第 50 卷 第 3 期 2001 年 3 月
1000-3290/2001/50(03)/0394-04
物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA
Vol. 50, No. 3, March, 2001

带有非对称双阱势的氢键链中的扭结孤子激发

袁德荣　乔灵芝
（湖北大学物理学与电子技术学院,武汉　430062）
（2000 年 2 月 21 日收到；2000 年 5 月 23 日收到修改稿）

阻尼和外电场的作用使得带有非对称双阱势的氢键链存在扭结孤子激发. 计算了孤子的迁移率,它包含了 φ^4 链的结果.

关键词：氢键链，非对称双阱势，扭结孤子，迁移率
PACC：0340

1　引　　言

对于带有对称双阱势的氢键链的质子导电行为,已有许多研究[1—4],发现了孤子型的导电机制. 考虑到某些准一维氢键晶体中,质子两侧近邻的重离子不对称,对质子应提供一个非对称的双阱势,人们又研究了带有非对称双阱势的氢键链中的孤子激发[5,6],结果发现只存在钟形孤子或钟形孤子对,就电荷分布而言它们相当于链中的一个电偶极子或一对电偶极子,其运动不会引起电荷的迁移,对电导无贡献. 不过,实际的氢键晶体中总是存在阻尼损耗的,当考虑阻尼和外电场的作用时,带有非对称双阱势的氢键链中仍会存在扭结孤子,这种非线性激发将参与导电. 本文将证明带有非对称双阱势的氢键链有严格的扭结孤子解,并导出迁移率的一般表达式.

2　模型与运动方程

考虑质子子晶格和重离子子晶格之间具有线性耦合相互作用的情况,在连续极限近似下,氢键链的哈密顿量为[6]

$$H = \frac{1}{l}\int\left[\frac{1}{2}m\left(u_t^2 + c_0^2 u_x^2\right) + \frac{1}{2}M\left(\eta_t^2 + v_0^2\eta_x^2\right) + U(u) + Ku_x\eta_x\right]\mathrm{d}x, \tag{1}$$

其中 l 是晶格常数,u 是质子位移,m 是质子的质量,η 是质量为 M 的重离子的相对位移,c_0 和 v_0 是质子子晶格和重离子子晶格的特征声速,K 是两个子晶格之间的耦合常数,$U(u)$ 是非对称的双阱势

$$U(u) = \frac{1}{2}Au^2 - \frac{1}{3}Bu^3 + \frac{1}{4}Cu^4, \tag{2}$$

其中 A,B,C 是正常数. 势 $U(u)$ 有双阱的条件是 $B^2 > 4AC$. 当 $\frac{9}{2}AC > B^2 > 4AC$ 和 $B^2 > \frac{9}{2}AC$ 时,双阱势是非对称的,两个阱底不等深；当 $B^2 = \frac{9}{2}AC$ 时,双阱势是对称的,两个阱底等深.

考虑外电场和阻尼的影响,与(1)式相应的运动方程是

$$m\left(u_{tt} - c_o^2 u_{xx}\right) - K\eta_{xx} + m\lambda u_t + \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}u} = 0,$$
$$M\left(\eta_u - v_0^2\eta_{xx}\right) - Ku_{xx} = 0, \tag{3}$$

λ 是质子子晶格的阻尼系数,V 是包含了外电场力的势函数

$$V(u) = \frac{1}{2}Au^2 - \frac{1}{3}Bu^3 + \frac{1}{4}Cu^4 - eEu, \tag{4}$$

其中 E 是外电场,e 是有效电荷. 方程(3)中略去了重离子的阻尼以及外电场对重离子的作用,这是因为当两个子晶格耦合不太强时,η 一般比 u 小得多,这种近似是合理的.

现在寻求两个子晶格协同运动的运动孤子解,令 $s = x - vt$,即在以速度 v 运动的参考系中讨论,这时解写为 $u = u(s)$,$\eta = qu(s)$,q 是待定常数,方程(3)化为

$$\left[m\left(c_0^2 - v^2\right) + Kq\right]u_{ss} + m\lambda v u_s = \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}u},$$
$$q = -\frac{K}{M\left(v_0^2 - v^2\right)}. \tag{5}$$

3 扭结孤子解

将方程(5)写为

$$\alpha u_{ss} + \beta u_s = (u - u_1)(u - u_2)(u - u_3), \quad (6)$$

其中

$$\alpha = \frac{m(c_0^2 - v^2) + Kq}{C}, \quad \beta = \frac{m\lambda v}{C}, \quad (7)$$

u_1, u_2, u_3 是 $V(u)$ 的三个极值点,即$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}u}$ 的三个零点,分别是

$$u_1 = \frac{B}{3C}\left(1 + 2\sqrt{1 - \frac{3AC}{B^2}}\cos\frac{\varphi}{3}\right),$$

$$u_2 = \frac{B}{3C}\left(1 - 2\sqrt{1 - \frac{3AC}{B^2}}\cos\frac{\pi + \varphi}{3}\right),$$

$$u_3 = \frac{B}{3C}\left(1 - 2\sqrt{1 - \frac{3AC}{B^2}}\cos\frac{\pi - \varphi}{3}\right), \quad (8)$$

$$\varphi = \arccos W,$$

$$W = \left(1 - \frac{9AC}{2B^2} + \frac{27eEC^2}{2B^3}\right)\left(1 - \frac{3AC}{B^2}\right)^{-3/2}. \quad (9)$$

先考虑无外电场情况,$E = 0$,这时有

$$u_1 = \frac{B}{2C}\left(1 + \sqrt{1 - \frac{4AC}{B^2}}\right),$$

$$u_2 = \frac{B}{2C}\left(1 - \sqrt{1 - \frac{4AC}{B^2}}\right),$$

$$u_3 = 0. \quad (10)$$

对于 $E = 0$,只要 $B^2 > 4AC$,$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}u}$一定有三个不同的实零点,且 $u_1 > u_2 > u_3$,$V(u)$ 在 u_1, u_3 取极小值,在 u_2 取极大值. 当 $B^2 = \frac{9}{2}AC$ 时,$V(u_1) = V(u_3)$;当 $B^2 > \frac{9}{2}AC$ 时,$V(u_1) < V(u_2)$;当 $\frac{9}{2}AC > B^2 > 4AC$ 时,$V(u_1) > V(u_2)$. 后两种情况均为非对称双阱势. 现在考虑 $E \neq 0$ 的情况,外电场 E 将使得双阱势有一个倾斜. 定义临界电场 $E_c = \frac{B^3}{27eC^2}$,如果 $E > E_c$,则(9)式中 $W > 1$,这意味着双阱势消失. 如果 $E < E_c$,对于势参数 A, B, C 的一定取值范围,仍有双阱势,只是势函数与 $E = 0$ 有所不同,极值点的位置和极值的大小都将发生变化. 对于给定的 $E < E_c$,双阱势的存在条件是

$$\frac{12AC}{1 - 2\sqrt{1 + 8\varepsilon}\cos\frac{\pi + \theta}{3}} > B^2 > \frac{12AC}{1 + 2\sqrt{1 + 8\varepsilon}\cos\frac{\theta}{3}}, \quad (11)$$

其中

$$\varepsilon = \frac{E}{E_c} < 1, \quad \theta = \arccos\frac{1 - 20\varepsilon - 8\varepsilon^2}{(1 + 8\varepsilon)^{3/2}}. \quad (12)$$

在(11)式给出的势参数取值范围内,仍有 $u_1 > u_2 > u_3$,且 u_1, u_3 对应势阱,u_2 对应势垒. 对于小场极限,可以得到如下的关系式:

$$\cos\frac{\varphi}{3}\bigg|_{E=0} = \frac{1 + 3\sqrt{1 - 4AC/B^2}}{4\sqrt{1 - 3AC/B^2}},$$

$$\cos\frac{\pi + \varphi}{3}\bigg|_{E=0} = \frac{-1 + 3\sqrt{1 - 4AC/B^2}}{4\sqrt{1 - 3AC/B^2}},$$

$$\cos\frac{\pi - \varphi}{3}\bigg|_{E=0} = \frac{1}{2\sqrt{1 - 3AC/B^2}}. \quad (13)$$

现在求方程(6)的扭结解. 对电导有贡献的扭结解应满足边界条件:$s \to \infty, u \to u_3$;$s \to -\infty, u \to u_1$ 或者 $s \to \infty, u \to u_1$;$s \to -\infty, u \to u_3$. 按照相轨道法[7],可以得到如下解式:

$$u = \frac{u_1 + u_3}{2} - \frac{u_1 - u_3}{2}\tanh\frac{s}{2\Delta}. \quad (14)$$

扭结的宽度 Δ 和扭结的运动速度 v 如下:

$$\Delta = \delta\frac{\sqrt{2[m(c_0^2 - v^2) + Kq]}}{\sqrt{C}(u_1 - u_3)}, \quad (15)$$

$$v = \frac{B(u_1 - u_3)\Delta}{m\lambda}\sqrt{1 - \frac{3AC}{B^2}}\cos\frac{\pi + \varphi}{3}, \quad (16)$$

其中 $\delta = \pm 1$ 是扭结的极性,$\delta = 1$ 对应向右运动的反扭结,$\delta = -1$ 对应向左运动的扭结. 由于扭结的电荷密度 $\propto -\frac{\partial u}{\partial x}$,可见这两种情况都意味着扭结携带电荷向着电场的正向迁移.

联立(15)和(16)式,即可得到扭结速率 v 的表达式

$$v = \frac{(1 + Kq/mc_0^2)^{1/2}c_0}{\left[1 + m\lambda^2C/2B^2(1 - 3AC/B^2)\cos^2\frac{\pi + \varphi}{3}\right]^{1/2}}. \quad (17)$$

将(5)式中 q 表达式代入(17)式,得到关于速率 v 的一个方程:

$$(1 + h)v^4 - [c_0^2 + (1 + h)v_0^2]v^2 + (1 - g)c_0^2v_0^2 = 0, \quad (18)$$

其中

$$h = \frac{m\lambda^2 C}{2B^2(1 - 3AC/B^2)\cos^2\frac{\pi + \varphi}{3}}, \tag{19}$$

$$g = \frac{K^2}{mMc_0^2 v_0^2}, \tag{20}$$

h 是与系统阻尼相关的因子,g 是两个子晶格的耦合强度因子,通常 $g \ll 1$,即弱耦合情况. 例如对于冰晶体,取 $K = 0.1\text{eV}$,$c_0 = 1.1\times10^6\text{cm/s}$[1],$v_0 = 0.1c_0$,有 $g = 0.05$. 因此对方程(18)的解,取小量 g 的一级近似,得

$$v_{\text{fast}}^2 = \frac{c_0^2}{1+h} + \frac{gc_0^2 v_0^2}{c_0^2 - (1+h)v_0^2},$$

$$v_{\text{slow}}^2 = v_0^2 - \frac{gc_0^2 v_0^2}{c_0^2 - (1+h)v_0^2}, \tag{21}$$

其中 v_{fast} 和 v_{slow} 分别是快模孤子速率和慢模孤子速率,就外电场对孤子迁移的效果而言,v_{fast}^2 的第二项对迁移率的贡献是小量,v_{slow}^2 的第一项是常数,第二项对迁移率的贡献也是小量,故在 $g \ll 1$ 和 $v_0 \ll c_0$ 的近似下,孤子速率可表达为

$$v = \frac{c_0}{\left[1 + m\lambda^2 C/2B^2\left(1 - \frac{3AC}{B^2}\right)\cos^2\frac{\pi+\varphi}{3}\right]^{1/2}}. \tag{22}$$

亦即对于弱耦合情况,可以足够精确地认为重离子子晶格是被冻结的.

4 迁移率

考虑弱场情况,$E \ll E_c$,利用(9),(13),(22)式,直接计算出扭结孤子的微分迁移率 μ 为

$$\mu = \left.\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}E}\right|_{E=0} = \frac{24ec_0 m\lambda^2 C^2\left(1 + \sqrt{1 - \frac{4AC}{B^2}}\right)}{AB^3\sqrt{1 - \frac{4AC}{B^2}}\left[\left(3\sqrt{1 - \frac{4AC}{B^2}} - 1\right)^2 + \frac{8m\lambda^2 C}{B^2}\right]^{3/2}}. \tag{23}$$

当 $B^2 = \frac{9}{2}AC$ 和 $E = 0$ 时,(4)式将给出对称双阱势

$$V(u) = \frac{1}{2}Au^2\left[1 - \frac{u}{2u_0}\right]^2, \quad u_0 = \sqrt{\frac{A}{2C}}. \tag{24}$$

在(23)式中取 $B^2 = \frac{9}{2}AC$,给出

$$\mu = \frac{3ec_0}{A\lambda}\sqrt{\frac{2C}{m}}. \tag{25}$$

这就是带有对称双阱势的氢键链中扭结孤子在外电场中的迁移率. 现在将这一结果与以前的研究工作做一比较. 在文献[2]中,采用的双阱势是 φ^4 势:

$$U(u) = \varepsilon_0\left(1 - \frac{u^2}{u_0^2}\right)^2. \tag{26}$$

对(26)式作平移变换,令 $u = \xi - u_0$,此式化为

$$U(u) \to U(\xi) = \frac{4\varepsilon_0}{u_0^2}\xi^2\left(1 - \frac{\xi}{2u_0}\right)^2. \tag{27}$$

从 φ^4 势出发,文献[2]利用微扰法导出的迁移率公式是

$$\mu = \frac{3ec_0}{2\lambda\sqrt{2m\varepsilon_0}}. \tag{28}$$

平移变换显然不会影响迁移率的计算结果. 将(27)与(24)式比较,相当于作代换:$\varepsilon_0 \to \frac{A^2}{16C}$. 对(28)式施行这一代换,恰好得到了(25)式. 这就从对称双阱势的特例肯定了所导出的一般表达式(23). 它表明(23)式包含了 φ^4 链的结果.

感谢徐济仲教授对作者的帮助.

[1] A. Cordon, *Physica*, **B146** (1987), 373.

[2] J. Z. Xu, *Solid State Commun.*, **76** (1990), 557.

[3] E. S. Kryachko, *Solid State Commun.*, **65** (1988), 1609.

[4] A. S. Davydov, Soliton in Molecular Systems, 2nd ed. (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Holland, 1991), p. 303.

[5] A. Gordon, *Solid State Commun.*, **68** (1988), 885.

[6] J. Z. Xu, *J. Phys.: Condens. Matter*, **7** (1995), 269.

[7] A. Gordon, *Physica*, **B138** (1986), 239.

KINK SOLITON EXCITATION IN HYDROGEN-BONDED CHAIN WITH ASYMMETRIC DOUBLE-WELL POTENTIALS

YUAN DE-RONG　QIAO LING-ZHI
(*Faculty of Physics and Electronic Technology*, *Hubei University*, *Wuhan*　430062, *China*)
(Received 21 February 2000; revised manuscript received 23 May 2000)

ABSTRACT

The damping force and the external electric field caused the kink soliton excitation in a hydrogen-bonded chain with asymmetric double-well potentials. The formula of the soliton mobility was derived, from which we obtained the result of the φ^4 chain as well.

Keywords: hydrogen-bonded chain, asymmetric double-well potential, kink soliton, mobility
PACC: 0340