

聚乙炔孤子的二维局域振动模 及其键弯曲势的影响*

姚凯伦 李占杰 邢 彪

华中理工大学物理系, 武汉, 430074

1990 年 12 月 22 日收到; 1991 年 7 月 22 日收到修改稿

本文考虑了反式聚乙炔的平面结构, 在二维空间内研究了孤子的局域振动模, 并在此基础上讨论了键弯曲势对孤子局域模的影响。 结果发现: 1) 晶格在垂链方向的振幅与链向的可比拟; 2) 当耦合参数 λ 取定值时, 产生新的局域模(与 SSH 模型比较), 且局域模的数目随着键弯曲势参数 K 的增加而增多, 其局域性也随之增强。

PACC: 6320P; 6140K

一、引 言

实际材料的聚乙炔链是由 (CH) 单体组成的, 具有二维结构的高分子链。而人们常使用的 SSH 模型^[1]和 TLM 模型^[2]都将聚乙炔简化为一维链。一维链的实质是忽略聚乙炔的平面结构, 假定垂链方向的晶格振动幅度比链向的小得多。有关这方面的研究可参见文献 [1—10]。邢彪和姚凯伦考虑了聚乙炔的平面结构, 在二维空间内研究了 trans-(CH)_x 中极化子的局域振动模^[11], 结果发现: 1) 晶格在垂链方向的振动幅度与链向的可比拟; 2) 耦合参数 $\lambda=0.2$ 时, 有 10 个局域振动模存在, 而在 SSH 模型中只有 7 个局域模^[12]。但上述工作中没有考虑聚乙炔的键弯曲势能项^[13]——bond-bending 项的影响。本文在计及键弯曲势能项时, 讨论了 trans-(CH)_x 中孤子附近的二维局域模。

二、理论推导

我们将 SSH 模型推广到二维空间, 考虑 (CH)_x 的平面结构, 则哈密顿量可写成

$$H = - \sum_{n,j} (t_0 - \alpha \delta r_{n,n+1}) (C_{n+1,j}^\dagger C_{n,j} + \text{h.c.}) + \frac{K}{2} \sum_n (\delta r_{n,n+1})^2 + \frac{M}{2} \sum_n (\dot{r}_n)^2 + \frac{K'}{2} \sum_{n=2}^{N-1} (\delta \theta_n)^2, \quad (1)$$

式中 $\frac{K'}{2} \sum_n (\delta \theta_n)^2$ 是由于键角的变化而引起的键弯曲势能项^[13], t_0 表示无电子晶格作用

* 国家自然科学基金资助的课题。

时最近邻电子的跃迁, α 是电子晶格耦合序参量, K 是原子基团间弹性力常数; M 是基团质量, K' 是键弯曲势的弹性系数, $\delta r_{n,n+1}$ 是第 n 个格点到第 $n+1$ 个格点键长的变化.

在哈密顿量 (1) 式中, 引入

$$\delta U_{n,n+1} = \frac{\alpha}{r_0} \delta r_{n,n+1}, \quad \lambda = \frac{2\alpha^2}{\pi K r_0}, \quad \pi = \omega_Q r_0, \quad \tilde{K} = \frac{K'}{r_0}, \quad (2)$$

式中 $\omega_Q = \left(\frac{4K}{M}\right)^{1/2}$ 是裸光频率, 这样 (1) 式写成

$$H/r_0 = H_0 + \frac{1}{\lambda\pi} \sum_n (\delta U_{n,n+1})^2 + \frac{4}{\lambda\pi} \sum_n (\dot{u}_n)^2 + \frac{\tilde{K}}{2} \sum_n (\delta\theta_n)^2, \quad (3)$$

$H_0 = - \sum_{n,j} (1 - \delta U_{n,n+1})(C_{n+1,j}^+ C_{n,j} + \text{h.c.})$ 是电子部分的哈密顿量.

从 (3) 式可以得出: 若能量以 r_0 来度量, 频率单位为 ω_Q , 则系统的性质由 λ 和 $\tilde{K}$ 两个参数来决定.

对于开链聚乙炔, 采用自然边界条件^[14], 根据 Kivelson 建议, 在哈密顿量中加入一个线性项^[14]

$$V' = K_0 \sum_n \delta U_{n,n+1} = \frac{4}{\pi} \sum_n \delta U_{n,n+1}, \quad (4)$$

则开链聚乙炔的哈密顿量为

$$H/r_0 = H_0 + \frac{1}{\lambda\pi} \sum_n (\delta U_{n,n+1})^2 + \frac{4}{\lambda\pi} \sum_n (\dot{u}_n)^2 + \frac{\tilde{K}}{2} \sum_n (\delta\theta_n)^2 + \frac{4}{\pi} \sum_n \delta U_{n,n+1}. \quad (5)$$

设 $\delta U'_{n,n+1}$ 是孤子静态位形, $\delta U_{n,n+1}$ 微小的偏离 $\delta U'_{n,n+1}$, 则

$$\begin{aligned} \delta U_{n,n+1} &= q_{n+1} \cdot (u_{n+1} - u_n) + \delta u'_{n,n+1} \\ &= \sin\theta(x_{n+1} - x_n) + (-1)^{n+1} \cos\theta(y_{n+1} - y_n) + \delta u'_{n,n+1}, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} (\delta\theta_n)^2 &= \frac{1}{3r_{n,n-1}^2} [\sin\theta(x_n - x_{n-1}) + 3(-1)^{n+1} \cos\theta(y_n - y_{n-1})]^2 \\ &+ \frac{1}{3r_{n+1,n}^2} [\sin\theta(x_{n+1} - x_n) + 3(-1)^n \cos\theta(y_{n+1} - y_n)]^2 \\ &+ \frac{2}{3r_{n,n-1}r_{n+1,n}} [\sin\theta(x_n - x_{n-1}) + 3(-1)^{n+1} \cos\theta(y_n - y_{n-1})] \\ &\quad \cdot [\sin\theta(x_{n+1} - x_n) + 3(-1)^n \cos\theta(y_{n+1} - y_n)], \end{aligned} \quad (7)$$

式中 θ 是相邻键的键角一半 (等于 60°), q_{n+1} 是从第 n 个格点到第 $n+1$ 个格点的单位矢量, $r_{n+1,n}$ 是第 n 个格点到第 $n+1$ 个格点键长的大小, $u_n = x_n i + y_n j$. 分别将 (6), (7) 式代入 (5) 式, 则哈密顿量为

$$\begin{aligned} H/r_0 &= H' + H'' + \frac{1}{\lambda\pi} \sum_n (\delta U_{n,n+1} - \delta U'_{n,n+1})^2 + \frac{4}{\lambda\pi} \sum_n (\dot{u}_n)^2 \\ &+ K_0 \sum_n q_{n+1} \cdot (u_{n+1} - u_n) + \frac{2}{\lambda\pi} \sum_n \delta U'_{n,n+1} q_{n+1} \cdot (u_{n+1} - u_n) \end{aligned}$$

$$+ \frac{\tilde{K}}{6} \sum_n \left\{ \frac{1}{r_{n,n-1}} [\sin \theta(x_n - x_{n-1}) + 3(-1)^{n+1} \cos \theta(y_n - y_{n-1})] \right. \\ \left. + \frac{1}{r_{n+1,n}} [\sin \theta(x_{n+1} - x_n) + 3(-1)^n \cos \theta(y_{n+1} - y_n)] \right\}^2, \quad (8)$$

H' 是孤子静态哈密顿量, 即

$$H' = - \sum_{n,i} (1 - \delta U'_{n,n+1})(C_{n+1,i}^\dagger C_{n,i} + \text{h.c.}) + \frac{1}{\lambda \pi} \sum_n (\delta U'_{n,n+1})^2 \\ + K_0 \sum_n \delta U'_{n,n+1}, \quad (9)$$

H'_e 是电子部分的微扰哈密顿量, 即

$$H'_e = \sum_n \mathbf{q}_{n+1} \cdot (\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n)(C_{n+1,i}^\dagger C_{n,i} + \text{h.c.}). \quad (10)$$

计算 H'_e 至二阶微扰, 系统的总能量为

$$E = E' + \frac{1}{2} \sum_{m,n} V_{m,n}^{\alpha\beta} \eta_m^\alpha \eta_n^\beta + \frac{4}{\lambda \pi} \sum_n (\dot{\mathbf{u}}_n)^2, \quad (11)$$

E' 是孤子的静态能量, $\alpha, \beta = 1, 2, \eta_n^1 = x_n, \eta_n^2 = y_n$. 设 $\varepsilon'_i, \phi'_i(n)$ 分别是电子哈密顿量 H_e 的本征值和本征矢, 于是, 自洽方程组为

$$\varepsilon'_i \phi'_i(n) = -(1 - \delta U_{n-1,n}) \phi'_i(n-1)(1 - \delta_{n1}) \\ - (1 - \delta U_{n,n+1}) \phi'_i(n+1)(1 - \delta_{nN}), \\ \delta U_{n,n+1} = -\frac{\lambda \pi}{2} \left(2 \sum_{\substack{i,j \\ (\text{occ})}} \phi'_i(n) \phi'_j(n+1) + \frac{4}{\pi} \right), \quad (12)$$

上式得出孤子图象描述的是键长的变化, 而 SSH 模型的孤子图象描述的是键长在链向投影的变化. 振动矩阵元为

$$V_{mn}^{\alpha\beta} = 2 \sum_{\substack{i,j \\ (\text{occ})}} \sum_{i \neq j} \frac{D_{ij}^{\alpha\alpha} D_{ij}^{\beta\beta}}{\varepsilon_i - \varepsilon_j} + M_{mn}^{\alpha\beta} + M'_{mn}{}^{\alpha\beta}, \quad (13)$$

$$D_{ij}^{\alpha\alpha} = C_{ij}^\alpha q_n^\alpha (1 - \delta_{n1}) - C_{ij}^{\alpha+1} q_{n+1}^\alpha (1 - \delta_{nN}), \\ q_n^\alpha = \sin \theta, q_n^2 = \cos \theta, C_{ij}^\alpha = \phi_i(n) \phi_j(n-1) + \phi_j(n) \phi_i(n-1), \\ M_{mn}^{\alpha\beta} = \frac{2}{\lambda \pi} [(2 - \delta_{n1} - \delta_{nN})(\sin^2 \theta \delta_{m,n} \delta_{\alpha_1} \delta_{\beta_1} + \cos^2 \theta \delta_{m,n} \delta_{\alpha_2} \delta_{\beta_2}) \\ + (\delta_{nN} - \delta_{n1}) \sin \theta \cos \theta (-1)^n \delta_{m,n} \delta_{\alpha_1} \delta_{\beta_2} \\ + (\delta_{nN} - \delta_{n1}) \sin \theta \cos \theta (-1)^n \delta_{m,n} \delta_{\alpha_2} \delta_{\beta_1} \\ - (1 - \delta_{nN}) \sin^2 \theta \delta_{m,n+1} \delta_{\alpha_1} \delta_{\beta_1} - (1 - \delta_{n1}) \sin^2 \theta \delta_{m,n-1} \delta_{\alpha_1} \delta_{\beta_1} \\ - (1 - \delta_{nN}) \cos^2 \theta \delta_{m,n+1} \delta_{\alpha_2} \delta_{\beta_2} - (1 - \delta_{n1}) \cos^2 \theta \delta_{m,n-1} \delta_{\alpha_2} \delta_{\beta_2} \\ - (1 - \delta_{nN}) \sin \theta \cos \theta (-1)^{n+1} \delta_{m,n+1} \delta_{\alpha_1} \delta_{\beta_2} \\ - (1 - \delta_{n1}) \sin \theta \cos \theta (-1)^n \delta_{m,n-1} \delta_{\alpha_2} \delta_{\beta_1} \\ - (1 - \delta_{nN}) \sin \theta \cos \theta (-1)^{n+1} \delta_{m,n+1} \delta_{\alpha_2} \delta_{\beta_1} \\ - (1 - \delta_{n1}) \sin \theta \cos \theta (-1)^n \delta_{m,n-1} \delta_{\alpha_1} \delta_{\beta_2}], \quad (14)$$

$$M'_{mn}{}^{\alpha\beta} = \frac{\tilde{K}}{3} \sin^2 \theta \left[\frac{1}{r_{n,n-1}^2} (2 - 2\delta_{n1} - \delta_{nN} - \delta_{n2}) + \frac{1}{r_{n+1,n}^2} (2 - 2\delta_{nN} - \delta_{n,n-1} - \delta_{n1}) \right]$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{2}{r_{n,n-1}r_{n+1,n}} (1 - \delta_{n1} - \delta_{nN}) \Big] \delta_{m,n} \delta \alpha_1 \delta \beta_1 \\
& - \frac{\tilde{K}}{3} \sin^2 \theta \left[\frac{1}{r_{n+1,n}^2} (2 - 2\delta_{nN} - \delta_{n,N-1} - \delta_{n1}) - \frac{1}{r_{n,n-1}r_{n+1,n}} (1 - \delta_{n1} - \delta_{nN}) \right. \\
& \quad \left. - \frac{1}{r_{n+1,n}r_{n+2,n+1}} (1 - \delta_{nN} - \delta_{n,N-1}) \right] \delta_{m,n+1} \delta \alpha_1 \delta \beta_1 \\
& - \frac{\tilde{K}}{3} \sin^2 \theta \left[\frac{1}{r_{n+1,n}^2} (2 - 2\delta_{n1} - \delta_{nN} - \delta_{n2}) - \frac{1}{r_{n-1,n-2}r_{n,n-1}} (1 - \delta_{n1} - \delta_{n2}) \right. \\
& \quad \left. - \frac{1}{r_{n,n-1}r_{n+1,n}} (1 - \delta_{n1} - \delta_{nN}) \right] \delta_{m,n-1} \delta \alpha_1 \delta \beta_1 \\
& - \frac{\tilde{K}}{3} \sin^2 \theta \left[\frac{\delta_{m,n+2}}{r_{n+1,n}r_{n+2,n+1}} (1 - \delta_{nN} - \delta_{n,N-1}) \right. \\
& \quad \left. + \frac{\delta_{m,n-2}}{r_{n-1,n-2}r_{n,n-1}} (1 - \delta_{n1} - \delta_{n2}) \right] \delta \alpha_1 \delta \beta_1 \\
& + 3\tilde{K} \cos^2 \theta \left[\frac{1}{r_{n,n-1}^2} (2 - 2\delta_{n1} - \delta_{n2} - \delta_{nN}) + \frac{1}{r_{n+1,n}^2} (2 - 2\delta_{nN} - \delta_{n1} - \delta_{n,N-1}) \right. \\
& \quad \left. + \frac{2}{r_{n,n-1}r_{n+1,n}} (1 - \delta_{n1} - \delta_{nN}) \right] \delta_{m,n} \delta \alpha_2 \delta \beta_2 \\
& - 3\tilde{K} \cos^2 \theta \left[\frac{1}{r_{n+1,n}^2} (2 - 2\delta_{nN} - \delta_{n,N-1} - \delta_{n1}) \right. \\
& \quad \left. + \frac{1}{r_{n,n-1}r_{n+1,n}} (1 - \delta_{n1} - \delta_{nN}) + \frac{1}{r_{n+1,n}r_{n+2,n+1}} (1 - \delta_{nN} - \delta_{n,N-1}) \right] \delta_{m,n+1} \delta \alpha_2 \delta \beta_2 \\
& - 3\tilde{K} \cos^2 \theta \left[\frac{1}{r_{n,n-1}^2} (2 - 2\delta_{n1} - \delta_{n2} - \delta_{nN}) + \frac{1}{r_{n,n-1}r_{n-1,n-2}} (1 - \delta_{n1} - \delta_{n2}) \right. \\
& \quad \left. + \frac{1}{r_{n,n-1}r_{n+1,n}} (1 - \delta_{n1} - \delta_{nN}) \right] \delta_{m,n-1} \delta \alpha_2 \delta \beta_2 \\
& + 3\tilde{K} \cos^2 \theta \left[\frac{\delta_{m,n+2}}{r_{n+1,n}r_{n+2,n+1}} (1 - \delta_{nN} - \delta_{n,N-1}) \right. \\
& \quad \left. + \frac{\delta_{m,n-2}}{r_{n,n-1}r_{n-1,n-2}} (1 - \delta_{n1} - \delta_{n2}) \right] \delta \alpha_2 \delta \beta_2 \\
& + \tilde{K} \sin \theta \cos \theta \left[\frac{(-1)^{n-1}}{r_{n,n-1}^2} (2 - 2\delta_{n1} - \delta_{n2} - \delta_{nN}) \right. \\
& \quad \left. + \frac{(-1)^n}{r_{n+1,n}^2} (2 - 2\delta_{nN} - \delta_{n1} - \delta_{n,N-1}) \right] \delta_{m,n} \delta \alpha_1 \delta \beta_2 \\
& + \tilde{K} \sin \theta \cos \theta \left[\frac{(-1)^{n-1}}{r_{n,n-1}^2} (2 - 2\delta_{n1} - \delta_{n2} - \delta_{nN}) \right. \\
& \quad \left. + \frac{(-1)^n}{r_{n+1,n}^2} (2 - 2\delta_{nN} - \delta_{n1} - \delta_{n,N-1}) \right] \delta_{m,n} \delta \alpha_2 \delta \beta_1 \\
& - \tilde{K} \sin \theta \cos \theta \left[\frac{(-1)^n}{r_{n+1,n}^2} (2 - 2\delta_{nN} - \delta_{n1} - \delta_{n,N-1}) - \frac{(-1)^{n+1}}{r_{n,n-1}r_{n+1,n}} (1 - \delta_{n1} - \delta_{nN}) \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{(-1)^n}{r_{n+1,n} r_{n+2,n+1}} (1 - \delta_{nN} - \delta_{n,N-1}) \Big] \delta_{m,n+1} \delta \alpha_1 \delta \beta_2 \\
& - \tilde{K} \sin \theta \cos \theta \left[\frac{(-1)^{n-1}}{r_{n,n-1}^2} (2 - 2\delta_{n1} - \delta_{nN} - \delta_{n2}) - \frac{(-1)^{n-1}}{r_{n,n-1} r_{n-1,n-2}} (1 - \delta_{n1} - \delta_{n2}) \right. \\
& \left. - \frac{(-1)^n}{r_{n,n-1} r_{n+1,n}} (1 - \delta_{n1} - \delta_{nN}) \right] \delta_{m,n-1} \delta \alpha_1 \delta \beta_2 \\
& - \tilde{K} \sin \theta \cos \theta \left[\frac{(-1)^n}{r_{n+1,n}^2} (2 - 2\delta_{nN} - \delta_{n,N-1} - \delta_{n1}) - \frac{(-1)^n}{r_{n,n-1} r_{n+1,n}} (1 - \delta_{n1} - \delta_{nN}) \right. \\
& \left. - \frac{(-1)^{n+1}}{r_{n+1,n} r_{n+2,n+1}} (1 - \delta_{nN} - \delta_{n,N-1}) \right] \delta_{m,n+1} \delta \alpha_2 \delta \beta_1 \\
& - \tilde{K} \sin \theta \cos \theta \left[\frac{(-1)^{n-1}}{r_{n,n-1}^2} (2 - 2\delta_{n1} - \delta_{nN} - \delta_{n2}) - \frac{(-1)^n}{r_{n,n-1} r_{n-1,n-2}} (1 - \delta_{n1} - \delta_{n2}) \right. \\
& \left. - \frac{(-1)^{n+1}}{r_{n,n-1} r_{n+1,n}} (1 - \delta_{n1} - \delta_{nN}) \right] \delta_{m,n-1} \delta \alpha_2 \delta \beta_1 \\
& - \tilde{K} \sin \theta \cos \theta \left[\frac{(-1)^n}{r_{n+1,n} r_{n+2,n+1}} \delta_{m,n+2} (1 - \delta_{nN} - \delta_{n,N-1}) \right. \\
& \left. + \frac{(-1)^{n-1}}{r_{n,n-1} r_{n-1,n-2}} \delta_{m,n-2} (1 - \delta_{n1} - \delta_{n2}) \right] \delta \alpha_1 \delta \beta_2 \\
& - \tilde{K} \sin \theta \cos \theta \left[\frac{(-1)^n}{r_{n,n-1} r_{n-1,n-2}} \delta_{m,n-2} (1 - \delta_{n1} - \delta_{n2}) \right. \\
& \left. + \frac{(-1)^{n+1}}{r_{n+1,n} r_{n+2,n+1}} \delta_{m,n+2} (1 - \delta_{nN} - \delta_{n,N-1}) \right] \delta \alpha_2 \delta \beta_1. \tag{15}
\end{aligned}$$

三、结果与讨论

当 $N = 81, \lambda = 0.2$ 时, 分别讨论了 $\tilde{K} = 0.0, 0.35, 0.5, 0.65, 0.70, 0.75, 1.0$ 时孤子局域振动模的性质。为了使结果更为明瞭, 将各局域模的性质随 $\tilde{K}$ 的变化情况列入表 1 中。

表 1 局域模的性质与 $\tilde{K}$ 的关系

局域模	g_1	g_2	g_3	g_4	g_5	g_6	g_7	g_8	g_9	g_{10}	g_{11}	g_{12}
频率	$\frac{\omega_1}{\omega_Q}$	$\frac{\omega_2}{\omega_Q}$	$\frac{\omega_3}{\omega_Q}$	$\frac{\omega_4}{\omega_Q}$	$\frac{\omega_5}{\omega_Q}$	$\frac{\omega_6}{\omega_Q}$	$\frac{\omega_7}{\omega_Q}$	$\frac{\omega_8}{\omega_Q}$	$\frac{\omega_9}{\omega_Q}$	$\frac{\omega_{10}}{\omega_Q}$	$\frac{\omega_{11}}{\omega_Q}$	$\frac{\omega_{12}}{\omega_Q}$
$\tilde{K}$												
0.00	0.000	0.436	0.477	0.643	0.672	0.692	—	—	—	—	—	—
0.35	0.000	0.446	0.507	0.644	0.672	0.692	—	—	—	—	—	—
0.50	0.000	0.446	0.512	0.644	0.672	0.692	—	0.589	—	—	—	—
0.65	0.000	0.447	0.515	0.644	0.672	0.692	0.606	—	—	—	—	—
0.70	0.000	0.448	0.515	0.645	0.672	0.692	0.613	0.615	0.617	—	—	—
0.75	0.000	0.449	0.516	0.644	0.672	0.692	0.620	0.622	0.624	—	—	—
1.0	0.000	0.449	0.518	0.644	0.672	0.692	0.652	0.653	0.655	0.632	0.633	0.656

从表 1 可以看出: 无论 $\tilde{K}$ 取什么值, 局域模 g_1, g_2, g_3, g_4, g_5 和 g_6 均存在, 且 $g_1,$

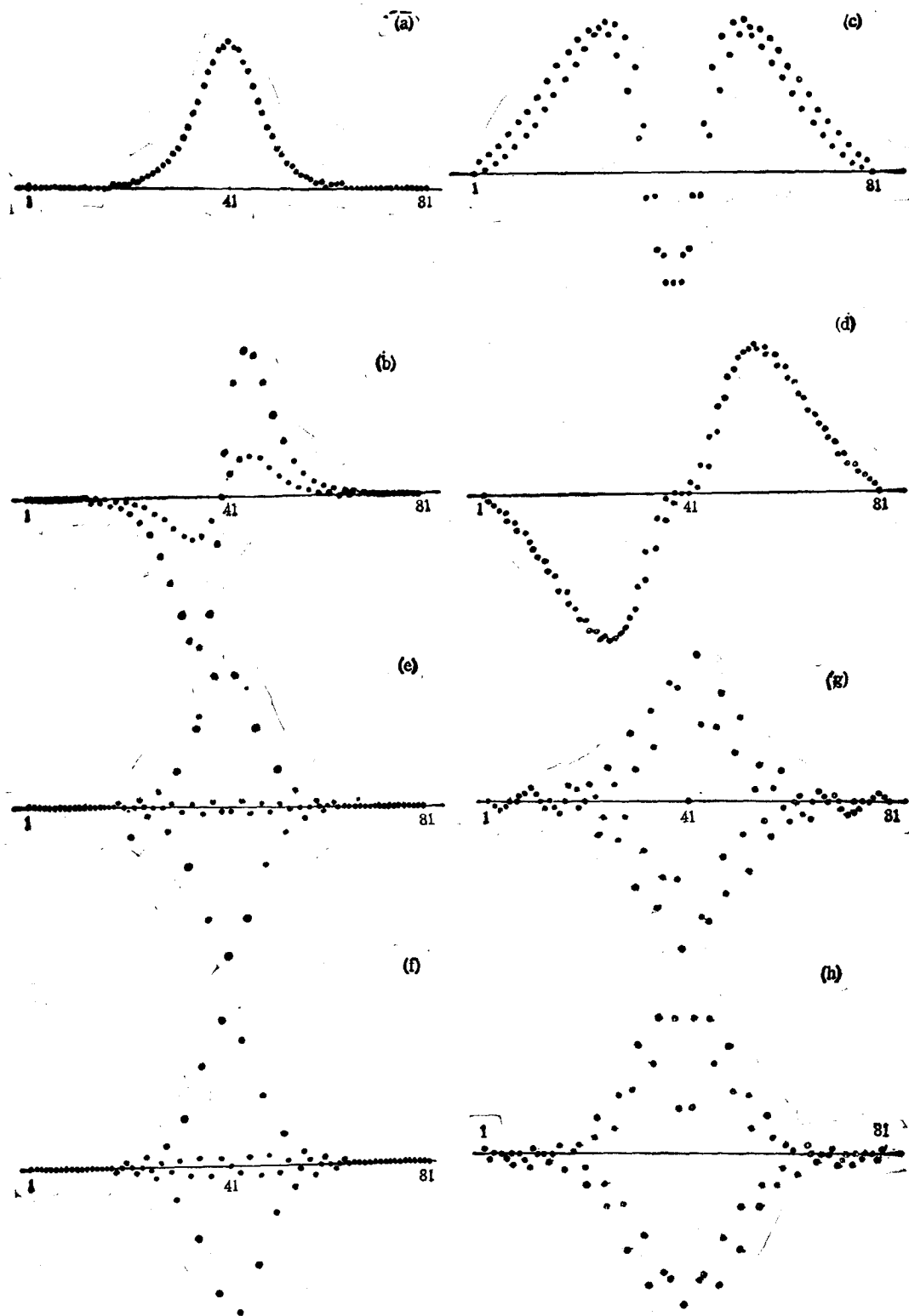


图 1

(a) 为局域模 g_1 在 x 方向上的振动图形 $x_1^{\max} = 0.306$; (b) 为局域模 g_1 在 y 方向上的振动图形 $y_1^{\max} = 0.023$; (c) 为局域模 g_3 在 x 方向上的振动图形 $x_3^{\max} = 0.105$; (d) 为局域模 g_3 在 y 方向上的振动图形 $y_3^{\max} = 0.152$; (e) 为局域模 g_3 在 x 方向上的振动图形 $x_6^{\max} = 0.385$; (f) 为局域模 g_3 在 y 方向上的振动图形 $y_5^{\max} = 0.218$; (g) 为局域模 g_6 在 x 方向上的振动图形 $x_6^{\max} = 0.285$; (h) 为局域模 g_6 在 y 方向上的振动图形 $y_6^{\max} = 0.123$

g_1, g_3 和 g_5 在 x 方向上的局域模图形类似于 SSH 模型中的 4 个局域模。

图 1(a)–(h) 分别给出了局域模 g_1, g_3, g_5 和 g_6 的振动图形。图 2 给出了 $\tilde{K}=0.70, 0.75$ 时局域模 g_8 在 x 方向的振动图形。

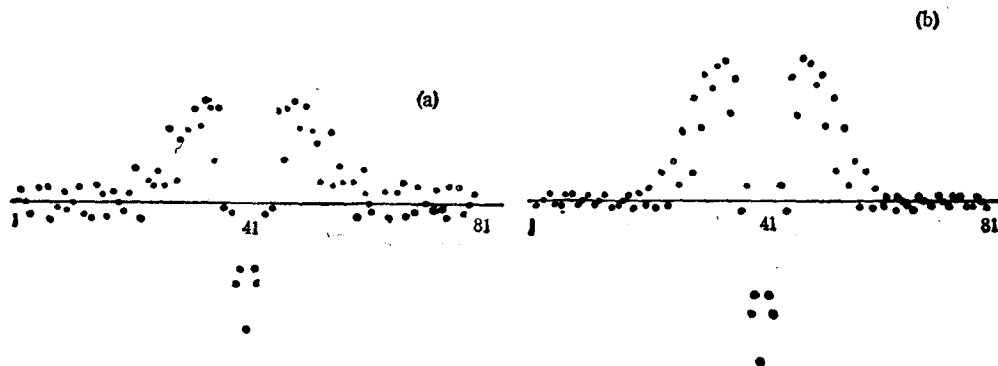


图 2

(a) 为局域模 g_8 在 $\tilde{K}=0.70$ 时, x 方向上的振动图形; (b) 为局域模 g_8 在 $\tilde{K}=0.75$ 时, x 方向上的振动图形

由图 2 可以看出: 随着 $\tilde{K}$ 的增大, 局域模的局域性增强。

图 3(a)–(f) 给出了局域模 g_7, g_9, g_{11} 的振动图形。

表 2、表 3 和表 4 分别给出了 $\tilde{K}=0.0, 0.75, 1.0$ 时, 各局域模的振幅和宇称。

由表 2、表 3 和表 4 可知: 各个局域模在 x, y 方向上的宇称相反。除了个别局域模外, 其余的局域模在两个方向上的振幅可比拟。

表 2 $\tilde{K}=0.0$ 时各局域模性质

局 域 模	频率 ω/ω_Q	$x_i^{\max}$ (宇称)	$y_i^{\max}$ (宇称)
g_1	0.000	0.306 (偶)	0.023 (奇)
g_2	0.436	0.217 (奇)	0.094 (偶)
g_3	0.477	0.105 (偶)	0.152 (奇)
g_4	0.643	0.200 (奇)	0.140 (偶)
g_5	0.672	0.385 (偶)	0.218 (奇)
g_6	0.692	0.285 (奇)	0.123 (偶)

注: $x_i^{\max}, y_i^{\max}$ 分别是第 i 个局域模在 x, y 方向上振动的最大振幅。

一个很有趣的现象: $\tilde{K}=0.75$ 时, g_7, g_9 和 g_{11} 在 y 方向上的振动位形类似于 g_1, g_2 和 g_3 在 x 方向上的振动位形。

在激光诱导的反式聚乙炔中, 可观察到下列红外吸收谱线^[16]: 1370cm^{-1} ; 1250cm^{-1} ; $500\text{--}600\text{cm}^{-1}$, 其中 1370cm^{-1} 和 1250cm^{-1} 是两根靠得很近的吸收谱线。一般认为: 1370cm^{-1} 对应于局域模 g_3 (频率约是 1360cm^{-1})^[16]。但对另外两条谱线的解释存在争议^[15]。孙鑫等人认为 1250cm^{-1} 对应于交错模 g_5 (频率约是 1050cm^{-1})^[15], 但是 g_5 是在布里渊区边界上的局域模, 引起的共振吸收很弱。而本文新出现的局域模 g_7, g_9 和 g_{11} 的振动频率都约是 1130cm^{-1} , 它更接近于 1250cm^{-1} 。故此, 我们认为谱线 1250cm^{-1} 是由新出现的局域模中具有红外活性的某一个(或几个)局域模引起的。

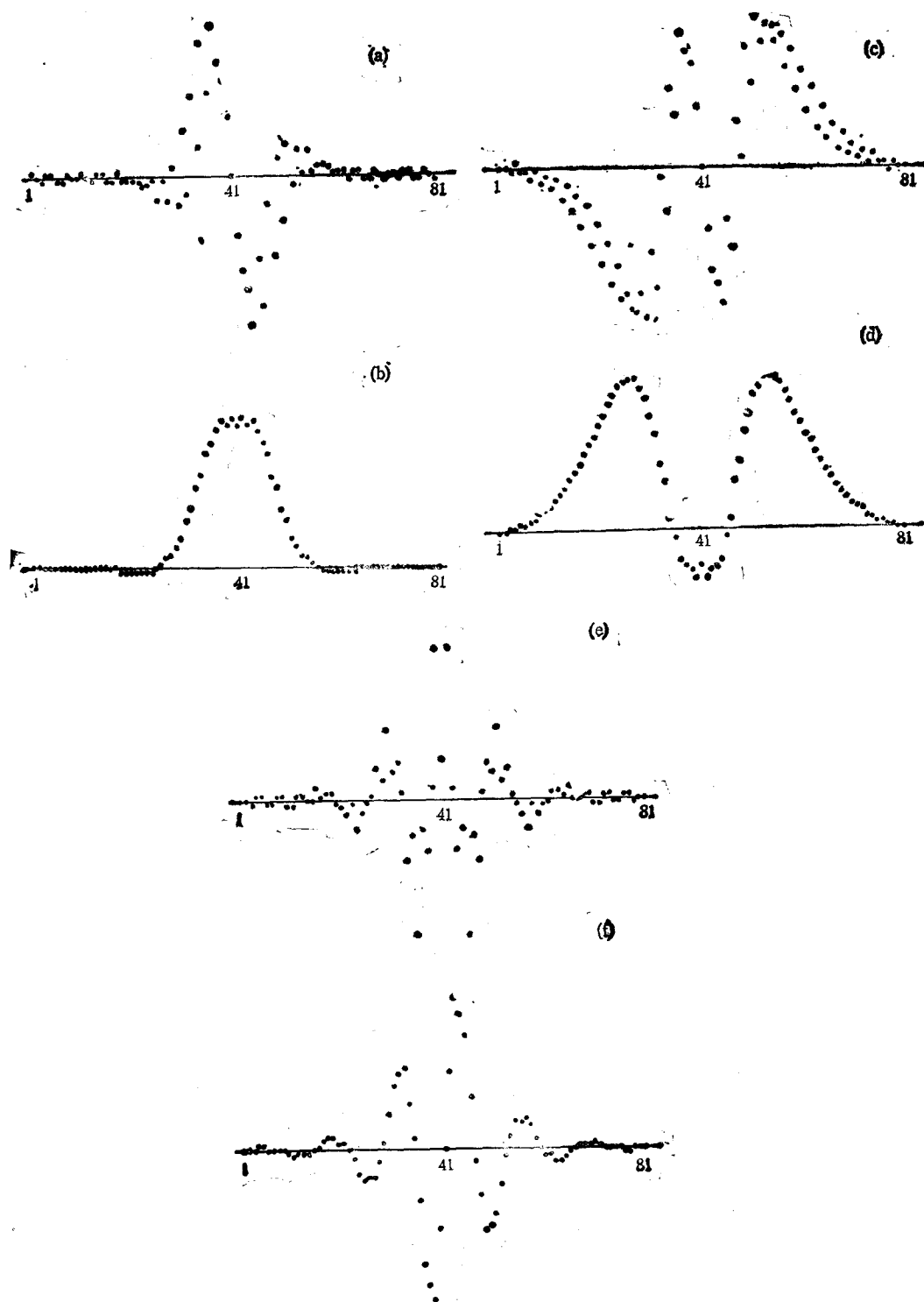


图 3

(a) 为 $\bar{K} = 0.75$ 局域模 g , 在 x 方向上的振动图形 $x_7^{\max} = 0.056$; (b) 为 $\bar{K} = 0.75$ 局域模 g , 在 y 方向上的振动图形 $y_7^{\max} = 0.275$; (c) 为 $\bar{K} = 0.75$ 局域模 g , 在 x 方向上的振动图形 $x_7^{\max} = 0.066$; (d) 为 $\bar{K} = 0.75$ 局域模 g , 在 y 方向上的振动图形 $y_7^{\max} = 0.199$; (e) 为 $\bar{K} = 1.0$ 局域模 g_{11} 在 x 方向上的振动图形 $x_{11}^{\max} = 0.196$; (f) 为 $\bar{K} = 1.0$ 局域模 g_{11} 在 y 方向上的振动图形 $y_{11}^{\max} = 0.326$

表 3 $\bar{K} = 0.75$ 时各局域模性质

局域模	字 称		振 幅	
	x	y	$x_i^{\max}$	$y_i^{\max}$
g_1	偶	奇	0.299	0.013
g_2	奇	偶	0.236	0.034
g_3	偶	奇	0.190	0.048
g_4	奇	偶	0.212	0.158
g_5	偶	奇	0.382	0.221
g_6	奇	偶	0.262	0.117
g_7	奇	偶	0.056	0.275
g_8	偶	奇	0.080	0.236
g_9	奇	偶	0.066	0.199

注: $x_i^{\max}, y_i^{\max}$ 分别是各局域模在 x, y 方向上振动的最大振幅。

表 4 $\bar{K} = 1.0$ 时各局域模性质

局域模	字 称		振 幅	
	x	y	$x_i^{\max}$	$y_i^{\max}$
g_1	偶	奇	0.275	0.014
g_2	奇	偶	0.237	0.028
g_3	偶	奇	0.192	0.035
g_4	奇	偶	0.219	0.168
g_5	偶	奇	0.592	0.225
g_6	奇	偶	0.252	0.119
g_7	奇	偶	0.099	0.307
g_8	偶	奇	0.114	0.270
g_9	奇	偶	0.066	0.225
g_{10}	奇	偶	0.219	0.342
g_{11}	偶	奇	0.196	0.326
g_{12}	偶	奇	-0.074	0.238

注: 符号说明同表3。

- [1] W. P. Su, J. R. Schrieffer and A. J. Heeger, *Phys. Rev.*, **B32**(1980), 2099.
- [2] H. Takayama, Y. R. Lin-Liu and K. Maki, *Phys. Rev.*, **B21**(1980), 2388.
- [3] H. Ito, A. Terai, Y. Ono and Y. Wada, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **53**(1984), 3519.
- [4] J. Hicks and C. Blaisdell, *Phys. Rev.*, **B31**(1985), 919.
- [5] X. Sun, C. Wu and X. Shen, *Solid State Commun.*, **56**(1985), 1039.
- [6] K. A. Chao and Y. Wang, *J. Phys. C*, **18**(1985), L1127.
- [7] C. Q. Wu and X. Sun, *Phys. Rev.*, **B33**(1986), 8772.
- [8] J. T. Gammel and J. C. Hicks, *Synth. Met.*, **17**(1987), 63.
- [9] J. C. Hicks and J. T. Gammel, *Phys. Rev.*, **B37**(1988), 6315.
- [10] X. Sun *et al.*, *Phys. Rev.*, **B35**(1987), 4102.
- [11] B. Xing and K. L. Yao, *Phys. Rev.*, **B42**(1990), 2084.
- [12] A. Terai and Y. Ono, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **55**(1986), 213.
- [13] G. Herzberg, *Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules*, D. Van Nostrand Reinhold, New York, (1945).
- [14] W. P. Su, *Solid State Commun.*, **35**(1980), 899.
- [15] A. J. Heeger, S. Kivelson, J. R. Schrieffer and W. P. Su, *Rev. Mod. Phys.*, **60**(1988), 781.
- [16] 孙鑫, 高聚合物中的孤子和极化子, 四川教育出版社, (1987), 第五章.

BOND-BENDING EFFECT ON LOCALIZED VIBRATIONS OF SOLITON FOR TRANS-(CH)_x

YAO KAI-LUN LI ZHAN-JIE XING BIAO

Department of Physics, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan, 430074

(Received 22 December 1990; revised manuscript received 22 July 1991)

ABSTRACT

We study the lattice vibrations of soliton in two-dimensional model and find that the vibrational amplitudes of carbon atoms normal to chain is comparable to that along the chain for most of the modes. Compared with the results of SSH model, a number of new modes have been found. They depend on the coupling constant and the bond-bending.

PACC: 6320P; 6140K