

声波在短程关联的边耦合一维二元合金链中传播的共振透射态

胡冬生¹ 郭凤丽¹ 章楠¹ 尹小刚¹ 徐江²

(1. 南京航空航天大学理学院, 南京, 210016; 2. 南京航空航天大学材料科学与技术学院, 南京, 210016)

摘要:利用转移矩阵方法研究了声波在短程关联边耦合一维二元合金链中的传播特性。结果表明:在边耦合原子与主链原子总是相同或总是不相同的情况下,如果主链上原子是随机的,则系统不存在共振透射态;如果主链上原子是随机的,但都是以二聚体的形式出现,则系统存在多个共振透射频率。在边耦合原子总是与主链原子相同时,有 4 个共振频率。并且,若一种原子的刚度系数与质量比值 η_a 保持不变,其中两个共振透射频率不随另一种原子的刚度系数与质量比值 η_b 的变化而变化,其余两个共振透射频率随 η_b 的增大而增大。在边耦合原子与主链原子总是不相同时,若 η_b 较小,该链有 3 个共振频率。并且,当 η_b 增大到 η_a 的两倍时,最低的共振频率分裂为两个共振频率,其余两个共振频率都随 η_b 的增大而增大。

关键词:无序结构;弹性波;共振透射

中图分类号:O469; O411.1; O421

文献标志码:A

文章编号:1005-2615(2013)06-0813-06

Resonant Tunneling States of Acoustic Waves in Side-Coupled One-Dimensional Binary Chain with Short-Range Correlations

Hu Dongsheng¹, Guo Fengli¹, Zhang Nan¹, Yin Xiaogang¹, Xu Jiang²

(1. College of Science, Nanjing University of Aeronautics & Astronautics, Nanjing, 210016, China;

2. College of Material Science and Engineering, Nanjing University of Aeronautics & Astronautics, Nanjing, 210016, China)

Abstract: The transport properties of acoustic waves in a side-coupled one-dimensional binary chain with short-range correlations are studied by using the transfer matrix method. The results show that the resonant tunneling state is absent in the system whether the side coupled atom is always the same as the corresponding atom in the main chain or not, in which the atoms of main chain randomly appear. There are many resonant tunneling states when the atoms in the main chain are random dimers. Four resonant tunneling states appear in the side-coupled chain, in which the side-coupled atoms are always the same as the corresponding atoms in the main chain. When the ratio η_a of the stiffness and the density of one kind of the atoms is constant, two resonant frequencies do not change with the ratio η_b of the stiffness and the density of the other kind of the atoms, and the other two resonant frequencies increase with the increasing η_b . When the ratio is smaller, three resonant tunneling states appear in the chain, where the side-coupled atoms are always not the same as the corresponding atoms of the main chain. Moreover, the lowest resonant frequency will split into two frequencies when the ratio η_b is double of the first ratio η_a . And the two other resonant frequencies increase with the increasing η_b .

Key words: disordered structures; acoustic waves; resonant tunneling states

基金项目:国家自然科学基金(11175086, 51175245)资助项目;江苏省自然科学基金(BK2010073)资助项目;南京航空航天大学基本科研业务费专项科研基金(NZ2012308)资助项目。

收稿日期:2013-08-15; **修订日期:**2013-10-15

通信作者:胡冬生,男,副教授,1968年出生, E-mail: dongshenghu@nuaa.edu.cn.

Anderson 提出无序的概念后^[1], 无序系统的性质, 尤其是低维无序系统的性质得到了广泛的研究^[2-14]。单参量标度理论认为无序系统中的单电子总是局域的^[2]。但当无序存在关联时, 系统会出现退局域态或共振透射态。首先提出一维系统存在短程关联的是任意二聚物模型^[3]: 两种原子 A 和 B 分别以概率 p 和 $(1-p)$ 构成一维链, 但其中一种原子或两种原子以二聚体的形式出现 (即以 AA, BB 的形式出现)。该模型会在能量恰好等于二聚原子的格点势能处出现共振透射态。随后出现了许多推广的任意二聚物模型^[4-12]。其中, 以二聚体形式出现的边耦合二元合金模型给出: 主链原子无序, 但边耦合原子与主链原子总是相同或总是不同时, 该链会出现两个共振透射态^[10]。

电子在无序系统中满足薛定谔方程, 振动的传播满足波动方程, 两者的区别是: 前者对时间一次偏微分, 而后者对时间二次偏微分。研究表明: 虽然薛定谔方程和波动方程在形式上不同, 但在相似的结构中, 波传播与电子传播的性质仍然非常相似。实验验证了声波在无序系统中表现出局域化的特性^[15-16]。理论研究表明: 声波在声子晶体中传播会在某些频率段出现带隙^[17-20]; 声波在关联的无序系统中传播时会出现退局域现象或存在共振透射态^[20-27]。当介质的弹性系数存在长程关联时, 在热力学极限下会有一段频率的波动出现扩展态^[23-24]。当介质的弹性系数存在短程关联时, 会有分立的共振透射态^[25-27]。文中研究声波在短程关联的边耦合二元合金链中传播的特性。在主链原子无序, 边耦合原子与主链原子总是相同或总是不同时, 并没有发现该链有共振透射态; 在主链原子无序, 但总是以二聚体的形式出现时, 该链会出现多个共振透射态。

1 模型及方法

传播波的介质在宏观上是连续的, 通常用连续的微分方程来表示。事实上, 介质总是由微小的单元构成 (如原子、分子等), 这些微小单元也可能不完全相同 (即无序系统)。因此要研究波在无序系统中传播, 连续的微分方程必须用差分方程来表示, 正如使用薛定谔方程描述无序系统时, 要用 Anderson 模型一样。文中研究声波在一维二元边耦合合金链中传播的特性。边耦合二元合金链结构如图 1 所示。

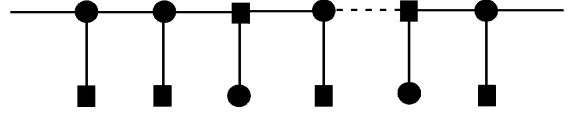


图 1 边耦合二元合金链的示意图

声波在介质中传播的微分方程为

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left[\eta(x) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right] \quad (1)$$

式中: $\psi(x, t)$ 为波函数; $\eta(x) = e(x)/m$ 为介质刚度 $e(x)$ 和平均密度 m 的比值。设 $\psi(x, t) = \psi(x) \exp(-i\omega t)$, 其中 ω 为波动频率。

首先使用有限差分方法将连续的波动方程转化为差分方程。空间波函数离散化, 用 ψ_j 表示, 其中 j 为离散化后的编号。 $\eta(x)$ 离散化后用 η_j 来表示。设步长 Δx 为一个单位。用向后一阶差商和中心二阶差商将方程离散化, 则

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\eta(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right] \approx [\eta_j(\psi_{j+1} - \psi_j) - \eta_{j-1}(\psi_j - \psi_{j-1})] \quad (2)$$

因此, 一维离散化的波动方程可以写成

$$\eta_j(\psi_{j+1} - \psi_j) - \eta_{j-1}(\psi_j - \psi_{j-1}) + \omega^2 \psi_j = 0 \quad (3)$$

如果一维链有边耦合原子 (见图 1), 则在链上离散化的方程满足

$$\eta_j(\psi_{j+1} - \psi_j) - \eta_{j-1}(\psi_j - \psi_{j-1}) + \eta_j(\psi_j - \psi_j) + \omega^2 \psi_j = 0 \quad (4)$$

式中: 下标 J 为边耦合原子的编号。编号为 J 的原子满足的方程为

$$(\omega^2 - \eta_j - \eta_j)\psi_j + \eta_j\psi_j = 0 \quad (5)$$

利用方程式 (4, 5) 消去 ψ_j 并写成矩阵的形式

$$\begin{bmatrix} \psi_{j+1} \\ \psi_j \end{bmatrix} = \mathbf{T}_j \begin{bmatrix} \psi_j \\ \psi_{j-1} \end{bmatrix} \quad (6)$$

式中:

$$\mathbf{T}_j = \begin{bmatrix} 2 + \frac{\eta_{j-1}}{\eta_j} - \frac{\omega^2}{\eta_j} + \frac{\eta_j}{\omega^2 - \eta_j - \eta_j} & -\frac{\eta_{j-1}}{\eta_j} \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (7)$$

通过转移矩阵的递推关系可得

$$\begin{bmatrix} \psi_{N+1} \\ \psi_N \end{bmatrix} = \mathbf{Q}_N \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_0 \end{bmatrix} \quad (8)$$

总转移矩阵 \mathbf{Q}_N 为

$$\mathbf{Q}_N = \prod_{j=1}^N \mathbf{T}_{N+1-j} \quad (9)$$

设二元边耦合链的两端由同一种原子链相连, 波动在两端传播可以用平面波表示。如果一波动从左端入射, 右端出射, 设入射波的振幅为 1, 出射波的振幅为 S , 反射波的振幅为 R , 则边耦合链的

左端和右端的波可以表示为

$$\psi_j = \begin{cases} e^{ikj} + Re^{-ikj} & j < 1 \\ Se^{ikj} & j > N \end{cases} \quad (10)$$

式中: k 为波矢。波矢与振动频率的关系为: $k = \omega /$

$$T = |S|^2 = \frac{4\sin^2 k(Q_{11}Q_{22} - Q_{12}Q_{21})^2}{Q_{11}^2 + Q_{12}^2 + Q_{21}^2 + Q_{22}^2 + 2\cos k(Q_{11}Q_{12} - Q_{11}Q_{21} + Q_{21}Q_{22} - Q_{12}Q_{22}) - 2Q_{11}Q_{22}\cos 2k}$$

2 结果和讨论

文中研究的二元边耦合链分为以下 4 种状态。状态一: 主链原子是随机的, 边耦合原子与主链原子相同; 状态二: 主链原子是随机的, 但边耦合原子与主链原子不相同; 状态三: 主链原子是随机、二聚的, 边耦合原子与主链原子相同; 状态四: 主链是随机、二聚的, 边耦合原子与主链原子不相同。两种原子出现的概率都为 50%。

图 2 为状态一下不同链长时, 透射系数随频率变化取了 100 次平均的曲线, 图中 L 为主链长度。取两种原子的刚度系数与质量比值分别为: $\eta_a = 1$ 和 $\eta_b = 1.2$ 。从图 2 可以看出, 波动有两段频率范围的通带, 且透射系数随着链的增长而减小, 且该边耦合二元合金链没有扩展态。

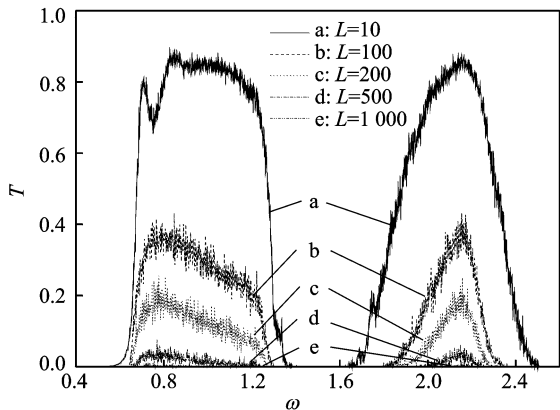


图 2 状态一下透射系数随频率变化曲线

当边耦合链满足状态二时, 透射系数随频率变化取了 100 次平均的曲线如图 3 所示。从图 3 可以看出, 波动仍然有两段频率范围的通带。高频通带的透射系数随链长的增加迅速地减小; 而低频通带的透射系数, 存在一频率, 在该频率处波动的透射系数随链长的增加而减小的幅度很小, 除此频率附近之外的透射系数随链增长而减小得很明显, 从而形成一个透射峰。此情形与二元合金双链梯子模型中出现的峰相类似^[11]。文献[11]给出: 在二元合金双链中, 一条链中两种原子随机排列, 其中一种原子以二聚体的形式出现, 相互耦合的两条链

$\sqrt{\eta}$ 。将波函数式(10)代入矩阵方程组式(8)得到

$$\begin{bmatrix} Se^{ik(N+1)} \\ Se^{ikN} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{ik} + Re^{-ik} \\ 1 + R \end{bmatrix} \quad (11)$$

解方程组式(11)可得透射系数

上对应的原子总不相同, 电导随能量变化的曲线在链较长时出现一个高电导的峰, 该峰值随链长的增长下降幅度很小。似乎是共振透射峰, 但更进一步的研究表明, 其对应的仍然是局域态, 只不过局域长度比较长而已^[12]。本文中的低频峰与此相似, 在链较长时该峰的值会很快地下降, 对应的也是局域态。声波在上面两种结构中传播所有的态都是局域态, 而电子在这两种结构中传播时会有两个共振透射态^[10], 这也许是由于所满足的两种方程不同引起的。

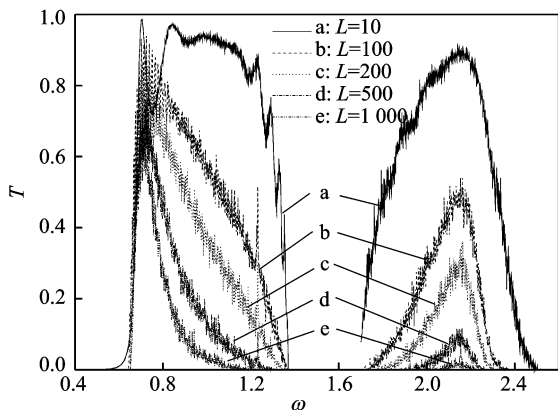


图 3 状态二下透射系数随频率变化曲线

在状态三、四时, 透射系数随频率变化取了 100 次平均的曲线如图 4, 5 所示。由图可见, 透射系数随频率变化的曲线仍然有两段频率的通带, 且随着链长的增长, 透射系数曲线会出现多个峰值, 其对应的位置都保持不变。

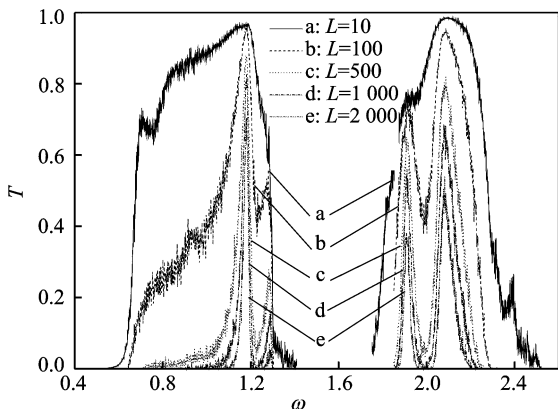


图 4 状态三下透射系数随振动频率变化曲线

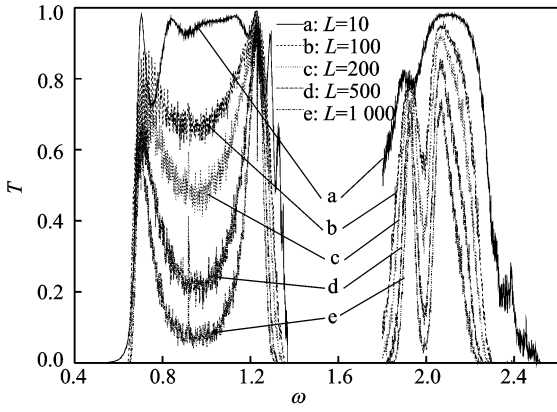


图5 状态四下透射系数随振动频率变化曲线

图6为状态四下,透射系数随频率变化的情况。其中一种原子的刚度系数与质量比值 η_b 取为1,另一种原子的刚度系数与质量比值为 η_a 。在主链长为10万个原子间距的情形下,可以看到:除几个频率的透射系数为有限值外,都近似为零。图6与图5其实是同一种情形下,透射系数随频率的变化。它们的区别是图6的链长比图5的要长得多。局域态的透射系数随链长指数衰减,当链增长到一定程度时(链长比局域长度大好几倍),透射系数趋近于零。图6中透射系数仍存在不为零的有限值。虽然这些峰值小于1,但这里认为是共振透射。因为离散化有误差,同时频率的取值也是离散的值,不一定恰好取在共振透射的频率上。必须指出的是图5中频率小于0.8的峰,在链较长时也会很快下降并消失,与图3中的峰有相似的性质,该频率处的态是局域态。从图6可以看出,对于不同的 η_b 值,不为零的位置,共振透射频率随 η_b 值而变化。但对于边耦合原子与主链原子总是相同的情况,不同的 η_b 值,共振透射频率有些保持不变,有些随 η_b 而变化(见图7)。

为了进一步说明共振透射频率 ω 和刚度系数与质量比值 η_b 的关系,在 $\eta_a=1$ 、链长在10万个原

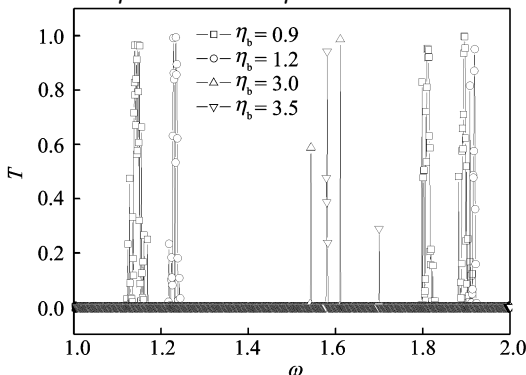


图6 状态四下透射系数随振动频率变化曲线(主链长为10万个原子间距)

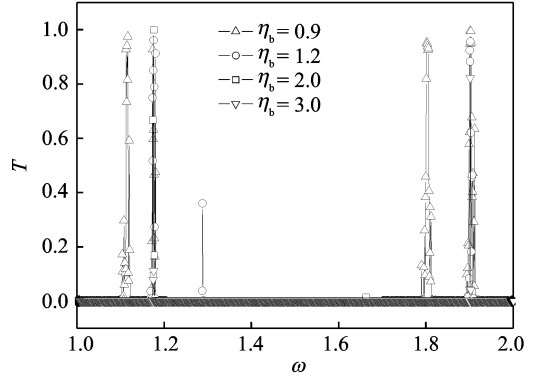


图7 状态三下透射系数随振动频率变化曲线(主链长为10万个原子间距)

子间距长度的情况下,将共振透射时的 η_b 与频率 ω 画到同一张图上。

在主链原子都以二聚体的形式出现,但边耦合原子与主链原子总是不相同的情况下,共振透射频率 ω 与 η_b 的关系如图8所示。从图8中可以看出,在 $\eta_b < 1$ 的情况下,有3个共振频率,且都随 η_b 的增大而增大;当 $\eta_b = 1$ 时,两种原子的刚度系数与质量之比相同,共振透射从3个频率变为两段频率,此时两通带都是共振透射态;当 η_b 继续增大时,又从两段共振透射频率变为3个频率,这3个频率随 η_b 的增大而增大;当 η_b 增大到约为2时,最低的共振频率分裂成两个频率(见图8)。在本文的数值计算中共振频率为图8中的圆点,其中有许多共振点在 η_b 偏离1较大时就不能在计算的窗口中显示,原因是上面提到的两个因素:(1)离散化引起的误差在 η_b 偏离1较大时更为明显;(2)频率的取值不会恰好取得共振透射的频率上。

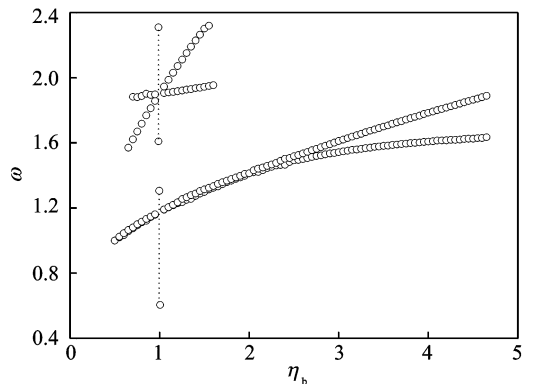


图8 状态四下共振透射时频率和原子的刚度系数与质量比值 η_b 之间的关系

在边耦合原子与主链原子总相同,而其他情形和各参量都与图8中的相同时, ω 与 η_b 的关系如图9所示。在 $\eta_b = 1$ 时,与图8一样有相同的两段共振透射带,因为此时两种原子的结构参量完全相同。当 $\eta_b \neq 1$ 时,从图9可以看到在 $\omega\eta_b$ 平面内有

4 条共振透射态曲线: 两条曲线 ω 保持不变, 两条曲线 ω 随 η_b 的增大而增大, 且两条 ω 保持不变的曲线与另外两条曲线都在 $\eta_b = 1$ 的地方相交。需要指出的是, 在文中的计算窗口中仍然有一段 η_b 的共振透射态不能显示出来, 与图 8 中共振透射态不能显示出来的原因相同。

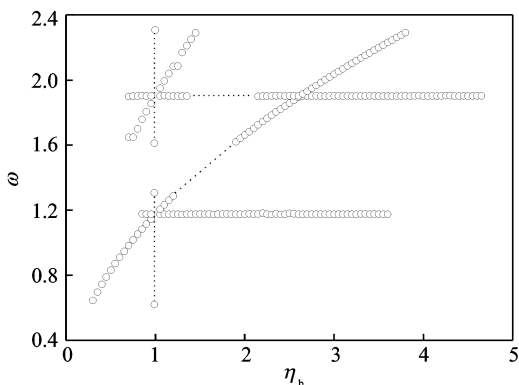


图 9 状态三下共振透射时频率和原子的刚度系数与质量比值 η_b 之间的关系

3 结束语

使用有限差分方法将波动方程离散化, 再用转移矩阵方法研究声波在短程关联边耦合一维二元合金链中的传播特性。研究表明: 在边耦合原子总是与主链原子相同或总是不相同的情况下, 如果主链原子是随机的, 则该链所有的振动态都是局域态; 如果主链上的原子以二聚体的形式出现, 则该链存在多个共振透射态。如果 η_a 保持不变, 在边耦合原子与主链原子总是不相同时, 在 η_b 较小的情况下, 有 3 个共振频率, 当 η_b 增大到 η_a 的两倍时, 最低的共振频率分裂为两个共振频率, 其余两个共振频率都随 η_b 的增大而增大; 当边耦合原子与主链原子总是相同时, 其中两个共振频率不随 η_b 的变化而变化, 其余两个共振频率随 η_b 的增大而增大。当 $\eta_b = \eta_a$ 时, 上述两种存在共振透射的情形变得完全相同, 两个频带都是共振透射态。

参考文献:

[1] Anderson P W. Absence of diffusion in certain random lattices[J]. Physical Review Letters, 1958, 109 (5): 1492-1505.

[2] Abrahams E, Anderson P W, Licciardello D C, et al. Scaling theory of localization; Absence of quantum diffusion in two dimensions[J]. Physical Review Letters, 1979, 42(10): 673-676.

[3] Dunlap D H, Wu H L, Philips P W. Absence of localization in a random-dimer model[J]. Physical Re-

view Letters, 1990, 65(1): 88-91.

- [4] Xiong S J. High-quality resonant tunneling through a random multibarrier superlattice[J]. Applied Physics Letters, 1993, 63(1): 81.
- [5] Ojeda P, Huerta-Quintanilla R, Rodríguez-Achach M. Extended states in a one-dimensional generalized dimer model[J]. Physical Review B, 2002, 65(23): 233102-233106.
- [6] Sedrakyan T. Localization-delocalization transition in a presence of correlated disorder: The random dimer model[J]. Physical Review B, 2004, 69(8): 085109-085115.
- [7] de Moura F A B F, Lyra M L. Delocalization in the 1D Anderson model with long-range correlated disorder[J]. Physical Review Letters, 1998, 81(17): 3735-3738.
- [8] Zhang G P, Xiong S J. Localization-delocalization transition in one-dimensional system with long-range correlated diagonal disorder[J]. The European Physical Journal B, 2002, 29(3): 491-495.
- [9] Kivshar Y S, Gredeskul S A, Sánchez A, et al. Localization decay induced by strong nonlinearity in disordered systems[J]. Physical Review Letters, 1990, 64(15): 1693-1696.
- [10] Hu D S, Lu X J, Zhang Y M, et al. Transport properties of a random binary side-coupled chain[J]. Chinese Physics B, 2009, 18(6): 2948-2501.
- [11] Hu D S, Zhu C P, Zhang Y M. Transport properties of a ladder with two random dimer chains[J]. Chinese Physics B, 2011, 20(1): 017104.
- [12] Hu D S, Zhang Y L, Yin X G, et al. Resonant tunneling states of a pairing ladder with random dimer chains[J]. Chinese Physics Letters, 2012, 29(2): 027101.
- [13] 邓超生, 徐慧, 刘小良, 等. 无序度对一维长程关联无序系统中局域化-退局域化转变的影响[J]. 物理学报, 2008, 57(4): 2415-2420.
- Deng Chaosheng, Xu Hui, Liu Xiaoliang, et al. Effect of disorder degree on the localization-delocalization transition in one-dimensional disordered system with long-range correlations [J]. Acta Physica Sinica, 2008, 57(4): 2415-2420.
- [14] 段玲, 胡飞, 丁建文. 准一维纳米线电子输运的梯度无序效应[J]. 物理学报, 2011, 60(11): 117201.
- Duan Ling, Hu Fei, Ding Jianwen. Effects of gradient disorder on electronic transport in quasi-one-dimensional nanowires[J]. Acta Physica Sinica, 2011, 60(11): 117201.
- [15] He S, Maynard J D. Detailed measurements of ine-

- lastic scattering in Anderson localization[J]. *Physical Review Letters*, 1986, 57(25): 3171-3174.
- [16] Bayer G, Niederdränk T. Weak localization of acoustic waves in strongly scattering media [J]. *Physical Review Letters*, 1993, 70(25): 3884-9887.
- [17] Hou Z L, Fu X J. Computational method to study the transmission properties of phononic crystals [J]. *Physical Review B*, 2004, 70(1):014304-014311.
- [18] 付志强, 林书玉, 陈时, 等. 一维指数形变截面有限周期声子晶体的研究[J]. *物理学报*, 2012, 61(19): 194301.
Fu Zhiqiang, Lin Shuyu, Chen Shi, et al. Investigation of one-dimensional finite phononic crystal with exponential section[J]. *Acta Physica Sinica*, 2012, 61(19): 194301.
- [19] 曹永军, 杨旭. 广义 Fibonacci 准周期结构声子晶体透射性质的研究[J]. *物理学报*, 2008, 57(6): 3620-3624.
Cao Yongjun, Yang Xu. Transmission properties of the generalized Fibonacci quasi-periodical phononic crystal[J]. *Acta Physica Sinica*, 2008, 57(6): 3620-3624.
- [21] Shahbazi F, Bahraminasab A, Mehdi Vaez Allaei S, et al. Localization of elastic waves in heterogeneous media with off-diagonal disorder and long-range correlations[J]. *Physical Review Letters*, 2005, 94(16): 165505.
- [22] Sepehrinia R, Bahraminasab A, Sahimi M, et al. Dynamic renormalization group analysis of propagation of elastic waves in two-dimensional heterogeneous media[J]. *Physical Review B*, 2008, 77(1): 014203.
- [23] Costa A E B, de Moura F A B F. Absence of localized acoustic waves in a scale-free correlated random system[J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2011, 23(6): 065101.
- [24] Costa A E B, de Moura F A B F. Extended acoustic waves in a one-dimensional aperiodic system[J]. *The European Physical Journal B*, 2011, 79(3): 253-256.
- [25] Esmailpour A, Esmailpour M, Sheikhan A, et al. Localization properties of acoustic waves in the random-dimer media[J]. *Physical Review B*, 2008, 78(13): 134206.
- [26] Barros D F, Costa A E B, de Moura F A B F. Extended acoustic modes in random systems with n -mer short range correlations[J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2011, 23(34): 345404.
- [27] Costa A E B, de Moura F A B F. Extended acoustic waves in diluted random systems[J]. *The European Physical Journal B*, 2011(80):59-63.