第 53 卷 第 9 期 2004 年 9 月
1000-3290/2004/53(09)/2811-05

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.53, No.9, September, 2004

一维分子链中激子与声子的相互作用和呼吸子解*

徐 权[1)†] 田 强[2)]

1)(大庆高等专科学校物理系,大庆 163712)

2)(北京师范大学物理系,北京 100875)

(2003 年 9 月 26 日收到;2004 年 1 月 8 日收到修改稿)

运用连续极限近似,求解声子与激子相互作用的运动方程,得到了简谐分子链和非简谐分子链中晶格振动的孤子解,在考虑三次非简谐势的情况下,一维分子链晶格振动具有扭结孤子解,在考虑具有四次非简谐势的情况下,得到一维分子链晶格振动具有呼吸子解.

关键词:一维分子链,激子,声子,孤子,呼吸子,非线性效应

PACC:0320,0430

1. 引 言

一维系统中的孤子形成机理和应用研究,近年来取得了很多进展.生物分子链中能量传输的孤子模型引起人们的极大关注[1],聚乙炔分子链中的拓扑孤子及其在电场作用下输运现象的研究不断有新的成果[2,3],一维系统中的电场畴孤子[4]、光孤子和呼吸子[5]、晶格振动的自诱导禁带孤子[6,7]、阻尼作用下非线性晶格的孤子[8]以及各种近似条件下的非线性元激发[9]等一直是研究的热点问题.

一维系统中晶格振动孤子的形成与输运、生物分子链中孤子能量传输等方面的研究,都与分子链中声子与激子的相互作用有关.本文利用连续极限的方法[10],首先分析一维分子简谐链中激子与声子的相互作用,然后进一步分析非简谐链中激子与声子的相互作用和孤子解以及呼吸子解.

2. 一维分子简谐链中声子与激子的相互作用

一维简谐链中声子与激子相互作用的总哈密顿,在考虑最近邻作用近似下为[10,11]

$$
\begin{aligned}
H &= H_{\mathrm{ex}} + H_{\mathrm{ph}} + H_{\mathrm{ex-ph}} \\
&= J\sum_n\left[2|\psi_n|^2 - \psi_n^*(\psi_{n+1}+\psi_{n-1})\right] \\
&\quad + \sum_n\left[\frac{p_n^2}{2m} + \frac{1}{2}k(u_{n+1}-u_n)^2\right] \\
&\quad + \chi\sum_n\left[|\psi_n|^2(u_{n+1}-u_{n-1})\right],
\end{aligned}
\tag{1}
$$

式中 ψ_n 为格点 n 处激子的波函数,J 是激子在相邻格点间传输的矩阵元;m,u_n,p_n 分别为分子的质量、位移和动量;k 是 Hook 系数;哈密顿中最后一项是声子与激子之间的相互作用,χ 是描写声子与激子相互作用强度的参量.

如果假定只有一个激子,则波函数 ψ_n 的归一化条件为

$$
\sum_n |\psi_n|^2 = 1. \tag{2}
$$

利用 $\dot{p}_n = \ddot{u}_n = -\partial H/\partial u_n = -\frac{\partial}{\partial u_n}[V(u_n - u_{n+1}) + V(v_{n+1} - u_n)]$ 和 $\mathrm{i}\dot{B} = \frac{\partial H}{\partial B^*}$,这里的 $V(u_i - u_j)$ 是 FPU 势,由(1)式可以得出关于分子振动位移 u_n 和激子波函数 ψ_n 的运动方程为

$$
\begin{aligned}
m\ddot{u}_n &= k(u_{n+1}+u_{n-1}-2u_n) \\
&\quad + \chi(|\psi_{n+1}|^2 - |\psi_{n-1}|^2),
\end{aligned}
\tag{3a}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}\dot{\psi}_n &= -J(\psi_{n+1}+\psi_{n-1}-2\psi_n) \\
&\quad + \chi(u_{n+1}-u_{n-1})\psi_n.
\end{aligned}
\tag{3b}
$$

---

* 教育部高等学校骨干教师资助计划项目资助的课题.

† E-mail:xuquan@2911.net;Tel:0459-5510062.

下面在连续极限[10]下讨论方程(3). 首先令 $x_n = na$ 和 $u_n = u(x_n, t)$, $\psi_n = \psi(x_n, t)$, $(n = 1, 2, \cdots, N-1)$, 且 $u_0 = u_N = \psi_0 = \psi_N = 0$, 这就意味着 $u_{u\pm 1} = u(x_n \pm a, t)$, $\psi_{n\pm 1} = \psi(x_n \pm a, t)$, 这里的 a 是晶格常数, 则 $u_{n\pm 1}$ 和 $\psi_{n\pm 1}$ 的 Taylor 展开为

$$u_{n\pm1} = u_n \pm a\frac{\partial u_n}{\partial x} + \frac{a^2}{2}\frac{\partial^2 u_n}{\partial x^2} + \cdots \tag{4a}$$

$$\psi_{n\pm1} = \psi_n \pm a\frac{\partial \psi_n}{\partial x} + \frac{a^2}{2}\frac{\partial^2 \psi_n}{\partial x^2} + \cdots \tag{4b}$$

当 $x_n \to x$, $u_n \to u(x, t)$, $\psi_n \to \psi(x, t)$ 时, 方程(3)变为

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{ka^2}{m}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{2a^2\chi}{m}\frac{\partial|\psi|^2}{\partial x} + O(a^3), \tag{5a}$$

$$\mathrm{i}\frac{\partial \psi}{\partial t} = -Ja^2\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + 2a\chi\frac{\partial u}{\partial x}\psi + O(a^3). \tag{5b}$$

令 $v_0^2 = \frac{ka^2}{m}$, $\varepsilon = \frac{2\chi}{k}$, $\gamma = -Ja^2$, $\lambda = 2a\chi$, 且忽略三阶小量 $O(a^3)$, 则方程(5)写为

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - v_0^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \varepsilon v_0^2\frac{\partial|\psi|^2}{\partial x}, \tag{6a}$$

$$\mathrm{i}\frac{\partial \psi}{\partial t} = \gamma\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \lambda\frac{\partial u}{\partial x}\psi. \tag{6b}$$

对方程(6)讨论如下两种情况的解:

1) 当 $\psi = 0$, 即没有激子的情况, 方程(6a)为

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - v_0^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \tag{7}$$

这是标准的波动方程, 其解为

$$u(x, t) = u_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}(qx - \Omega t)}, \tag{8}$$

式中 Ω 和 q 分别为介质弹性波的角频率及波矢, 将(8)式代入(7)式, 得到

$$\Omega^2 = v_0^2 q^2 = \frac{ka^2}{m}q^2 \tag{9}$$

和声波的传播速度

$$v_0 = \frac{\Omega}{q} = \sqrt{\frac{ka^2}{m}}. \tag{10}$$

2) 由于在激子与声子相互作用系统中, 存在两类非线性因素, 一类是内部非线性, 即晶格的非线性势; 另一类是外部非线性, 即激子与声子的相互作用, 两者都使晶格产生局域振动. 大量的文献从理论和实验上也都证明了在激子与声子相互作用的系统中, 晶格的振动存在稳定的孤子解[11—20]. 而晶格振动孤子的激发和稳定性与激子的浓度有密切关系[12—14]. 既然在激子与声子相互作用系统中一定存在局域振动, 下面只讨论晶格的局域振动情况. 在连续极限的情况下, 晶格可近似地看成弹性介质, 那么晶格的振动位移即可以看成是弹性介质的形变, 则相应的应变为 $\frac{\partial u}{\partial x}$, 当晶格振动具有稳定的孤子解的时候, 在孤子线度 $\mathrm{d}x$ 内, 总的应变应该是不变的(孤子的形状不变), 则有 $\frac{\partial u}{\partial x}\mathrm{d}x$ 应为常量, 而与声子发生相互作用的所有激子也必在此范围内, 即同晶格杂质的局域振动一样[21], 局域振动必在以激子为中心的小范围之内. 而且激子总数也必定为一常数(否则晶格振动的解也要发生变化), 即 $|\psi|^2\mathrm{d}x$ 为常数, 两个常数之间一定存在线性关系即 $|\psi|^2\mathrm{d}x = r\frac{\partial u}{\partial x}\mathrm{d}x$, 亦即激子浓度与晶格振动位移之间存在 $|\psi|^2 = r\frac{\partial u}{\partial x}$ 的线性关系, r 为线性系数, r 可取任意实数, 即 $v^2 = (1 + r\varepsilon)v_0^2$, $p = \lambda/r$, 则方程(6)可改写为

$$u_{tt} = v^2 u_{xx}, \tag{11a}$$

$$\mathrm{i}\psi_t = \gamma\psi_{xx} + p|\psi|^2\psi. \tag{11b}$$

当 $\gamma = 1$ 时, 方程(11b)是标准的 NLS 方程, 具有包络孤子解[22]

$$\psi = \sqrt{c}\,\mathrm{sech}\sqrt{c}(x - vt)\cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(-\frac{v}{2}\right)(x - vt) + \mathrm{i}\omega t}, \tag{12}$$

式中 $c = -\frac{4\omega + v^2}{2p} > 0$, 这里 ω 是常数. 由 $|\psi|^2 = r\frac{\partial u}{\partial x}$ 方程组(11)当 r 取任意实数时有如下解:

$$u = \frac{\sqrt{c}}{r}\mathrm{th}\sqrt{c}(x - vt),$$

$$\psi = \sqrt{c}\,\mathrm{sech}\sqrt{c}(x - vt)\cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(-\frac{v}{2}\right)(x - vt) + \mathrm{i}\omega t}, \tag{13}$$

其中晶格振动解为扭结孤子解, 如图 1 所示.

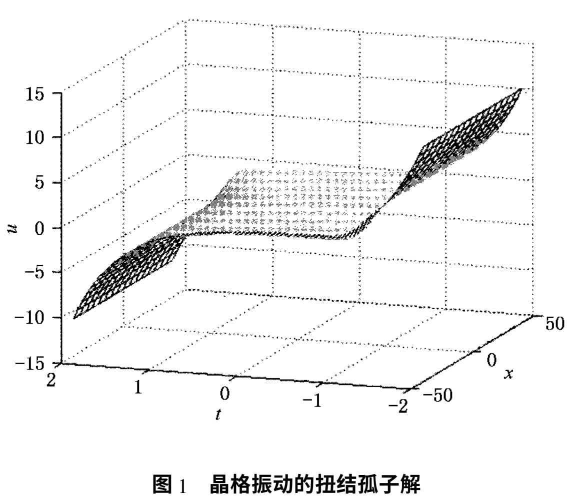

图 1 晶格振动的扭结孤子解

通过上面讨论可知, 一维分子简谐链在连续极限下, 当不考虑声子与激子的相互作用时, 声子按弹

性波以速度 v_0 在晶格中传播；而当考虑声子与激子的相互作用时，一维分子简谐链的晶格振动具有扭结孤子解.

3. 一维分子非简谐链中声子与激子的相互作用

下面进一步考虑一维分子链中晶格振动势函数的非简谐项引起的效应. 首先考虑势函数的三次非简谐项，这时声子系统的哈密顿为

$$H_{\mathrm{ph}} = \frac{1}{2}\sum\left[\frac{p_n^2}{m} + k(u_{n+1} - u_n)^2 + \frac{2}{3}\alpha k(u_{n+1} - u_n)^3\right], \tag{14}$$

这时系统的哈密顿为

$$\begin{aligned} H &= H_{\mathrm{ex}} + H_{\mathrm{ph}} + H_{\mathrm{ex-ph}} \\ &= J\sum_n \left[2|\psi_n|^2 - \psi_n^*(\psi_{n+1} + \psi_{n-1})\right] \\ &\quad + \sum_n\left[\frac{p_n^2}{2m} + \frac{1}{2}k(u_{n+1} - u_n)^2 + \frac{1}{3}\alpha k(u_{n+1} - u_n)^3\right] \\ &\quad + \chi\sum_n\left[|\psi_n|^2(u_{n+1} - n_{n-1})\right]. \end{aligned} \tag{15}$$

与导出(6)式类似，由(15)式可以得到关于分子振动位移 u_v 和激子波函数 ψ_n 的运动方程

$$m\ddot{u}_n = k(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n)(1 + \alpha(u_{n+1} - u_{n-1})) + \chi(|\psi_{n+1}|^2 - |\psi_{n-1}|^2), \tag{16a}$$

$$\mathrm{i}\dot{\psi}_n = -J(\psi_{n+1} + \psi_{n-1} - 2\psi_n) + \chi(u_{n+1} - u_{n-1})\psi_n. \tag{16b}$$

同样，在连续极限下，方程(16)可改写为

$$u_{tt} = \frac{ka^2}{m}u_{xx} + 2\alpha a\frac{ka^2}{m}u_x u_{xx} + \frac{ka^4}{12m}u_{xxxx} + 2a^2\chi(|\psi|^2)_x + O(\chi a^3, a^5), \tag{17a}$$

$$\mathrm{i}\psi_t = -Ja^2\psi_{xx} + 2a\chi u_x\psi + O(\chi a^3, Ja^3). \tag{17b}$$

令 $v_0^2 = \frac{ka^2}{m}$，$J = -\frac{1}{a^2}$，$\lambda = 2a^2\chi$，可将方程(17)改写为

$$u_{tt} = v_0^2 u_{xx} + 2\alpha a v_0^2 u_x u_{xx} + \frac{v_0^2 a^2}{12}u_{xxxx} + 2a^2\chi(|\psi|^2)_x + O(\chi a^3, a^5), \tag{18a}$$

$$\mathrm{i}\psi_t = \psi_{xx} + \lambda u_x\psi + O(\chi a^3, Ja^3). \tag{18b}$$

下面讨论方程(18)的两种情况：

1) 当 $B = 0$，即没有激子的情况，方程(18a)为

$$u_{tt} = v_0^2 u_{xx} + 2\alpha a v_0^2 u_x u_{xx} + \frac{v_0^2 a^2}{12}u_{xxxx} + O(a^5). \tag{19}$$

设 $u \to \phi(\xi, \tau)$，$\xi = x - v_0 t$，$\tau = v_0\alpha t$，$\delta^2 = \frac{a^2}{24\alpha}$，则(19)式变为

$$\phi_{\xi\tau} + a\phi_\xi\phi_{\xi\xi} + \delta^2\phi_{\xi\xi\xi\xi} + O(a^3) = 0. \tag{20}$$

令 $\varphi = \phi_\xi$，且忽略小量 $O(a^3)$，这时，方程(20)就是 KdV 方程：

$$\varphi_\tau + a\varphi\varphi_\xi + \delta^2\varphi_{\xi\xi\xi} = 0, \tag{21}$$

该方程有如下孤子解

$$\varphi = \frac{3v_1}{a}\mathrm{sech}^2\left\{\frac{\sqrt{v_1}}{2\delta}[\xi - v_1\tau]\right\}, \tag{22}$$

这里 v_1 是参数，而

$$u = \frac{6\delta\sqrt{v_1}}{a}\mathrm{th}\left\{\frac{\sqrt{v_1}}{2\delta}[x - (1 + \alpha a v_1)v_0 t]\right\}, \tag{23}$$

(23)式表明，没有激子的情况下，晶格振动的三次非简谐势，使一维分子链的晶格振动也具有扭结孤子解；在一维分子简谐链中，声子与激子的相互作用，也可能产生晶格振动扭结孤子解；这两种情况下的孤子解类似.

2) 当 $|\psi|^2 = r\frac{\partial u}{\partial x}$，方程(18a)具有(19)的形式，而(18b)是 NLS 方程，所以方程组(18)当满足 $r = ac/3v_3$ 时有解

$$u = \frac{\sqrt{c}}{r}\mathrm{th}\sqrt{c}(x - v_2 t),$$

$$\psi = \sqrt{c}\,\mathrm{sech}\sqrt{c}(x - v_2 t)\cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(-\frac{v_2}{2}\right)(x - v_2 t) + \mathrm{i}\omega t}. \tag{24}$$

这里，$v_2 = \left(\sqrt{1 + \frac{m\chi r}{k}} + \alpha v_3\Big/\sqrt{1 + \frac{m\chi r}{k}}\right)v_0$，$v_3$ 为参量，由解(24)可知，同时考虑声子与激子的相互作用和晶格振动三次非简谐势的影响，一维分子链的晶格振动仍具有扭结孤子解.

进一步考虑晶格振动四次非简谐势，在(15)式中将三次非简谐项改换为四次非简谐项，类似的推导过程，得到一维分子链晶格振动具有呼吸子解

$$u = \sqrt{c}\,\mathrm{arctg}[\mathrm{sh}\sqrt{c}(x - vt)], \tag{25}$$

如图 2 所示.

4. 结　论

对于一维分子链，通过求解声子与激子相互

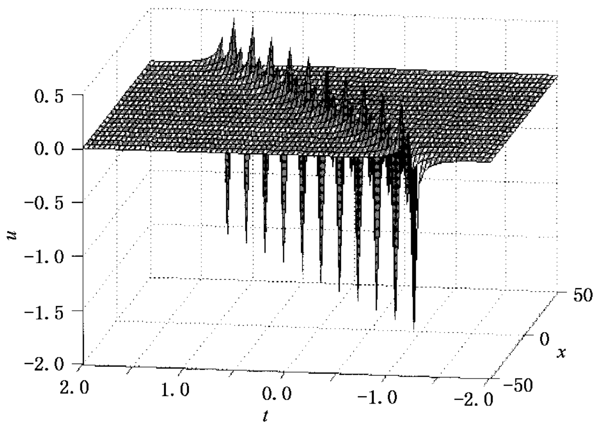

图 2 晶格振动的呼吸子解

作用的运动方程,分析激子对晶格振动的影响.在连续极限近似下,分别对简谐分子链和非简谐分子链进行了讨论.得到:

1.在考虑声子与激子的相互作用时,原来线性的一维分子简谐链,具有非线性的输运性质,晶格振动具有扭结孤子解.

2.在不考虑声子与激子的相互作用时,一维分子非简谐链的晶格振动具有扭结孤子解;同时考虑声子与激子的相互作用和晶格振动三次非简谐势,晶格振动也具有类似的扭结孤子解.

3.存在声子与激子的相互作用时,晶格振动四次非简谐势导致一维分子链晶格振动具有呼吸子解.

[1] Cottingham J P and Schweitzer J W 1989 *Phys. Rev. Lett.* **62** 1792
[2] Johansson A and Stafstrom S 2002 *Phys. Rev.* B **65** 5207
[3] Tian Q, Zhou H and Zhu R 2002 *Science in China* A **45** 884
[4] Tian Q and Wu C 1999 *Phys. Lett.* A **262** 83
[5] Tian Q and Wang J 2002 *Inter. J. Theor. Phys.* **41** 1275
[6] Kivshar Y S 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 3055
[7] Alfimov G and Konotop V V 2000 *Physica* D **146** 307
[8] Wang D L *et al* 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1201 (in Chinese)[王登龙 等 2001 物理学报 **50** 1201]
[9] Feng P C and Wang D L 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1332 (in Chinese)[冯培成、王登龙 2003 物理学报 **52** 1332]
[10] Tuszynski J A and Jorgensen M F 1999 *Phys. Rev.* E **59** 4374
[11] Mingaleev S F, Christiansen P L and Gaididei YU B 1999 *Journal of Biological Physics* **25** 41
[12] Maskovic Lj D, Tosic R and Maksimovic B S 1998 *Physca* D **113** 293
[13] Gerd Venzl and Sighart F Fischer 1985 *Phys. Rev.* B **32** 6437
[14] Litvinov V I and Razeghi M 1998 *Phys. Rev.* B **59** 9783
[15] Ell C, Ivanov A L and Haug H 1997 *Phys. Rev.* B **57** 9663
[16] Thilagam A 1997 *Phys. Rev.* B **56** 9798
[17] Sonnek Mathias, Eiermann Hubert, Wagner Max 1994 *Phys. Rev.* B **51** 905
[18] Herbert M. Shore, Leonard M. Sander 1972 *Phys. Rev.* B **7** 4537
[19] Wellein G, Fehske H 1998 *Phys. Rev.* B **58** 6208
[20] Donlagic Nias, Ostreich Thomas 1998 *Phys. Rev.* B **59** 7493
[21] Xu Q 2003 *College Physics* **10** 20 (in Chinese)[徐 权 2003 大学物理 **10** 20]
[22] Ablowitz M J and Clarkson P A 1991 *London Mathematical Society Note Series* **149** 17

The interaction of excitons with phonons and solution of breathers in one-dimensional molecular Chain*

Xu Quan[1)] Tian Qiang[2)]

[1)] (*Department of Physics*, *Daqing Advanced College*, *Daqing* 163712, *Chain*)

[2)] (*Department of Physics*, *Beijing Normal University*, *Beijing* 100875, *Chain*)

(Received 26 September 2003; revised manuscript received 8 January 2004)

Abstract

By virtue of the method of continuum limit, we obtained the solitons of the vibration of lattice in one-dimensional harmonic and anharmonic molecule chains, through which the equations of exciton and phonon are solved. On considering the cubic anharmonic potential, the vibration of lattice in one-dimensional molecule chain has a solution of kink soliton and on considering the quartic anharmonic potential, the vibration of lattice in one-dimensional molecule chain has a solution of breathers.

Keywords: one-dimensional molecular chain, exciton, phonon, soliton, breathers, nonlinear effect

PACC: 0320, 0430

* Project supported by the Foundation for University Key Teachers from the Ministry of Education of China.