

一维分子晶体激子-孤子运动的激子运动学和动力学非线性效应*

罗质华[†] 余超凡

(广东教育学院物理系, 广州 510303)

(2007 年 9 月 3 日收到, 2007 年 11 月 22 日收到修改稿)

基于一维分子晶体相邻分子间静态作用势和分子间的(电)偶极-偶极相互作用, 采用分子投影算符表示一维分子晶体激子系统的模型哈密顿量. 在谐振近似下, 根据激子运动学和动力学非线性效应的理解, 推导了晶格运动和激子-孤子运动的非线性 Klein-Gordon (K-G) 耦合运动方程组. 发现激子运动学和动力学非线性效应不但对孤子波函数 ϕ 的 ϕ^3 , $\phi^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$ 有重要贡献, 且导致重要的高阶非线性项, 分别对 ϕ^5 非线性和 ϕ^7 非线性方程给出了解析解. 详细分析 ϕ 非线性方程的 Bell 型孤子和 Kink 型孤子解结果, 发现激子运动学和动力学非线性效应对激子的有效质量 m 有显著增加贡献, 对激子-孤子能量 (Ω) 有更负的修正, 孤子局域范围更小. 对 Bell 型孤子以超声速 ($v > c_s$) 沿一维键传播, 而 Kink 型孤子以亚声速传播 ($v < c_s$), 它们分别出现在激子能带底部和顶部.

关键词: 一维分子晶体, 激子-孤子, 运动学和动力学非线性效应, 非线性 Klein-Gordon 方程

PACC: 6320K, 7138, 7215N

1. 引言

一维分子晶体孤波激发态的存在一直引起人们十分重视, 并已经进行过广泛研究^[1-9]. 一个最有趣的效果是由于激子的存在引起分子链的晶格畸变产生吸引势并使分子激子自陷成为激子-孤子束缚态. 目前, 在分子链的简谐近似^[1-3]和非谐振近似^[4-6]情形已做出相应具有代表性的研究, 特别是 Davydov 的工作, 获得位于激子能带底部亚声速 ($v < c_s$) 的 Bell 型孤子的结果.

虽然一维分子晶体的模型 Hamiltonian 已有一些认识提供选择, 但从简单性及物理图像的鲜明上比较, Holstein 模型和 Davydov 模型常作为最好候选者. 我们前期的工作曾在形变势模型基础推导出激子(电子)与振动模的相互作用项 $-\chi \sum_l (u_l - u_{l-1}) c_l^\dagger c_l$ 在谐振近似下, 改善 Davydov 近似得到高阶非线性项 $\chi \phi^2$, 在此基础上第一次得出亚声速 ($v < c_s$) 和超声速 ($v > c_s$) 孤子解^[7]. 随后, 考虑

到非谐振近似 $K_1(u_l - u_{l-1})$ 效应, 由于对 $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$ 存在的高次非线性效 $K_1 \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 因而较之 Davydov 关于孤波 $\phi(\xi)$ 会出现高阶非线性项 $K_1 \chi^2(s) \phi^5$, 由此获得激子能带底部 Bell 型孤子解和激子能带顶部的 Kink 型孤子解的新结果^[8].

由于一维分子晶体的激子-孤子激发态问题在物理学, 化学和生物学有非常重要地位, 例如在高温超导, 巨磁阻问题, 生物(生命)科学的 DNA 问题, 化学上的高聚物及材料科学的研究等方面都是不可缺少的. 我们认识到以往工作中高次非线性效应是计及晶格振动效应 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 的结果, $i\hbar \dot{A}$ 方程包含 $\chi \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} A$ 项, $M\ddot{u}$ 方程包含 $\chi \frac{\partial^2}{\partial x^2} |A|^2$ 项与 $K_1 \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 项, 并且上述模型 Hamiltonian 只考虑静态激子效应, 不可能考虑激子 Kinematical (动态的运动学) 效应和动力学效应, 因而是一种非线性 Schrödinger 方程, 因此感到并不尽人意. 特别应该指出, 迄今为止, 国内外尚无关于一维分子晶体激子运动的运动学和动力学非

* 国家自然科学基金(批准号: 30574163)资助的课题.

[†] E-mail: lo-zh@126.com

线性效应深刻考虑. 本文从一个新的物理图像处理一维分子晶体模型 Hamiltonian, 重点研究激子运动学和动力学非线性效应对激子-孤子运动的非线性行为: 1) 将每个分子考虑成(激子)电偶极子; 2) 采用分子态投影算符 $\sigma_{\lambda\lambda'}(n) = |\lambda_n\rangle\langle\lambda'_n|$ 表述相邻分子间静态作用势(电)偶极-偶极相互作用, 和激子-激子动力学相互作用; 3) 对于晶格哈密顿量只考虑谐振近似. 在此基础上, 计及处理激子和晶格运动学效应对非线性作用重要贡献, 推导激子-晶格运动耦合非线性方程组, 显示出激子运动学和动力学非线性效应分别存在激子-孤子非线性运动方程和晶格运动非线性方程中. 应用旋波近似分别求解含 ϕ^5 次和 ϕ^7 次非线性方程所得的物理结果. 最后对结果作总结和讨论.

2. 一维分子晶体模型哈密顿量 激子-晶格耦合方程组

我们考虑一维分子晶体中每个原胞一个分子, 每个自由分子哈密顿量为 $H_0(n)$, 其相应本征值方程

$$H_0(n)|\lambda_n\rangle = \lambda_n|\lambda_n\rangle, \quad (1)$$

$|\lambda_n\rangle$ 代表 $H_0(n)$ 的本征态. 引入如下分子态投影算符:

$$\sigma_{\lambda\lambda'}(n) = |\lambda_n\rangle\langle\lambda'_n|, \quad (2)$$

且 $\sum_{\lambda} \sigma_{\lambda\lambda} = 1$. 应用双能态近似, 即只考虑基态 $\lambda = 0$ 与相关激发态 $\lambda = f$ 之间相互作用(略去 $\lambda = 0$ 态与次近邻激发态非对角跃迁作用, f 代表许多分子本征态之一), 此时我们有如下的等效泡里(Pauli)算符:

$$\begin{aligned} \sigma_n^x &= \frac{1}{2}[\sigma_{f0}(n) + \sigma_{0f}(n)], \\ \sigma_n^y &= \frac{1}{2i}[\sigma_{f0}(n) - \sigma_{0f}(n)], \\ \sigma_n^z &= \frac{1}{2}[\sigma_{ff}(n) - \sigma_{00}(n)]. \end{aligned} \quad (3)$$

将一维分子晶体每个分子(激子)考虑为(激子)电偶极子, 若 x_n 代表第 n 个分子瞬时位置, ϵ_0 代表自由分子基态与激发态 f 之间能量间距, 由于相邻分子 m 的存在引起 ϵ_0 的修正, 即

$$\epsilon_0 + \sum_m D(x_m - x_n) \sigma_n^z,$$

此处 $D(x_m - x_n)$ 表示分子 n 与邻近分子 m 之间的静态自能相互作用, 在 Davydov 模型被模型化成 $(\epsilon - D_n)B_n^\dagger B_n$ (B_n 表示激子算符). 进一步我们考虑

(激子)分子间的吸引力偶极-偶极相互作用 $\sum_m \mathcal{K}(x_m - x_n) \sigma_n^x \sigma_m^x$, 其中 $\mathcal{K}(x_m - x_n)$ 代表偶极-偶极相互作用能, 以及激子间动力学相互作用 $\sum_n \mathcal{K}(x_m - x_n) \sigma_n^z \sigma_m^z$. 一维分子晶体模型哈密顿量可表示成

$$\begin{aligned} H_{el} &= \sum_n [\epsilon_0 + \sum_m D(x_m - x_n)] \sigma_n^z \\ &\quad - 2 \sum_{nm} \mathcal{K}(x_m - x_n) \cdot \sigma_n^x \sigma_m^x \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{nm} \mathcal{K}(x_m - x_n) \sigma_n^z \sigma_m^z. \end{aligned} \quad (4)$$

对于正常激发态来讲(即 Bogoliubov 近似)分子激子密度非常小, 我们可以忽略 H_{el} 中第 3 项. 按照 Dyson 关于自旋波理论的意见, 当 Pauli 算符偏离 Boson 算符时, 即会引起运动学(kinematical)效应. 我们在下面处理中实现这一思想.

对于哈密顿量的晶格效应, 暂时只考虑简谐振近似(当然非谐振效应也非常重要, 将在以后考虑), 以使我们的图像更清楚, 此时晶格哈密顿量为

$$H_{ph} = \frac{1}{2M} \sum_n P_n^2 + \frac{1}{2} \sum_{nl} K(l) \{u_{n+l} - u_n\}^2, \quad (5)$$

此处

$$u_n = x_n - R_n, \quad (R_n = na)$$

表示第 n 个分子离开平衡位置 R_n 的位移, M 为分子质量, $K(l)$ 表示相邻分子间作用力常数, $P_n = Mu_n$ 表示第 n 个分子动量. 进一步将 $D(x_m - x_n)$ 和 $\mathcal{K}(x_m - x_n)$ 围绕平衡位置作泰勒展开至一级近似, 得

$$\begin{aligned} H_{el} &= \sum_n [\epsilon_0 + 2 \sum_{l>0} D(la) \\ &\quad + \sum_{l>0} D'(l) \{u_{n+l} - u_{n-l}\}] \sigma_n^z \\ &\quad - 2 \sum_n \left\{ \sum_l \mathcal{K}(la) \sigma_n^x \sigma_{n+l}^x \right. \\ &\quad + \sum_{l>0} \mathcal{J}(l) \{u_{n+l} - u_n\} \sigma_n^x \sigma_{n+l}^x \\ &\quad \left. + (u_n - u_{n-l}) \sigma_n^x \sigma_{n-l}^x \right\}, \end{aligned} \quad (6)$$

此处略去了只含有经典意义的 Ising 项 $\sigma_n^z \sigma_m^z$ (这一项表示自旋 $\pm \frac{1}{2}$ 与 σ_n^x 对易的经典意义). (6) 式中的物理内涵如下: 第一项 [...] 中第 2 项代表偶极子间静态作用, 而第 3 项表示偶极子间自能作用与晶格振动耦合效应, 第二项 {...} 号第 1 项表示分子间偶极-偶极相互作用, 而第 2 项表示偶极-偶极相互作用与

晶格振动耦合效应. 基于上述理由, 一维分子晶体系统整个模型哈密顿量考虑为

$$H = H_{cl} + H_{ph}. \quad (7)$$

应用 Heisenberg 运动方程和 Pauli 算符的对易关系, 可求得 σ_n^x 的运动方程为

$$\begin{aligned} \ddot{\sigma}_n^x + \epsilon^2 \sigma_n^x + 2\epsilon \sum_l \mathcal{K}(|la|) [\sigma_n^z \sigma_{n+l}^x + \sigma_n^z \sigma_{n-l}^x] \\ + 2\epsilon \sum_{l>0} D'(|la|) [u_{n+l} - u_{n-l}] \sigma_n^x \\ + 2 \sum_{l>0} D'(|la|) [u_{n+l} - u_{n-l}] \\ \times \sum_{l_1} \mathcal{K}(|l_1 a|) [\sigma_n^z \sigma_{n+l_1}^x + \sigma_n^z \sigma_{n-l_1}^x] \\ + 4\epsilon \sum_{l>0} J'(|la|) [(u_{n+l} - u_n) \cdot \sigma_n^z \sigma_{n+l}^x \\ + (u_n - u_{n-l}) \sigma_n^z \sigma_{n-l}^x] \\ + \frac{1}{M} \sum_{l>0} D'(|la|) \cdot (P_{n+l} - P_{n-l}) \sigma_n^y = 0, \quad (8) \end{aligned}$$

其中

$$\epsilon = \epsilon_0 + 2 \sum_{l>0} D(|la|), \quad (9)$$

另一方面, 对于 u_n 的运动方程, 仿照 Schrieffer 方法采用经典近似 $M\ddot{u}_n = -\frac{\partial H}{\partial u_n}$, 可求得

$$\begin{aligned} M\ddot{u}_n - \sum_{l>0} K(|la|) [u_{n+l} + u_{n-l} - 2u_n] \\ - \sum_{l>0} D'(|la|) [\sigma_{n+l}^z - \sigma_{n-l}^z] \\ + 4 \sum_{l>0} J'(|la|) [\sigma_{n+l}^x - \sigma_{n-l}^x] \sigma_n^x = 0. \quad (10) \end{aligned}$$

(8) 和 (10) 式正是所希望的基本方程, 它们代表一维分子晶体中分子激子的非线性动力学行为的统治方程. 为了得到激子-孤子非线性方程的运动学效应, 以及避免方程(8)复杂非线性使问题难以求解和弄清问题, 我们对 σ_n^z 作经典处理

$$\sigma_n^z = \frac{1}{2}(\sigma_n^{\uparrow} - \sigma_n^{\downarrow}) \approx -\frac{1}{2}. \quad (11)$$

进一步考虑对方程(8)(10)式作封闭近似, 计及到

$$\dot{\sigma}_n^x = -[-\epsilon + \sum_{l>0} D'(|la|) [u_{n+l} - u_{n-l}]] \sigma_n^y,$$

略去 $\frac{\partial^2 u}{\partial n^2}$ 高阶修正,

$$\sigma_y \approx -\frac{1}{\epsilon} \dot{\sigma}_n^x, \quad (12)$$

应用 $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1$, 将 $(\sigma_{n+l}^z - \sigma_{n-l}^z)$ 典近似成

$$\sigma_{n+l}^z - \sigma_{n-l}^z = \frac{1}{2} [(\sigma_{n+l}^x - \sigma_{n-l}^x)]$$

$$+ \frac{1}{\epsilon} (\dot{\sigma}_{n+l}^x - \dot{\sigma}_{n-l}^x)], \quad (13)$$

此时方程组(8)(10)式构成封闭. 为了求解激子-孤子非线性运动方程(8)(10)式, 我们作如下连续近似:

$$\sigma_n^x(t) \rightarrow \alpha(xt), \quad u_n(t) \rightarrow u(xt), \quad (14)$$

考虑到

$$\begin{aligned} \sigma_{n\pm l}^x \approx \sigma_n^x \pm la \frac{\partial \sigma_n^x}{\partial n} + \frac{1}{2} (la)^2 \frac{\partial^2 \sigma_n^x}{\partial n^2}, \\ u_{n\pm l} \approx u_n \pm la \frac{\partial u_n}{\partial n} + \frac{1}{2} (la)^2 \frac{\partial^2 u_n}{\partial n^2}, \quad (15) \end{aligned}$$

并且在连续近似处理中只考虑 $\frac{\partial u}{\partial x}$ 效应, 舍去 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 高阶近似修正, 我们可以得到(8)(10)式的连续近似方程:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} - A_1 \rho + A_2 w \rho \\ + \tilde{\lambda}_D w \frac{\partial \rho}{\partial x^2} - \frac{2\lambda_D}{c_0^2} \frac{\partial w}{\partial t} \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0, \quad (16) \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} w &= \frac{\partial u}{\partial x}, \\ \lambda_j &= 4 \sum_{l>0} J'(|la|) [la] \epsilon, \\ \lambda_D &= \sum_{l>0} D'(|la|) [la] \epsilon. \quad (17) \end{aligned}$$

而

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{1}{c_s^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\epsilon}{Mc_s^2} (\lambda_D - \lambda_j) \rho^2 \right. \\ \left. + \frac{1}{M\epsilon c_s^2} \lambda_D \rho^2 \right] = 0, \quad (18) \end{aligned}$$

此处

$$\begin{aligned} c_0^2 &= \sum_l \mathcal{K}(|la|) [la]^2 / \epsilon, \\ c_s^2 &= \sum_l K(|la|) [la]^2 / M, \\ A_1 &= \epsilon (\epsilon - 2J_0) c_0^2, \\ A_2 &= \epsilon (4J_0 \lambda_D + \epsilon \lambda_j) c_0^2, \\ \hat{\lambda}_D &= 2\epsilon^2 \lambda_D, \\ J_0 &= \sum_l \mathcal{K}(|la|), \\ \epsilon &= \epsilon_0 + 2 \sum_{l>0} D(|la|). \quad (19) \end{aligned}$$

从方程(16)和(18)式看, 我们目前的理论框架有新的特点: 1) 本文和 Davydov 先前的非线性 Schrödinger 方程不同, 现在 ρ 和 u 均为高阶非线性 Klein-Gordon

方程 2) ρ 的方程只用计及 $\frac{\partial u}{\partial x}$ 阶效应 $\frac{\partial u}{\partial x} \rho$ 和 $\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}$, 而 u 的方程只计入 $\frac{\partial}{\partial x} \rho^2$ 而没计及高阶修正 $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho^2$,

在 Davydov 的工作中没有得到 (16) (18) 式最后两项 3) 新的工作中得到激子运动学效应的修正项 $\frac{\partial w}{\partial t}$

$\frac{\partial \rho}{\partial t}$ 和 $\frac{\partial x}{\partial t} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right)^2$ 这是以前理论工作没有的, 在 $\rho(x, t)$ 的运动方程中含有激子运动学效应, 而且在 $u(x, t)$ 的运动方程也出现含激子运动学效应.

对于以恒速度 v 沿一维线性链的传播波,

$$\begin{aligned} u(x, t) &= u(\xi) \quad (\xi = x - vt), \\ \rho(x, t) &= \rho(\xi), \end{aligned} \quad (20)$$

此时 (18) 式改写成

$$\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \left[\left(1 - \frac{v^2}{c_s^2} \right) w + A_3 \rho^2 + \frac{A_4}{\epsilon^2} \dot{\rho}^2 \right] = 0, \quad (21)$$

此处 $v_s = v/c_s$, 且

$$\begin{aligned} A_3 &= \frac{\epsilon}{Mc_s^2} (\lambda_D - \lambda_J), \\ A_4 &= \frac{\lambda_D}{M\epsilon c_s^2}. \end{aligned} \quad (22)$$

对于边界条件

$$u(\xi)|_{\xi=\pm\infty} = 0, \quad \rho(\xi)|_{\xi=\pm\infty} = 0, \quad \dot{\rho}(\xi)|_{\xi=\pm\infty} = 0, \quad (23)$$

方程 (21) 成立的充分必要条件

$$u(\xi) = -\frac{A_3}{1-v_s^2} \rho^2 - \frac{A_4}{\epsilon(1-v_s^2)} \dot{\rho}^2, \quad (24)$$

和

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -\frac{2A_3}{1-v_s^2} \rho \dot{\rho} - \frac{2A_4}{\epsilon(1-v_s^2)} \dot{\rho} \ddot{\rho}, \quad (25)$$

若边界条件

$$\rho(\xi)|_{\xi=\pm\infty} = \rho_0, \quad \dot{\rho}(\xi)|_{\xi=\pm\infty} = \dot{\rho}_0, \quad (26)$$

我们可得

$$\frac{\partial u}{\partial \xi} = -\frac{1}{1-v_s^2} \left[A_3(\rho^2 - \rho_0^2) + \frac{A_4}{\epsilon^2}(\dot{\rho}^2 - \dot{\rho}_0^2) \right]. \quad (27)$$

3. 非线性 Klein-Gordon 方程孤波解

3.1. Bell 型孤波解

对于 Bell 型孤波解,

$$\rho(\xi)|_{\xi=\pm\infty} = \phi_0 = 0, \quad \left. \frac{\partial \rho}{\partial \xi} \right|_{\xi=\pm\infty} = 0. \quad (28)$$

将 (24) (25) 式代入方程 (16) 后得

$$\begin{aligned} &\frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} - A_1 \rho + B_1 \rho^3 \\ &+ B_2 \rho^2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + B_3 \rho \dot{\rho}^2 \\ &+ B_4 \dot{\rho}^2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + B_5 \dot{\rho}^2 \ddot{\rho} = 0, \end{aligned} \quad (29)$$

此处

$$\begin{aligned} B_1 &= -A_2 A_3 (1 - v_s^2), \\ B_2 &= -\tilde{\lambda}_D A_3 (1 - v_s^2), \\ B_3 &= -A_2 A_4 / \epsilon (1 - v_s^2) + 4\lambda_D A_3 / c_0^2 (1 - v_s^2), \\ B_4 &= -\tilde{\lambda}_D A_4 (1 - v_s^2), \\ B_5 &= 4\lambda_D A_4 / \epsilon (1 - v_s^2). \end{aligned} \quad (30)$$

很显然, 我们现在关于一维分子晶体激子-孤子理论与 Davydov 等人的理论有显著不同, 一方面其波函数 ρ 的动力学方程是高阶非线性 Klein-Gordon 方程, 其中非线性项除了静态项 $\rho^3, \rho^2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}$ 外, 还有激

子运动学效应引起的非线性效应 $\rho \dot{\rho}^2, \dot{\rho}^2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}$ 与 $\rho^2 \ddot{\rho}$. 特别指出的是, 除了 Dyson 预期的激子运动学效应 ($\dot{\rho}$) 外, 还得出激子动力学效应 ($\ddot{\rho}$).

对于无晶格效应的激子态, $\frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} - A_1 \rho = 0$, 可考虑

$$\rho = \rho_0 e^{i(kx - \omega t)},$$

此时激子能量

$$\begin{aligned} \omega &= [\epsilon(\epsilon - 2J_0) + c_0^2 k^2]^{\frac{1}{2}} = (\omega_0^2 + c_0^2 k^2)^{\frac{1}{2}}, \\ \omega_0 &= \sqrt{\epsilon(\epsilon - 2J_0)}, \end{aligned} \quad (31)$$

而准粒子质量

$$m = \omega_0 / c_0^2 = \sqrt{\epsilon(\epsilon - 2J_0)} / c_0^2. \quad (32)$$

下面我们采用旋波近似方法求解非线性方程 (29) 的孤波解, 令

$$\rho = \rho_+ e^{-i\omega_0 t} + \rho_- e^{i\omega_0 t}. \quad (33)$$

考虑 $e^{\pm i\omega_0 t}$ 为慢时间变化行为, 有主要贡献, 而含 $e^{\pm i2\omega_0 t}, e^{\pm i3\omega_0 t}$ 成分属快时间变化行为因贡献不重要而舍去, 称作慢波近似, 其中

$$\rho_+ = \phi_+ e^{i(k_1 x - \omega_1 t)}, \quad \rho_- = \phi_- (\xi) e^{-i(k_1 x - \omega_1 t)}. \quad (34)$$

在上述旋波近似下, 方程 (29) 中诸项目关于 ρ_+ 与 ρ_- 有相同对称性出现, 因而 $\phi_+(\xi)$ 与 $\phi_-(\xi)$ 有相同对称, 可以用 $\phi(\xi)$ 标记. 经过冗繁的旋波近似操作, 略去较高阶非线性项后, 最后得到 $\phi(\xi)$ 的运动方程

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} + b_1 \phi + b_2 \phi^3 + b_3 \phi^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} + b_4 \phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)^2 + b_5 \left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} = 0, \quad (35)$$

其中

$$b_1 = \left(-k_1^2 + \frac{2\omega_0\omega_1 + \omega_1^2}{c_0^2} \right) \chi(1 - v_0^2), \quad (v_0 = \frac{v}{c_0}),$$

$$b_2 = (3B_1 - 2B_2 k_1^2 + \omega_{01}^2 B_3 - \omega_{01}^2 k_1^2 B_4 - \omega_{01}^2 \omega_1^2 B_5) \chi(1 - v_0^2),$$

$$b_3 = (2B_2 + \omega_{01}^2 B_4 + \omega_{01}^2 v^2 B_5) \chi(1 - v_0^2),$$

$$b_4 = [v^2 B_3 - (2\omega_0 + k_1 v) k_1 v B_4 - (2\omega_0 \omega_1 + \omega_1^2) v^2 B_5] \chi(1 - v_0^2),$$

$$b_5 = (v^2 B_4 + v^4 B_5) \chi(1 - v_0^2), \quad (36)$$

而

$$k_1 = \frac{\chi(\omega_0 + \omega_1)}{c_0^2} v. \quad (37)$$

从 $\chi(\xi)$ 方程 (35) 可以看到, 激子的运动学和动力学非线性效应(含 B_3, B_4, B_5 项目)不但对非线性项

$\phi^3, \phi^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$ 有重要影响, 而且还导致高阶非线性项

$\phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)^2, \left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2}, \dots$ 从这些结果, 使人们会对

一维分子晶体中激子-孤子非线性运动的物理内容有所重新认识和考虑.

为了下面物理求解内容本质清楚, 我们暂时略去方程 (35) 中最后一项高阶项, 注意到 $\phi \phi_{\xi\xi}^2 =$

$\frac{1}{2} \chi(\phi^2)_{\xi\xi} - \phi^2 \phi_{\xi\xi}$, 方程 (35) 可以化成

$$\phi_{\xi\xi} = - \left[b_1 \phi + b_2 \phi^3 + \frac{1}{2} b_4 \chi(\phi^2)_{\xi\xi} \right] \times (1 + (b_3 - b_4) \phi^2)^{-1}. \quad (38)$$

由于 $\phi^2 < 1$, 考虑 $(b_3 - b_4) \phi^2 < 1$ ($1 + (b_3 - b_4) \phi^2$)

$\phi^2)^{-1} \approx 1 - (b_3 - b_4) \phi^2 + (b_3 - b_4)^2 \phi^4$, 完成 (38) 式积分, 略去高阶修正小项, 仅保留至 ϕ^{10} 项, 最后得

$$\phi_{\xi\xi}^2 = \phi^2 (a_0 + a_1 \phi^2 + a_2 \phi^4 + a_3 \phi^6 + a_4 \phi^8), \quad (39)$$

其中

$$a_0 = -b_1,$$

$$a_1 = \frac{1}{2} [b_1(b_3 + b_4) - b_2],$$

$$a_2 = \frac{1}{3} b_2 \left(b_3 + \frac{1}{2} b_4 \right) - b_1 b_3 b_4,$$

$$a_3 = -\frac{1}{4} (b_3 + b_4) [b_2 b_4 - b_1 b_4 (b_3 - b_4)],$$

$$a_4 = \frac{1}{6} b_2 b_4 (b_3^2 - b_4^2). \quad (40)$$

可见仅考虑激子的运动学和动力学效应, 得到 ϕ^{10} 高非线性结果. 为了使问题直接确认起见, 我们对 (39) 式先考虑 ϕ^6 次非线性近似, 其 Bell 型单孤子解结果为

$$\phi = [(A + B) + 2B \sinh^2 \mu(\xi - \xi_0)]^{1/2}, \quad (41)$$

此处

$$A = -\frac{a_1}{2\mu^2},$$

$$B = \pm \frac{1}{2\mu^2} (a_1^2 - 4\mu^2 a_2)^{1/2},$$

$$\mu^2 = a_0. \quad (42)$$

由于 $0 \leq \sinh^2 x < +\infty$, 因而稳定孤子解条件为

$$A + B > 0, B > 0. \quad (43)$$

应用归一化条件

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\chi(xt)|^2 dx = 1, \quad (44)$$

得

$$\mu^2 = \frac{1}{L^2} = \frac{a_1^2}{4\eta^2} \text{th}^2 \eta, \quad (45)$$

其中激子-孤子局域为

$$L = -\frac{2\eta}{a_1} \text{cth} \eta, \eta^2 = a_2 > 0, \quad (46)$$

由此求得

$$a_0 = \frac{a_1^2}{4a_2} \tanh^2 \sqrt{a_2}. \quad (47)$$

应用 $a_0 = -b_1$ 可进一步得

$$\omega_1 = -\omega_0 + \omega_0 \left[1 - \frac{c_0^2 - v^2}{\omega_0^2} \frac{a_1^2}{4a_2} \times \tanh^2 \sqrt{a_2} + \frac{c_0^2}{\omega_0^2} k_1^2 \right]^{1/2}, \quad (48)$$

因而对于 Bell 型激子-孤子能量

$$\Omega = \omega_0 + \omega_1 = \omega_0 \left[1 - \frac{c_0^2 - v^2}{\omega_0^2} \frac{a_1^2}{4a_2} \times \tanh^2 \sqrt{a_2} + \frac{c_0^2}{\omega_0^2} k_1^2 \right]^{1/2}. \quad (49)$$

从 (49) 式可知道, 当 $c_0 > v$, Ω 表示式中方根号内第二项为负值, 说明非线性相互作用效应使激子-孤子能量 Ω 减少. 将 Ω 与 $\omega^2 = \omega_0^2 + c_0^2 k^2$ 比较, 由于 $k_1 < k$, 因而 $\Omega < \omega$. 激子-孤子出现在激子能带底部. 应该进一步认识, 由于激子运动学 (B_3, B_4) 与动力学

(B_5)非线性效应(吸引力性质作用),它们对 b_2, b_3, b_4 整合的结果使得与不计及激子运动学与动力学非线性效应的 $a_1(0), a_2(0)$ 值有显著的修正, $a_1 > a_1(0), a_2 < a_2(0)$, 从而引起激子-孤子能量有更负的下降修正. 与此同时, 从(46)式可见, 此时孤子局域范围更小. 另一方面, 由于满足(41)式稳定孤子解存在条件要求 $A + B > 0, B > 0$, 这一条件要求

$$a_1 < 0, a_2 > 0. \quad (50)$$

满足(50)式要求 $v > c_s$ (后面会讨论), 因此 Bell 型激子-孤子是一种以超声速沿一维链传播的孤波.

3.2. Kink 型孤波解

下面我们来研究具有扭结型(Kink 型)孤波边界

$$\begin{aligned} |\rho(xt)|_{x \rightarrow \pm\infty}^2 &= \phi_0^2, \\ |\dot{\rho}(xt)|_{x \rightarrow \pm\infty}^2 &= \phi_0^2, \end{aligned} \quad (51)$$

的孤波解问题. 应用边界条件(51)式于(24)和(25)式, 则方程(16)式变成

$$\begin{aligned} (1 + \alpha_s^2) \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} - A_1' \rho + B_1 \rho^3 \\ + B_2 \rho^2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + B_3 \rho \dot{\rho}^2 \\ + B_4 \rho^2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + B_5 \rho^2 \ddot{\rho} + B_6 \ddot{\rho} = 0, \end{aligned} \quad (52)$$

其中

$$\alpha_s^2 = \tilde{\lambda}_D (A_3 \phi_0^2 + A_4 \dot{\phi}_0^2) (1 - v_s^2), \quad (53)$$

$$A_1' = A_1 + B_1 \phi_0^2 + B_3 \dot{\phi}_0^2. \quad (54)$$

仿照 Bell 型孤波解旋波近似运算, 最后导得 ϕ 的高次非线性方程为

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} + b_1' \phi + b_2' \phi^3 + b_3' \phi^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} \\ b_4' \phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)^2 + b_5' \left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} = 0, \end{aligned} \quad (55)$$

其中

$$b_1' = \left(-k_1^2 + \frac{2\omega_0\omega_1 + \omega_1^2}{c_0^2} + B_1 \phi_0^2 + B_3 \dot{\phi}_0^2 \right) (1 - v_0^2 + \alpha_s^2),$$

$$b_2' = (3B_1 - 2k_1^2 B_2 + \omega_{01}^2 B_3 - \omega_{01}^2 k_1^2 B_4 - \omega_{01}^2 \omega_1^2 B_5) (1 - v_0^2 + \alpha_s^2),$$

$$b_3' = (2B_2 + \omega_{01}^2 B_4 + \omega_{01}^2 v^2 B_5) (1 - v_0^2 + \alpha_s^2),$$

$$b_4' = [v^2 B_3 - (2\omega_0 + k_1 v) k_1 v B_4 - (2\omega_0 \omega_1 + \omega_1^2) v^2 B_5] (1 - v_0^2 + \alpha_s^2),$$

$$b_5' = (v^2 B_4 + v^4 B_5) (1 - v_0^2 + \alpha_s^2), \quad (56)$$

$$k_1 = \frac{\mathcal{X}(\omega_0 + \omega_1)}{c_0^2} v + \omega_1 v \dot{\phi}_0^2 B_5. \quad (57)$$

在此, 我们仅讨论 ϕ^6 次非线性情形的 Kink 孤子解

$$\phi_\xi^2 = \phi^2 (-c_0' + c_1 \phi^2 + c_2 \phi^4), \quad (58)$$

其中

$$c_0' = -b_1',$$

$$c_1 = \frac{1}{2} [b_1' (b_3' + b_4') - b_2'],$$

$$c_2 = \frac{1}{3} b_2' \left(b_3' + \frac{1}{2} b_4' \right) - b_1' b_3' b_4'. \quad (59)$$

对于方程(58)式的 Kink 型孤子解, 其结果为

$$\phi = \phi_0 \frac{\sinh \mu' (\xi - \xi_0)}{[\cos^2 \eta' + \sinh^2 \mu' (\xi - \xi_0)]^{\frac{1}{2}}}, \quad (60)$$

其中 $\mu'^2 = +c_0' = -b_1'$, 而

$$\phi_0^2 = -\frac{1}{A' + B'}$$

$$\cos^2 \eta' = \frac{A' + B'}{2B'}, \quad (61)$$

$$A' = -c_1/2\mu'^2,$$

$$B' = -\frac{1}{2\mu'^2} (c_1^2 - 4\mu'^2 c_2)^{\frac{1}{2}},$$

$$\mu'^2 = c_0'. \quad (62)$$

显然, 对于稳定的孤波激发, 由于 $\phi_0^2 > 0, \cos^2 \eta' > 0$, 我们得到稳定孤子解存在的必要条件

$$A' + B' < 0, B' < 0. \quad (63)$$

应用归一条件

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (\phi_0^2 - |\phi|^2) dx = 1, \quad (64)$$

求得

$$\phi_0^2 = \frac{1}{2L'\eta'} \operatorname{tg} \eta', L' = \frac{4\eta'}{c_1} \operatorname{ctg} \eta', \quad (65)$$

其中

$$4\eta'^2 = c_2 > 0. \quad (66)$$

结合(65)与(66)式可得

$$c_0' = \mu'^2 = \frac{c_1^2}{4c_2} \operatorname{tg}^2(\sqrt{c_2}/2). \quad (67)$$

应用 $c_0' = -b_1'$ 求得

$$\begin{aligned} \omega_1 = -\omega_0 + \omega_0 \left[1 - \frac{c_0'}{\omega_0^2} \left(1 - \frac{v^2}{c_0^2} + \alpha_s^2 \right) \frac{c_1^2}{4c_2} \right. \\ \left. \times \operatorname{tg}^2(\sqrt{c_2}/2) + \frac{c_0'}{\omega_0^2} k_1^2 \right], \end{aligned} \quad (68)$$

因而 Kink 型激子-孤子能量

$$\Omega' = \omega_0 \left[1 - \frac{c_0^2}{\omega_0^2} \left(1 - \frac{v^2}{c_0^2} + \alpha_s^2 \right) \frac{c_1^2}{4c_2} \right. \\ \left. \times \operatorname{tg}^2(\sqrt{c_2}/2) + \frac{c_0^2}{\omega_0^2} \tilde{k}_1^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (69)$$

此处 k_1^2 修改成

$$\tilde{k}_1^2 = k_1^2 - B_1 \phi_0^2 - B_3 \phi_0^2. \quad (70)$$

从(69)式可知,当 $c_0 > v$ 与 $v < c_s$, 由于 $\alpha_s^2 > 0$, Ω' 表示式中方根号内第二项为负值,说明非线性相互作用效应使 Kink-型激子-孤子能量 Ω' 减少. 显然,当计及激子运动学和动力学非线性效应,它们对 b'_2, b'_3, b'_4 整合的结果,使 $c_1(0), c_2(0)$ 有明显的修正 $c_1 > c_1(0), c_2 < c_2(0)$, 因而导致 Kink-型激子-孤子能量有更负下降,与此同时从(65)式可知,孤子局域范围更小. 另一方面,由于 $v < c_s$, 结果 $c_1 > 0, c_2 > 0$, 而 $\alpha_s^2 > 0$ 的修正导致 $c_1 > c_2$, 从而

$$A' + B' < 0, B' < 0.$$

进一步考虑到

$$\frac{c_0^2}{2\omega_0} \tilde{k}_1^2 = \frac{1}{2m} k_1^2, \quad (71)$$

由此得到 Kink 型激子-孤子有效质量

$$\tilde{m} = m \left(1 - \frac{B_1 \varphi_0^2 + B_3 \varphi_0^2}{k^2} \right) < 0, \quad (72)$$

因此, Kink 型激子-孤子出现在激子能带顶部,并以亚声速 ($v < c_s$) 沿一维键进行传播.

长期以来,由于 Davydov 等人的激子-孤子理论简单不够深入,孤子能量 ω_1 太小,孤子寿命太短,局域性不好而不理想. 特别是红外吸收差,红外本征带与反常带的红移与 ω_1 相差太大. 由于考虑了激子运动学和动力学非线性效应修正,我们得到的孤子能量 ω_1 有显著增加(更为接近红移值),因而可说明 Raman 散射谱的红移是由孤子的形成而引致的可信证据. 另一方面,由于激子运动学和动力学非线性效应,导致激子-孤子密度 n_B (Bell-孤子)与 n_K (Kink-孤子)有显著增加,由于 $a_1 > a_1(0), a_2 < a_2(0), c_2 < c_2(0)$,

$$n_B = |\phi_B|^2 = -\frac{a_1}{4a_2} \operatorname{tanh}^2 \sqrt{a_2},$$

$$n_K = |\phi_K|^2 = 2 \left(1 - \frac{1}{2} \operatorname{tg}^2 \sqrt{\frac{c_2}{2}} \right) \phi_0^2.$$

其结果增强红外吸收而显著增加红外吸收系数,从而降低红外吸收的热声子效应. 显然,激子-孤子密度的增加也增加对蛋白质,ATP 等生物能量转移. 现

在已经知道, Mössbauer 效应与超声孤子存在有关,其跃迁概率与 $|\phi_B|^2$ 成正比,因此激子运动学和动力学非线性效应使 Mössbauer 效应较为显著. 类似,生物学和高分子中的电荷与质子的转移概率(与 $|\phi|^2$ 成正比)也得到显著增加.

3.3. ϕ^7 非线性情形

我们再看更高非线性情形,即 ϕ^7 -非线性

$$\phi_\xi^2 = \phi^2 (a_0 + a_1 \phi^2 + a_2 \phi^4 + a_3 \phi^6), \quad (73)$$

且考虑边界条件为

$$\phi |_{\xi \rightarrow \pm\infty} = 0. \quad (74)$$

作变换 $f = \phi^2$, 可得 $f(\xi)$ 的非线性方程

$$\frac{1}{2} (f_\xi)^2 = 2f^2 (a_0 + a_1 f + a_2 f^2 + a_3 f^3), \quad (75)$$

(75) 式物理图像代表一个非谐振子运动方程. 我们下面试图寻求如下一类的积分分解,为此将(75)式改写成

$$(f_\xi)^2 = \Gamma f^2 (f + U_\pm) (f + V), \quad (76)$$

$$\Gamma = 4a_3,$$

$$U_\pm = \frac{1}{3} \left[\frac{a_2}{a_3} \pm \sqrt{\left(\frac{a_2}{a_3} \right)^2 - \frac{3a_1}{a_3}} \right],$$

$$V = \frac{a_2}{a_3} - 2U_\pm. \quad (77)$$

记

$$F^2(\xi) = f(\xi) + V, \quad (78)$$

从(76)式有

$$\frac{d\xi}{dF} = k_0 \left[\frac{1}{F^2 - V} - \frac{1}{F^2 + (U_\pm - V)} \right],$$

$$k_0 = \frac{2}{\sqrt{\Gamma U_\pm}}. \quad (79)$$

考虑 $V > 0$ 时, f 应满足边界条件

$$f |_{\xi \rightarrow \pm\infty} \rightarrow 0, \quad (80)$$

因而 $F(\xi)$ 有如下解案

1) 当 $|F(\xi)| < \sqrt{V}$ 情形

$$F_1(\xi) = -\sqrt{V} \operatorname{tanh} \left[\frac{\sqrt{V}}{k_0} (\xi - \xi_0) + \frac{1}{2} \alpha F(\xi) \right], \quad (81)$$

而

$$\alpha F(\xi) = \frac{2\sqrt{V}}{\sqrt{U_\pm - V}} \tan^{-1} \frac{F(\xi)}{\sqrt{U_\pm - V}}, \quad (82)$$

由此相应

$$f_1(\xi) = -V \operatorname{sech}^2 \left[\frac{\sqrt{V}}{k_0} (\xi - \xi_0) + \frac{1}{2} \alpha F_1(\xi) \right]. \quad (83)$$

2) 当 $|F(\xi)| > \sqrt{V}$ 情形

$$F_2(\xi) = -\sqrt{V} \coth \left[\frac{\sqrt{V}}{k_0} (\xi - \xi_0) + \frac{1}{2} \alpha(F(\xi)) \right], \quad (84)$$

此时相应

$$f_2(\xi) = V \operatorname{csch}^2 \left[\frac{\sqrt{V}}{k_0} (\xi - \xi_0) + \frac{1}{2} \alpha(F_2(\xi)) \right]. \quad (85)$$

由于 $F_1(\xi)$ 为非奇异函数, 因而 $f_1(\xi)$ 正是本文关于 ϕ^7 -非线性的新孤子解. 另一方面, $f_2(\xi)$ 是带有奇异性的孤波解, 这类孤波解在 KdV 方程 $u_t - 6uu_x + u_{xxx} = 0$ 也有这类型奇异性孤波.

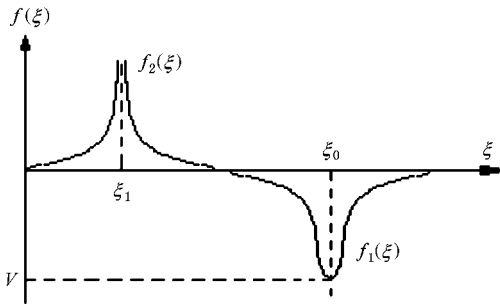


图 1 孤波解 $f_1(\xi)$ 和 $f_2(\xi)$

对于非奇异解来说, 若 $a_3 < 0$, k_0 为虚数, $f_1(\xi)$ 将不稳定. 因此, 对 \sqrt{V} 实数要求, 由于 $v > c_s$ 时, $b_3 > 0$, $b_4 > 0$, 若 $b_2 > 0$ 则 $a_3 > 0$ 可以满足非奇异解的存在. 并且当 $F(\xi) > \sqrt{U_{\pm} - V}$ 时, $f_1(\xi)$ 可近似表示成

$$f_1(\xi) = -V \operatorname{sech}^2 \left\{ \frac{\sqrt{V}}{k_0} (\xi - \xi_0) + \frac{\pi\sqrt{V}}{2\sqrt{U_{\pm} - V}} - F_1(\xi) \right\}, \quad (86)$$

$$F_1(\xi) = -\sqrt{V} \tanh \left\{ \frac{\sqrt{V}}{k_0} (\xi - \xi_0) + \frac{\pi\sqrt{V}}{2\sqrt{U_{\pm} - V}} - F_1(\xi) \right\}, \quad (87)$$

特别是当 $F(x) \gg \sqrt{U_{\pm} - V}$ 时,

$$f_1(x) = -V \operatorname{sech}^2 \left\{ -\frac{\sqrt{V}}{k_0} (\xi - \xi_0) + \frac{\pi\sqrt{V}}{2\sqrt{U_{\pm} - V}} \right\}, \quad (88)$$

这是我们熟知的标准孤子解形式.

4. 讨 论

本文考虑一维分子晶体相邻分子间静态作用势

和分子间(电)偶极-偶极相互作用, 采用分子投影算符表示一维分子晶体激子系统的模型哈密顿量在不计入非谐振效应 $K_1(u_n - u_{n-1})$ 情形下, 重点研究了激子运动学和动力学效应对激子-孤子运动的非线性行为的影响, 推导了激子-晶格运动耦合方程组并对 ϕ^5 次非线性方程的 Bell-型孤子和 Kink-型孤子, 和 ϕ^7 次非线性方程作出解析解, 给出了相应物理结果. 在分析研究中我们也舍去晶格振动的高阶效应 $\frac{\partial^2 u \partial \rho}{\partial x^2 \partial x}$ 和 $\frac{\partial u \partial^2 u \partial \rho}{\partial x \partial x^2 \partial x}$, 在旋波近似下略去非旋波效应 $e^{\pm i2\omega_0 t}$ 和 $e^{\pm i3\omega_0 t}$. 研究发现, 对于一维分子晶体激子-孤子运动问题, 激子的运动学和动力学效应造成的非线性效应有非常重要贡献, 应有所重新认识:

1) 从本文的分子晶体 model Hamiltonian (4) 理念出发, 晶格运动 \ddot{u} 的方程不再是非线性 Schrödinger 方程, 而是非线性 K-G 方程, 激子运动学效应在 \ddot{u} 的方程中出现修正项 $\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{1}{Mec_s^2} \lambda_n \dot{\rho}^2 \right\}$. 激子-孤子运动方程不再是非线性 Schrödinger 方程, 而是非线性 K-G 方程. 激子运动学效应出现修正项 $B_3 \dot{\rho}^2 \rho$ 与 $B_4 \dot{\rho}^2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}$, 而激子动力学效应产生修正项 $B_5 \dot{\rho}^2 \ddot{\rho}$. 从 model Hamiltonian (4) 我们不但涵盖 Davydov 等人的主干非线性项结果, 特别是发现激子运动学和动力学效应对 ϕ^3 , $\phi^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2}$ 有重要修正贡献, 而且得到一直以来没有出现的新的非线性项 $\phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)^2$, $\left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2}$, $\left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)^2 \frac{\partial \phi}{\partial \xi}$, 等项目.

2) ϕ 的非线性从 ϕ^5 次非线性增加到 ϕ^9 次非线性, 并且不是依靠晶格振动的高阶修正和泰勒展开的高阶项手段而获得与 Davydov 等人的非线性 Schrödinger 方程的 Sech-型孤波解不同, 本文得到的是非 Sech-型孤波解 (41) (60) 和超椭圆积分解 $f_1(\xi)$ 的 (83) 式.

3) 由于激子运动学和动力学效应对 ω_1 和 k_1 有重要修正, 因而对激子的有效质量有显著增加贡献, 而激子-孤子能量 Ω (Bell-型孤子和 Kink-型孤子) 有较负能量贡献, 对激子-孤子稳定存在极为有利. 结果还表明, Bell-型孤子出现于激子能带底部, 对于 Kink-型孤子而言, 若初始条件满足 $1 - (B_1 \phi_0^2 + B_3 \phi_0^2) k^2 < 0$, Kink 型孤子会出现激子能带顶部.

4) 与 KdV 型方程类似, 对 ϕ^7 次非线性方程存

在非奇异和奇异孤子解.

与 Davydov 等人的孤子理论方法不同,我们的研究是求解出激子-孤子解的稳定条件,并将它作为稳定的激子-孤子存在的先决条件.由于计及激子运动学和动力学非线性效应(吸引性性质)修正对 (b_2, b_3, b_4) 和 (b'_1, b'_2, b'_3) 的整合处理,使 (a_1, a_2) 和 (c_1, c_2) 有了相应的本质上修正.从而导致激子-孤子解波函数和它的稳定存在条件有了新的内容和修正.

1) Bell 型激子-孤子是一种以超声速 $(v > c_s)$ 沿一维链传播的孤立波,它出现在激子能带底部.

对于 Bell 型激子-孤子解(41),其稳定孤子解条件(43)中 $A = -\frac{a_1}{2a_0}, B = +\frac{1}{2a_0}(a_1^2 - 4a_0a_2)^{\frac{1}{2}}, a_0 > 0$. 考虑到 B 为实数, $a_0 > 0, a_2 > 0$, 因而 $a_1^2 > 4a_0a_2$, 此时,

$$A + B \approx -\frac{a_2}{a_1} > 0.$$

显然由于 $L = -\frac{\sqrt{a_2}}{a_1} \operatorname{cth} \sqrt{a_2} > 0$, 有 $a_1 < 0$, 因而 $A + B > 0$ 满足. 这样一来, 满足稳定解存在条件(43)必须同时存在(50)式成立, 考虑

$$a_1 = \frac{1}{2}[b_1(b_3 + b_4) - b_2] < 0,$$

$$a_2 = \frac{1}{3}b_2\left(b_3 + \frac{1}{2}b_4\right) - b_1b_3b_4 > 0,$$

由于 $b_1 = -a_0 < 0$, 从 a_1, a_2 表示式可知, 欲要同时满足 $a_1 < 0, a_2 > 0$ 就必须 (b_2, b_3, b_4) 均大于零, 而参量 $A_2 > 0, A_3 > 0, A_4 > 0$, 亦即满足条件(50)要求 (B_1, B_2, B_3, B_4) 均大于零, 这就要求 $v > c_s$, 因此,

$$v > c_s$$

是满足 Bell 型激子-孤子解稳定存在的前题条件.

2) Kink 型激子-孤子是一种以亚声速 $(v < c_s)$ 沿一维链传播的孤波, 它出现于激子能带顶部.

对于 Kink 型激子-孤子解(60), 其稳定孤子解存在条件(63)中 $A' = -\frac{c_1}{2c'_0}, B' = -\frac{1}{2c'_0}(c_1^2 - 4c'_0c_2)^{\frac{1}{2}}, c'_0 > 0$. 由于 B' 为实数, $c_1^2 > 4c'_0c_2$, 因而

$$A' + B' \approx -\frac{c_1}{c_0} + \frac{c_2}{c_1} < 0,$$

$$B' \approx -\frac{c_1}{2c'_0} + \frac{c_2}{c_1} < 0.$$

因而满足稳定解(60)存在条件(63)要求

$$c_2 < \frac{c_1^2}{c'_0}.$$

从前面 Kink-型孤子解 $A\eta'^2 = c_2 > 0$, 而孤局域 $L' = \frac{2\sqrt{c_2}}{c_1} \operatorname{ctg}(\sqrt{c_2}/2) > 0$, 要求 $c_1 > 0$, 因而稳定孤子解条件要求同时存在

$$c_1 > 0, c_2 > 0, c_2 < \frac{c_1^2}{c'_0}.$$

考虑 $c_1 = \frac{1}{2}[b'_1(b'_3 + b'_4) - b'_2] > 0, c_2 = \frac{1}{3}b'_2\left(b'_3 + \frac{1}{2}b'_4\right) - b'_1b'_3b'_4 > 0$, 由于 $b'_1 = -c'_0 < 0$, 从 c_1 与 c_2 表示式可知, 同时满足 $c_1 > 0, c_2 > 0$, 必须 (b'_2, b'_3, b'_4) 均小于零, 这样导致必须 (B_1, B_2, B_3, B_4) 均小零, 这就要求

$$v < c_s,$$

考虑 $b'_i = b_i/\alpha_s^2, b'_i < b_i$, 由于 $\alpha_s^2 \gg 1, \alpha_s^2$ 的幂次修正使 $c_2 \ll c_1$, 也使 c'_0 显著变小, 因而 $c_2 < \frac{c_1^2}{c'_0}$ 满足.

- [1] Davydov A S, Kislukha N I 1973 *Phys. Stat. Sol. (b)* **59** 465
 [2] Davydov A S, Kislukha N I 1976 *Zh. Eksper. Teor. Fiz.* **71** 1090
 [3] Mabuchi M 1976 *J. Phys. Soc. Japan* **41** 735
 [4] Davydov A S, Eremko 1977 *Ukr. Fiz. Zh.* **22** 881
 [5] Davydov A S 1982 *Uspelhi Fiz. Nauk* **138** 603
 [6] Pushkarov K I, Primatarova M T 1984 Preprint IC/84/31, ICTP, Trieste
 [7] Zhou Y C, Yu C F 1992 *Acta Phys. Sin.* **41** 2061 (in Chinese) 周义昌、余超凡 1992 物理学报 **41** 2016

- [8] Yu C F, Zhou Y C 1994 *Acta Phys. Sin.* **43** 1677 (in Chinese) 余超凡、周义昌 1994 物理学报 **43** 1677
 [9] Yu C F, Chen B, Hui F 1996 *Commun. Theor. Phys.* **25** 19
 [10] Takeno S, Mabuchi M 1973 *Prog. Theorr. Phys.* **50** 1848
 [11] Takeno S 1983 *Prog. Theor. Phys.* **69** 1798
 [12] Todorovic D, Ristovski L J, Tosic R S 1995 *Phys. Stat. Sol. (b)* **190** 251
 [13] Dyson F J 1956 *Phys. Rev.* **102** 1217
 [14] Chatterjee R, Amerl P 1993 *Phys. Stat. Sol. (b)* **180** K15

The kinematic and dynamic nonlinear effects in the exciton-soliton motion in one-dimensional molecular crystals^{*}

Luo Zhi-Hua[†] Yu Chao-Fan

(*Department of Physics, Guangdong Education Institute, Guangzhou 510310, China*)

(Received 3 September 2007; revised manuscript received 22 November 2007)

Abstract

Based on the static interaction potential and the (electrical) dipole-dipole interaction between neighboring molecules, the Hamiltonian model of the exciton system in one-dimensional molecular crystal can be expressed by means of the molecular projection operators. In the case of approximate resonance, according to our findings with respect to the kinematics and dynamics effects of the exciton motion, the Klein-Gordon-type equation set for the time evolution of the exciton-soliton and lattice motion has been obtained. With regard to the solitary wave function ϕ , it was found that the kinematics and dynamics effects of exciton motion not only greatly contributed to its nonlinear terms ϕ^3 and $\phi^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2}$, but also led to its important high-order nonlinear terms. We solved its ϕ^5 and ϕ^7 nonlinear equation in an analytical form. In particular the solitary wave solution for the ϕ^5 -nonlinear equation has been studied in detail under the Bell-type and kink-type boundary conditions. Then we found that the kinematics and dynamics effects of exciton motion contributed remarkably to the increase of exciton effective mass, and makes further negative correction to the exciton-soliton energy Ω . As for the Bell-type soliton movement in supersonic speed $v > c_s$ and the Kink-type soliton movement in subsonic speed $v < c_s$, and the types of the soliton bound states appear to be situated at the bottom and the top of the exciton energy band respectively.

Keywords: one-dimensional molecular crystals, exciton-soliton, kinematic and dynamic effects, nonlinear Klein-Gordon equation

PACC: 6320K, 7138, 7215N

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10574163).

[†] E-mail: lo-zh@126.com