **144** 488
- [11] Li N, Li B 2007 *Phys. Rev. E* **76** 011108
- [12] Li N, Li B 2012 *AIP Adv.* **2** 041408
- [13] Li N, Li B 2013 *Phys. Rev. E* **87** 042125
- [14] Wang X W, Zhong Z R, Xu J 2005 *J. Appl. Phys.* **97** 064302
- [15] Yang D J, Zhang Q, Chen G, Yoon S F, Ahn J, Wang S G, Zhou Q, Wang Q, Li J Q 2002 *Phys. Rev. B* **66** 165440
- [16] Han Z, Fina A 2011 *Prog. Polym. Sci.* **36** 914
- [17] Cohen Y, Ya'akovovitz A 2021 *Microelectr. Eng.* **247** 111575
- [18] Shahil K M F, Balandin A A 2012 *Solid State Commun.* **152** 1331
- [19] Pettes M T, Jo I, Yao Z, Shi, L 2011 *Nano Lett.* **11** 1195
- [20] Bae M H, Li Z, Aksamija Z, Martin P N, Xiong F, Ong Z Y, Knezevic I, Pop E 2013 *Nature Commun.* **4** 1
- [21] Ni Y, Chalopin Y, Volz S 2013 *Appl. Phys. Lett.* **103** 061906
- [22] Koh Y K, Bae M H, Cahill D G, Pop E 2010 *Nano Lett.* **10** 4363
- [23] Frenkel Y, Kontorova T 1938 *Teor. Fiz.* **8** 1340
- [24] Tian Q, Hong F N 2006 *College Phys.* **25** 17 (in Chinese) [田强, 洪馥男 2006 大学物理 **25** 17]
- [25] Su R X, Yuan Z Q, Wang J, Zheng Z G 2016 *J. Phys. A: Math. Theor.* **49** 255003
- [26] Mu Y N, Guo J Z 2014 *Technical Acoustics* **33** 4 (in Chinese) [穆亚男, 郭建中 2014 声学技术 **33** 4]
- [27] Zhang R Y, Jiang G S, Wang Z Q, Lü Y D 2006 *Technical Acoustics* **25** 35 (in Chinese) [张荣英, 姜根山, 王璋奇, 吕亚东 2006 声学技术 **25** 35]
- [28] Wang X M 2014 *Proceedings of the CSEE* **34** 371 (in Chinese) [王学梅 2014 中国电机工程学报 **34** 371]
- [29] Yu Z K, Zheng X 2007 *J. Microw.* **23** 61 (in Chinese) [余振坤, 郑新 2007 微波学报 **23** 61]
- [30] Yan X H, Xiao Y, Li Z M 2006 *J. Appl. Phys.* **99** 124305
- [31] Singh D, Murthy J Y, Fisher T S 2011 *J. Appl. Phys.* **110** 044317

Lattice wave solution and its dispersion relation of two coupled Frenkel-Kontorova chains^{*}

Su Rui-Xia¹⁾ Huang Xia²⁾ Zheng Zhi-Gang³⁾†

1) (*Department of Physics, School of Science, China University of Mining and Technology-Beijing, Beijing 100083, China*)

2) (*School of Mathematics and Physics, North China Electric Power University, Beijing 102206, China*)

3) (*College of Information Science and Engineering, Huaqiao University, Xiamen 361021, China*)

(Received 22 December 2021; revised manuscript received 16 March 2022)

Abstract

We obtain the lattice wave solution and the dispersion relation of the lattice vibration equation of the two identical coupled Frenkel-Kontorova (FK) chains, and we study the lattice vibration characteristics of the coupled FK chains. The results show that the dispersion relation of coupled FK chain contains an acoustic branch and an optical branch. The spectral range and frequency band gap are related to the coefficient of restoring force of each chain and the inter-chain coupling strength, and it is also related to the depth of the on-site potential for the low temperature case and finite temperature case. Moreover, it is found that there is no frequency band gap for weak inter-chain coupling. The frequency gap appears when the inter-chain coupling strength exceeds a critical value, and the frequency band gap will become bigger with the inter-chain interaction increasing. This is because the optical branch moves towards high frequency region with the inter-chain coupling increasing. We also find that the critical inter-chain coupling strength of frequency band gap is always twice the restoring force coefficient of FK chain, and it does not depend on temperature. In addition, we study the effect of temperature on the dispersion relationship of coupled FK chain with a fixed inter-chain coupling strength. These results provide a theoretical basis for analyzing the effects of inter-chain coupling and temperature on the vibrational characteristics and physical properties of lattice, and thus providing an important guide for the energy transport, thermal management and other practical applications.

Keywords: two coupled Frenkel-Kontorova chains, inter-chain coupling, dispersion relation, temperature, heat conduction

PACS: 44.10.+i, 05.45.-a, 63.20.-e, 63.20.D-

DOI: 10.7498/aps.71.20212362

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51706118, 11875135), the Fundamental Research Funds for Central Universities, China (Grant Nos. 2022YQLX03, 2019QS05), and the Quanzhou Science and Technology Plan, China (Grant No. 2018C085R).

† Corresponding author. E-mail: zgzheng@hqu.edu.cn