

含时 Peierls 方程的呼吸子近似解

王少峰, 王东旭
(重庆大学物理学院, 重庆 401331)

摘要: 呼吸子是一种广泛存在于非线性模型中的重要非线性振动模. 本文给出了含时 Peierls 方程的近似呼吸子解, 并且通过数值方法验证了呼吸子解的正确性. 结果表明了动力学 Peierls 方程也存在呼吸子解, 呼吸子可以看作是位错和反位错的束缚态.

关键词: 含时 Peierls 方程; 呼吸子; 数值计算

中图分类号: O175.29 **文献标识码:** A **DOI:** 10.19907/j.0490-6756.2021.034003

Approximated breather solution of the time-dependent Peierls equation

WANG Shao-Feng, WANG Dong-Xu
(Department of Physics, Chongqing University, Chongqing 401331, China)

Abstract: Breather is an important nonlinear vibration mode that widely exists in many nonlinear models. In this paper, the approximate breather solution of the time-dependent Peierls equation is presented, and the correctness of the breather solution is verified by numerical simulation. The results show that the proposed solution is really a breather of the dynamical Peierls equation, and the breather solution can be viewed as a bound state of dislocation and anti-dislocation.

Keywords: Time-dependent Peierls equation; Breather; Numerical solution

1 引言

呼吸子是一种空间局域和时间周期性的非线性振动模式. 由于两个正反拓扑孤子之间存在相互吸引作用, 所以在适当的条件下, 正反拓扑孤子会像两个耦合粒子一样呈现稳定的周期性振动模式, 这种模式类似于呼吸振动, 被称为呼吸子. 根据解析理论和模拟分子动力学研究, 很多类型的非线性系统中存在呼吸子. 关于呼吸子的第一个报告可以追溯到 1969 年^[1], 这是首个关于呼吸子的定性研究. Kosevich 和 Kovalev 在 1974 年报告了类似的结果^[2]. 1988 年, Sievers 和 Takeno 在 Fermi Pasta Ulam (FPU) 链中获得了局域激发^[3-5]. 同时, Campbell 和 Peyrard 在各种晶格模型中观察到离散呼吸子(并为其创造了这个术语)的激

发^[6]. 随后, 一大批研究小组开始对局域激发呼吸子进行严谨细致的数学研究^[7-10], 特别是基于一维、二维晶体的呼吸子研究更为广泛^[11-17]. 重要的结果之一是在 Sine-Gorden 方程中找到了呼吸子解析解^[18-19]. 但是, 到现在为止, 著名的非线性模型 Peierls 方程中的呼吸子研究还未见报道. Peierls 方程中的拓扑孤子被称为位错, 由于两个正反位错之间存在相互吸引作用, 所以正反位错也应该可以呈现稳定的周期性局域振动模式. 本文首先将经典 Peierls 方程推广为含时动力学方程, 然后参考 Sine-Gorden 方程中的呼吸子解析解给出了 Peierls 方程的呼吸子近似解, 最后用数值方法验证这个近似解确实是呼吸子解, 并且对其行为进行了简单讨论.

收稿日期: 2020-08-02

基金项目: 国家自然科学基金(11874093)

作者简介: 王少峰(1958-), 陕西宁强人, 博士, 主要研究领域为位错结构与性质. E-mail: sfwang@cqu.edu.cn

2 含时的动力学 Peierls 方程

经典的 Peierls 方程是准连续的静态平衡方程,存在解析位错解^[20]. 由于实际晶体是离散的,位错的完整行为和性质与晶体的离散性密切相关,所以下面建立全离散的 Peierls 动力学方程. 基于静态全离散 Peierls 方程^[21-23],推广的含时动力学 Peierls 方程的形式为,

$$m \frac{d^2 u}{dt^2} + \sum_{l'=-\infty}^{\infty} \Omega(l-l')u(l') = f(l) \quad (1)$$

这里 u 是相对位移, m 是引入的有效质量(不是原子质量), f 是广义层错能的负梯度,

$$f = -\frac{d\gamma}{du}, \quad \gamma = -\frac{\mu b^2 \sigma}{2 \pi^2 d} \left(\cos^2 \frac{\pi u}{b} + \Delta \cos^4 \frac{\pi u}{b} \right) \quad (2)$$

其中 γ 表示广义层错能, μ 是切变模量, σ 是滑移面原胞的面积, b 是位错的 Burgers 矢量, 无量纲参数 Δ 是对材料广义层错能的修正参数.

为了以一种与模型无关的方式确定离散核 Ω 的具体形式, 我们需要讨论离散核 Ω 在 k -空间的谱行为.

$$\Omega(l) = \frac{\lambda}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{\lambda}}^{\frac{\pi}{\lambda}} \tilde{\Omega}(k) e^{ikl} dk \quad (3)$$

其中 λ 是周期. k -空间的核 $\tilde{\Omega}$ 可以分解为奇异部分 $\tilde{\Omega}_s(k)$ 和非奇异部分 $\tilde{\Omega}_r(k)$,

$$\tilde{\Omega}(k) = \tilde{\Omega}_r(k) + \tilde{\Omega}_s(k) \quad (4)$$

非奇异部分 $\tilde{\Omega}_r(k)$ 来自失配面内的原子相互作用, 是光滑偶函数, 可以展开成为以下形式:

$$\tilde{\Omega}_r(k) = \omega_0^r + \omega_1^r \cos(k\lambda) + \dots \quad (5)$$

而奇异部分 $\tilde{\Omega}_s(k)$ 表示内部原子之间的相互作用的影响, 其行为类似于声子谱, 在原点 ($k=0$) 导数不连续, 因此, 应该展开为:

$$\begin{aligned} \tilde{\Omega}_s(k) &= \tilde{\Omega}_s(-k) = \omega_0^s \sin\left(\frac{1}{2}k\lambda\right) + \\ &\omega_1^s \sin\left(\frac{3}{2}k\lambda\right) + \dots, \quad k \geq 0 \end{aligned} \quad (6)$$

用这种方式展开的傅里叶级数能够迅速收敛. 保留傅里叶级数的带头项, 方程(5)和(6)式简化为:

$$\begin{aligned} \tilde{\Omega}_r(k) &= \omega_0^r (1 - \cos k\lambda) \\ \tilde{\Omega}_s(k) &= \tilde{\Omega}_s(-k) = \omega_0^s \sin\left(\frac{1}{2}k\lambda\right) \end{aligned} \quad (7)$$

这里用到了求和规则, $\omega_0^r + \omega_1^r = 0$ ^[21]. 利用方程(7)的表达式, 还原到实空间中得到,

$$\Omega_r(l) = -\frac{\omega_0^r}{2} (\delta_{l+1} + \delta_{l-1} - 2\delta_l)$$

$$\Omega_s(l) = \frac{1}{2\pi} \frac{\omega_0^s}{\frac{1}{4} - l^2} \quad (8)$$

这样有,

$$\begin{aligned} \sum_{l'=-\infty}^{\infty} \Omega_s(l-l')u(l') &= \frac{\omega_0^s}{2\pi} \sum_{l'=-\infty}^{\infty} \frac{u(l')}{\frac{1}{4} - (l-l')^2} = \\ \frac{\omega_0^s}{2\pi} \sum_{l'=-\infty}^{\infty} \left[\frac{u(l')}{l-l'+\frac{1}{2}} - \frac{u(l')}{l-l'-\frac{1}{2}} \right] &= \\ -\frac{\omega_0^s}{2\pi} \sum_{l'=-\infty}^{\infty} \frac{u(l'+1) - u(l')}{l'-l+\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (9)$$

利用这些结果, 方程(1)中的第二项可以具体写成,

$$\begin{aligned} \sum_{l'=-\infty}^{\infty} \Omega(l-l')u(l') &= \\ -\frac{1}{2} \omega_0^r [\rho(l) - \rho(l-1)] - \frac{\omega_0^s}{2\pi} \sum_{l'=-\infty}^{\infty} \frac{\rho(l')}{l'-l+\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (10)$$

其中 $\rho(l) = u(l+1) - u(l)$ 是位错密度. 现在含时动力学 Peierls 方程的具体形式为,

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 u}{dt^2} - \frac{1}{2} \omega_0^r [\rho(l) - \rho(l-1)] - \\ \frac{\omega_0^s}{2\pi} \sum_{l'=-\infty}^{\infty} \frac{\rho(l')}{l'-l+\frac{1}{2}} = f(l) \end{aligned} \quad (11)$$

在连续近似下 ($\lambda \rightarrow 0$) 和经典 Peierls 方程比较可知^[20]:

$$\omega_0^r = \frac{\beta\sigma}{\lambda^2}, \quad \omega_0^s = \frac{K\sigma}{\lambda} \quad (12)$$

这里, K 是直线位错的能量因子, β 是最近邻原子的有效力常数. 为了讨论方便, 选取长度单位长度 $b=1$, 并且取 $\lambda=b=1$. 当 $\omega_0^r = \omega_0^s = 0$ 时, 含时动力学 Peierls 方程化简为普通振动方程(类似于单摆方程), 我们选取小振动的周期 T_0 为时间单位, $T_0=1$. 为了简单起见, 在下面讨论中我们取 $\omega_0^s = 0$, 取无量纲参数 $\Delta=0$.

3 Peierls 方程的呼吸子近似解

含时动力学 Peierls 方程(11)是关于原子相对位移变量 u 的非线性方程, 十分复杂, 目前没有解析求解方法. 在连续近似下, 这个方程有著名的 Peierls 精确位错解:

$$u(x) = \frac{b}{\pi} [\arctan(x/\zeta p)], \quad \zeta p = \frac{Kd}{2\mu} \quad (13)$$

其中, $x = \lambda$ 是空间位置坐标. 这个解与 Sine-Gorden 方程的 Kink 解十分类似. 由于两个正反位错

之间存在类似于 Kink 的相互吸引作用, 所以一个自然的推论是: 正反位错也能够像 Kink 对那样呈现稳定的周期性振动模式, 形成呼吸子. 不过 Kink 的相互吸引作用是指指数衰减的短程作用, 而位错之间的相互作用是幂律衰减的长程作用, 根据相互作用特征的考虑, 我们提出下面含时动力学 Peierls 方程(11)的呼吸子近似解,

$$u(x, t) = \frac{b}{\pi} \arctan \left[\frac{A \cos(\omega t)}{1 + \alpha(x - x_0)^2} \right] \quad (14)$$

其中, A 和 α 是两个待定的参数, ω 是振动频率, x_0 表示呼吸子的中心位置. 这里, 初始时刻 $t=0$ 选取

为一对正反位错叠加形成的局域单峰波包, 并且每个位置的原子相对位移速度为零,

$$u(x, 0) = \frac{b}{\pi} \arctan \left[\frac{A}{1 + \alpha(x - x_0)^2} \right] \quad (15)$$

为了验证表达式(14)是呼吸子近似解, 我们用数值方法求解了含时动力学 Peierls 方程(11). 由于呼吸子是高度局域化振动模, 只有呼吸子中心附近的原子参与振动, 所以我们可以只考虑长度远大于呼吸子特征长度的有限链. 在具体计算中, 我们选取包含 201 个原子的有限链进行数值求解.

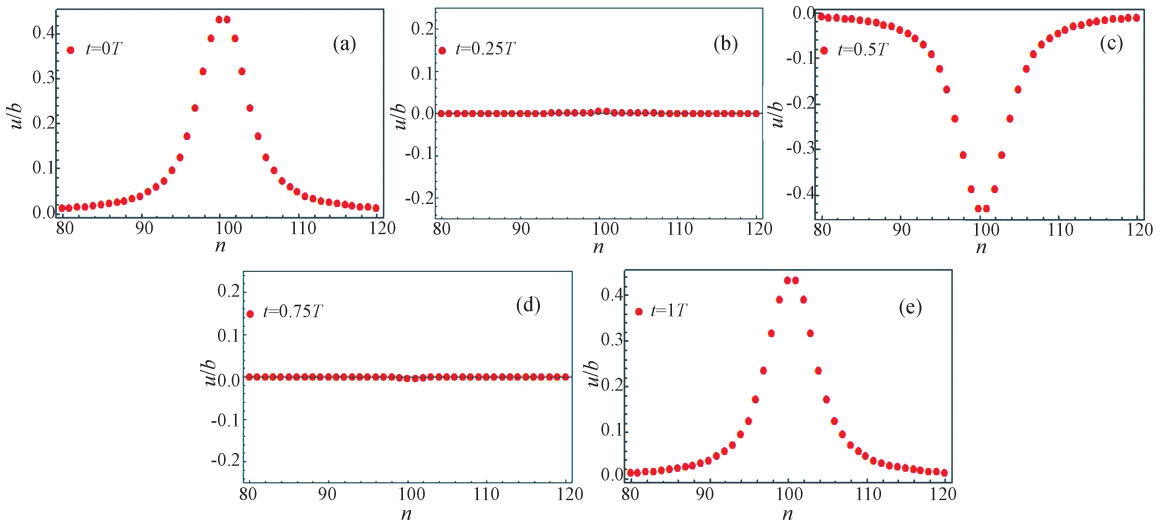


图 1 呼吸子近似解在一个周期内随时间演化过程
Fig. 1 Evolution of the approximated breather solution in a period

将 $t=0$ 时呼吸子近似解(15)作为含时动力学 Peierls 方程的初始条件输入, 我们发现对于参数 A 和 α 的一定范围, 动力学 Peierls 方程的时间演化行为的确是期望的呼吸子振动模式. 作为一个例子, 取方程中的参数 $K = \mu$, 取近似解中的参数 $A=5, \alpha = 1/(1.1 * \zeta p)^2, x_0 = 100$ (呼吸子位于中心), 然后通过数值方法求解方程考察模式的演化. 图 1 是一个周期 T 内的模式振动图. 图中初始正反位错叠加形成的局域单峰波包(a)经过四分之一周期后单峰消失了, 所有原子回归到平衡位置(b), 但是这时的原子具有速度, 也就是说势能转换为动能. 再经过四分之一周期后动能又转换为势能, 原子位型呈现反相位的局域单峰波包(c). 后半周期的行为是模式振动的回复过程. 我们看到呼吸子近似解展示了周期振动的特征, 是一个空间局域化的振动模.

图 2 给出了呼吸子中心原子位移随时间的变

化. 从图 2 可以看出, 原子的位移随时间的变化呈现出令人满意的周期性, 并且原子的振幅基本保持恒定. 上述结果表明, 我们得到了具有稳定振动周期的空间局域模, 方程(14)是一个较为理想的呼吸子近似解.

为了验证呼吸子近似解的稳定性, 图 3 给出了 $t=50T, t=100T, t=200T, t=500T, t=1000T$ 呼吸子的模式结构. 可以看出, 这些模式结构几乎完全一样. 考虑到数值计算带来的误差以及表达式(14)的近似性, 可以认为含时动力学 Peierls 方程呼吸子是稳定的.

在确定含时动力学 Peierls 方程呼吸子存在的基础上, 我们考察了方程中参数 K (即 ω_0^2) 的影响, 见图 4. 取 $K=0.85\mu, 0.90\mu, 0.95\mu, 1.05\mu$ 时, 数值计算结果表明表达式(14)仍然是良好的呼吸子近似解. 当然, 参数 K 的变化会导致呼吸子空间模式和振动周期的改变.

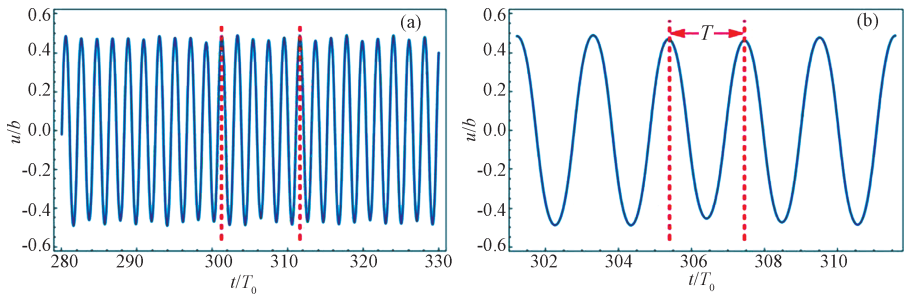


图 2 呼吸子中心原子位移随时间的周期振动: (a) 50 个时间单位的振动, (b) 5 个周期的振动

Fig. 2 Periodic vibration of the atom located at the center of the breather: (a) the vibration of 50 units of time, (b) vibration in 5 periods

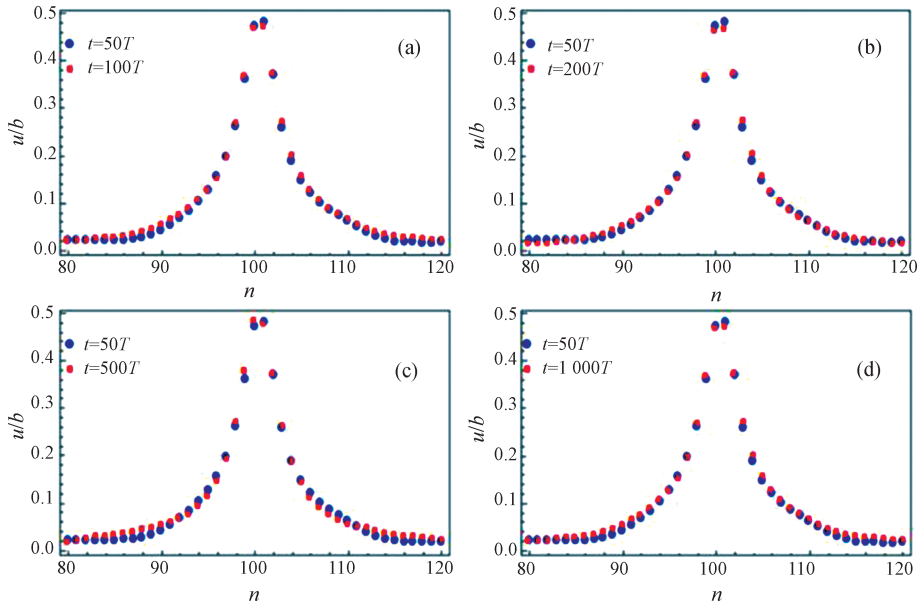


图 3 原子位型的对比图

Fig. 3 Comparison of atom configuration

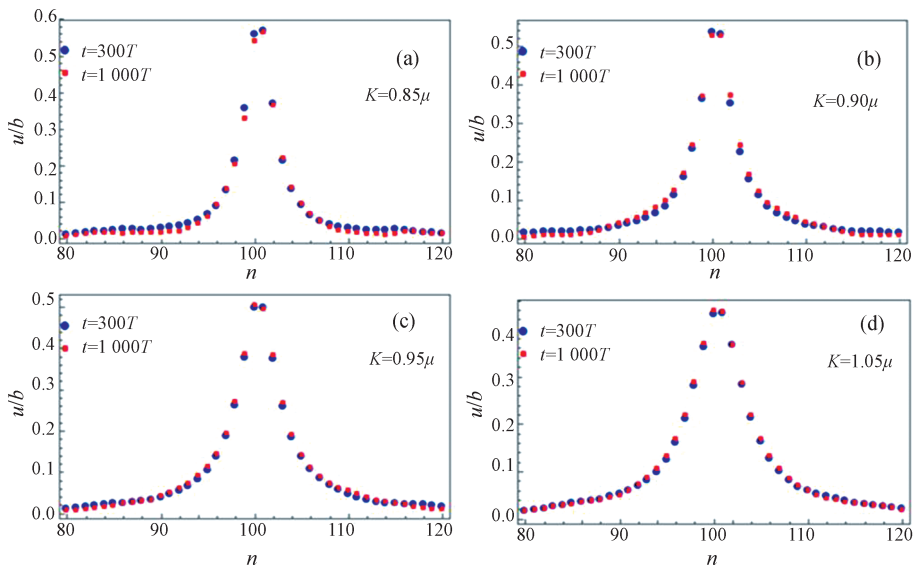


图 4 参数 K 的影响

Fig. 4 Effect of the parameter K on the breather mode

图 5 显示了周期 T 与 K 的关系, 随着 K 增加, 周期 T 明显下降, 这意味着 Peierls 方程中的呼吸子振动频率变高. 图中实线是 K 与周期 T 关系的线性拟合, K 与周期 T 的变化呈现近似的线性关系: $T=3.1617-1.094K$.

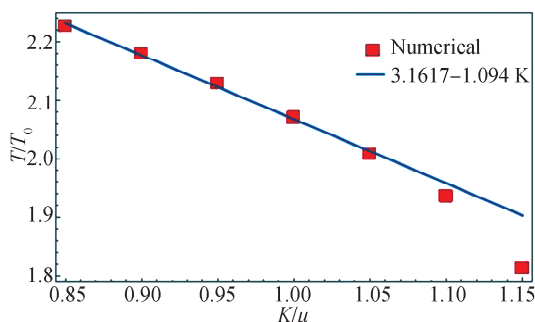


图 5 周期 T 与参数 K 的关系

Fig. 5 The relationship of period T and parameter K

4 总 结

本文将经典 Peierls 方程推广为含时的动力学方程. 在此基础上, 利用数值方法研究了动力学方程的呼吸子解. 我们给出了呼吸子解的近似表达式, 并且通过数值计算验证了呼吸子解的准确性, 考察了呼吸子解的空间模式和振动周期. 对于小振动, 线性化下的含时动力学 Peierls 方程有声波解. 容易证明这种声波具有最小截止频率. 也就是说动力学 Peierls 方程的声波是高频波. 和 Sine-Gordon 方程中的呼吸子一样, Peierls 方程的呼吸子的振动频率总是小于声波频率, 是低频振动模. 鉴于呼吸子的低频特征, 呼吸子的激发可能是材料低频内耗的主要根源. 关于这个问题的详细分析, 我们将另文讨论.

参考文献:

[1] Ovchinnikov A A. Localized long-lived vibrational states in molecular crystals [J]. J Exp Theor Phys+, 1969, 30: 147.

[2] Kosevich A M, Kovalev A S. Self-localization of vibrations in a one-dimensional anharmonic chain [J]. Sov Phys: JETP, 1975, 40: 891.

[3] Sievers A J, Takeno S. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals [J]. Phys Rev Lett, 1988, 61: 970.

[4] Takeno S, Sievers A J. Anharmonic resonant modes in perfect crystals [J]. Solid State Commun, 1988, 67: 1023.

[5] Takeno S, Kisoda K, Sievers A J. Intrinsic local-

ized vibrational modes in anharmonic crystals: stationary modes [J]. Prog Theor Phys Suppl, 1988, 94: 242.

- [6] Campbell D K, Peyrard M. Soviet-American perspectives on nonlinear science, (1990) American institute of physics, Pennsylvania p. 496 [J]. Chaos, 1991, 15: 95.
- [7] Bishop A R, Kalosakas G, Rasmussen K O, *et al.* Localization in physical systems described by discrete nonlinear Schrödinger-type equations [J]. Chaos, 2003, 13: 588.
- [8] Campbell D K. Fresh breather [J]. Nature, 2004, 432: 455.
- [9] Campbell D K, Flach S, Kivshar Y S. Localizing energy through nonlinearity and discreteness [J]. Phys Today, 2004, 57: 43.
- [10] Tsironis G P. If "discrete breathers" is the answer, what is the question [J]. Chaos, 2003, 13: 657.
- [11] Bachurina O V, Kudreyko A A. Two-dimensional discrete breathers in fcc metals [J]. Comp Mater Sci, 2020, 182: 109737.
- [12] Murzaev R T, Kistanov A A, Dubinko V I, *et al.* Moving discrete breathers in bcc metals V, Fe and W [J]. Comp Mater Sci, 2015, 98: 88.
- [13] Hizhnyakov V, Haas M, Shelkan A, *et al.* Standing and moving discrete breathers with frequencies above the phonon spectrum [M]// Archilla J, Jiménez N, Sánchez-Morcillo V, *et al.* Quodons in Mica. Springer series in materials science, vol 221. Switzerland: Springer Cham, 2015.
- [14] Bachurina O V, Murzaev R T, Semenov A S, *et al.* Properties of moving discrete breathers in beryllium [J]. Phys Solid State, 2018, 60: 989.
- [15] Semenov A, Murzaev R, Bebikhov Y, *et al.* New types of one-dimensional discrete breathers in a two-dimensional lattice [J]. Lett Mater, 2020, 10: 185.
- [16] Feng B F, Ling L, Zhu Z. A focusing and defocusing semi-discrete complex short-pulse equation and its various soliton solutions [J]. P Roy Soc A: Math Ph, 2021, 477: 20200853.
- [17] Zhong W P, Yang Z P, Belić M, *et al.* Breather solutions of the nonlocal nonlinear self-focusing Schrödinger equation [J]. Phys Lett A, 2021, 395: 127228.
- [18] Ablowitz M J, Kaup D J, Newell A C, *et al.* Method for solving the Sine-Gordon equation [J]. Phys Rev Lett, 1973, 30: 1262.
- [19] Braun O M, Kivshar Y S. Nonlinear dynamics of

- the Frenkel-Kontorova model [J]. Phys Rep, 1998, 306: 1.
- [20] Hirth J P, Lothe J, Mura T. Theory of dislocations (2nd ed.) [J]. J Appl Mech, 1983, 50: 476.
- [21] Wang S. Lattice theory for structure of dislocations in a two-dimensional triangular crystal [J]. Phys Rev B, 2002, 65: 094111.
- [22] Wang S. Dislocation equation from the lattice dynamics [J]. J Phys A: Math Theor, 2008, 41: 015005.
- [23] Wang S, Zhang S, Bai J, *et al.* Shape change and Peierls barrier of dislocation [J]. J Appl Phys, 2015, 118: 34.

引用本文格式:

中文: 王少峰, 王东旭. 含时 Peierls 方程的呼吸子近似解[J]. 四川大学学报: 自然科学版, 2021, 58: 034003.

英文: Wang S F, Wang D X. Approximated breather solution of the time-dependent Peierls equation [J]. J Sichuan Univ; Nat Sci Ed, 2021, 58: 034003.