

带有次近邻相互作用的非谐性线性链中亚声速和超声速孤子

余超凡

(广东教育学院物理系, 广州 510303)

周义昌

(中山大学物理系, 广州 510275)

(1993年10月16日收到)

基于相干态方法, 在次近邻相互作用近似下研究了非谐性线性链中电子与声学晶格振动之间相互作用所引起的非线性效应. 采用自洽地处理运动方程的连续极限, 立方非谐性形变势导致新的电子概率幅的非线性方程, 并由此给出新的超椭圆积分形式的孤波解. 证明除了通常的钟形孤子外, 还存在另一种带有扭结状的孤波激发.

PACC: 7138;7215N

1 引言

众所周知, 晶格的纵光学振动造成原胞内正负电荷相对位移, 导致电极化场, 对电子形成长程的库仑作用. 它与电子耦合早已引起人们的注意. 而晶格的纵声学振动造成局部的体积膨胀或收缩, 只对电子产生短程势. 它与电子的耦合性质只在近 10 多年才引起注意, 至今研究仍不充分.

Davydov 首先发展了分子链中的激子(或电子)与声学振动模的相互作用理论^[1-4]. 并证明, 由于这种相互作用而引起的孤波激发是介于激子和晶格形变之间的束缚态, 且能以常速度沿着链方向不变形地传播. Davydov 孤波都具有钟形峰, 并处于激子能带底部. 这种孤子的存在条件与晶格近邻作用类型有关. 在简谐晶格条件下, Davydov 孤子稳定存在条件是传播速度小于声速^[1-6]. 而在近邻格点相互作用存在非谐性作用时, 超声速和亚声速孤子都可以存在^[7-10].

我们在文献[11]中曾证明: 只要自洽地处理运动方程的连续极限, 即使是简谐晶格, 由声学振动模与电子相互作用而形成的孤波, 对于稳定的亚声速和超声速孤子都可以存在. 本文采用文献[11]相同的处理方法, 具体研究了非谐性作用线性链中的孤波激发. 推导出关于电子概率幅新的非线性方程, 并由此给出一种新的具有超椭圆积分形式 (hyper-elliptic integral) 的孤波解. 证明除了通常的钟形孤子外, 还存在另一种带有扭结状 (kink) 的孤波激发.

2 哈密顿量及基本方程

本文中在包含次近邻作用下, 讨论电子与晶格声学振动相互作用. 假定晶格存在立方非谐性形变势, 在文献[11]的基础上, 哈密顿量可写成

$$H = H_0 + H_{\text{vib}} + H_{\text{int}}, \quad (1)$$

其中

$$H_0 = \sum_l [(\epsilon_0 - J_0)c_l^\dagger c_l - J_1(c_{l+1}^\dagger c_l + c_l^\dagger c_{l+1}) - J_2(c_l^\dagger c_{l+2} + c_{l+2}^\dagger c_l)], \quad (2)$$

$$H_{\text{vib}} = \sum_l \left[\frac{P_l^2}{2M} + \frac{1}{2} \kappa_0 (u_l - u_{l-1})^2 - \frac{\kappa_1}{3} (u_l - u_{l-1})^3 \right], \quad (3)$$

$$H_{\text{int}} = \chi \sum_l (u_l - u_{l-1}) c_l^\dagger c_l, \quad (4)$$

c_l^\dagger 和 c_l 代表格位 l 上的电子产生和湮没算符, J_1 和 J_2 分别为近邻和次近邻跳跃矩阵元. H_{vib} 代表计入立方非谐性形变势的晶格振动哈密顿量, u_l 代表原胞 l 对平衡位置的偏离, M 为原胞质量. 电子与晶格声学振动的相互作用 H_{int} 与文献[11]相同.

从哈密顿量(1)式, 我们得到 c_l 的运动方程

$$i\hbar \frac{\partial c_l}{\partial t} = (\epsilon_0 - J_0)c_l - J_1(c_{l+1} + c_{l-1}) - J_2(c_{l+2} + c_{l-2}) + \chi(u_l - u_{l-1})c_l. \quad (5)$$

应用相干态方法, 可以得出电子在格位 l 上的概率幅方程. 定义相干态为

$$|\Psi\rangle = \prod_l |A_l\rangle, \quad (6)$$

电子在格位 l 上的概率幅为

$$A_l = \langle \Psi | c_l | \Psi \rangle. \quad (7)$$

从(5)式得到 A_l 的运动方程为

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial A_l}{\partial t} &= (\epsilon_0 - J_0)A_l - J_1(A_{l+1} + A_{l-1}) - J_2(A_{l+2} + A_{l-2}) \\ &\quad + \chi(u_l - u_{l-1})A_l. \end{aligned} \quad (8)$$

应用经典哈密顿方程处理晶格振动, 即

$$\dot{p}_l = -\frac{\partial}{\partial u_l} \langle \Psi | H | \Psi \rangle, \quad (9)$$

而

$$\begin{aligned} E &= \langle \Psi | H | \Psi \rangle \\ &= \sum_l A_l^* [(\epsilon_0 - J_0)A_l - J_1(A_{l+1} + A_{l-1}) - J_2(A_{l+2} + A_{l-2}) + \chi(u_l - u_{l-1})A_l] \\ &\quad + \sum_l \left[\frac{P_l^2}{2M} + \frac{\kappa_0}{2} (u_l - u_{l-1})^2 - \frac{\kappa_1}{3} (u_l - u_{l-1})^3 \right]. \end{aligned} \quad (10)$$

由此得出 u_l 的运动方程为

$$M \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = -\chi(A_l^* A_l - A_{l+1}^* A_{l+1}) - \kappa_0(2u_l - u_{l+1} - u_{l-1}) + \kappa_1[(u_l - u_{l-1})^2 - (u_l - u_{l+1})^2]. \quad (11)$$

当形变区域 L 远大于晶格常数 a 时, 此时电子运动概率幅 $A_l(t)$ 变化的空间尺度远大于晶格常数, 因而可以采用连续模型, 这时前面方程的所有离散量都自然地近似取到二阶微商项:

$$\begin{aligned} A_l(t) &\approx A(x, t), \\ A_{l+1}(t) &\approx A(x, t) \pm a \frac{\partial A}{\partial x} + \frac{1}{2} a^2 \frac{\partial^2 A}{\partial x^2}, \\ u_l - u_{l-1} &\approx a \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{1}{2} a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \\ &\dots \end{aligned}$$

在上述连续近似下, $A_l(t)$ 的运动方程变成

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial A}{\partial t} &= (\epsilon_0 - J_0 - 2J_1 - 2J_2)A - (J_1 + 4J_2)a^2 \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + \chi a \frac{\partial u}{\partial x} A \\ &\quad - \frac{1}{2} \chi a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} A. \end{aligned} \quad (12)$$

而 u_l 的方程成为

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\chi a}{M} \frac{\partial}{\partial x} |A|^2 + \frac{\chi a^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial x^2} |A|^2 + \frac{\kappa_0 a^2}{M} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{2\kappa_1 a^3}{M} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (13)$$

方程(12), (13)是我们问题的基本方程。在作连续近似时, 由于所有量都自然地取到二阶微商项, 因而结果与以往其它作者的结果有所区别^[7-10]。 A 的运动方程中出现新的耦合项 $-\frac{1}{2} \chi a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$, 而非线性形变方程 $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$ 中相应出现新的二阶微商项 $\frac{1}{2M} \chi \frac{\partial^2}{\partial x^2} |A|^2$ 。 这些重要的非线性项对孤波的激发、孤波的形成和存在条件都有重要影响。

下面, 考虑以常速 v 沿一维链传播波, 即设

$$A(xt) = \phi(x - vt) e^{i(kx - \omega t + \theta)}, \quad (14)$$

$$u(xt) = u(\xi), \quad (15)$$

$$\xi = x - vt, \quad (16)$$

代入方程(12), 得到 $\phi(\xi)$ 的方程

$$J' a^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} + (\hbar\omega - \Lambda' - J' k^2 a^2) \phi - \chi a \frac{\partial u}{\partial \xi} \phi + \frac{1}{2} a^2 \chi \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} \phi = 0, \quad (17)$$

以及关于形变 $u(\xi)$ 的方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} &= \frac{\chi a}{M v_0^2 (1 - s^2)} \frac{\partial}{\partial \xi} \phi^2 - \frac{\chi a^2}{2M v_0^2 (1 - s^2)} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \phi^2 \\ &\quad + \frac{\kappa_1 a^3}{M v_0^2 (1 - s^2)} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial u}{\partial \xi} \right)^2, \end{aligned} \quad (18)$$

其中 $s = v/v_0$, 以及

$$J' = J_1 + 4J_2, \quad (19)$$

$$\Lambda' = \epsilon_0 - J_0 - 2J_1 - 2J_2, \quad (20)$$

$$\hbar v = 2J' a^2, \quad (21)$$

$$v_0 = \kappa_0 a^2 / M. \quad (22)$$

对方程(18)积分一次,得

$$\left(\frac{\partial u}{\partial \xi}\right)^2 - \frac{M v_0^2 (1-s^2)}{\kappa_1 a^2} \frac{\partial u}{\partial \xi} - \frac{\chi}{\kappa_1 a^2} \phi^2 - \frac{\chi}{2\kappa_1 a} \frac{\partial}{\partial \xi} \phi^2 = 0, \quad (23)$$

其中的积分常数由下列条件确定:

$$\frac{\partial u}{\partial x} \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} 0. \quad (24)$$

基于上述连续近似,假定 $L_s \gg 1$ (为了简便,下面取 $a=1$), 因而 $|A|^2 \ll 1$, 则晶格形变可近似为

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial \xi} = & -\zeta \left[(\phi^2 - \phi_0^2) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \phi^2 - \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \phi^2 \right)_0 \right) \right] \left\{ 1 - \frac{\kappa_1 \zeta^2}{\chi} \left[(\phi^2 - \phi_0^2) \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \phi^2 - \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \phi^2 \right)_0 \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (25)$$

其中

$$\zeta = \chi / M v_0 (1-s^2), \quad (26)$$

$$\phi_0 = \phi|_{\xi \rightarrow \pm\infty}, \quad \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \phi^2 \right)_0 = \frac{\partial}{\partial \xi} \phi^2 \Big|_{\xi \rightarrow \pm\infty}. \quad (27)$$

3 非线性方程的孤波解

我们具体考虑钟形孤波情形,此时要求 ϕ 满足条件

$$\phi|_{x \rightarrow \pm\infty} \rightarrow 0. \quad (28)$$

从(25)式,晶格形变可近似成

$$\frac{\partial u}{\partial \xi} = -\zeta \left[\phi^2 - \frac{\kappa_1 \zeta^2}{\chi} \phi^4 + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \xi} \phi^2 - \frac{\kappa_1 \zeta^2}{\chi} \phi^2 \frac{\partial}{\partial \xi} \phi^2 \right] + \dots \quad (29)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} = -\zeta \frac{\partial}{\partial \xi} \phi^2 - \frac{1}{2} \zeta \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \phi^2 + \frac{2\kappa_1 \zeta^2}{\chi} \phi^2 \frac{\partial}{\partial \xi} \phi^2 + \dots \quad (30)$$

代入(17)式,则得 $\phi(\xi)$ 的方程为

$$\phi_{\xi\xi} = \mu^2 \phi - 2\alpha_1 U \phi^3 + 3\alpha_2 U \phi^5 + U \phi \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \phi^2, \quad (31)$$

其中 $\alpha_1 = 2$, 以及

$$\mu^2 = (\hbar\omega - \Lambda' - J'^2 k^2) / J', \quad (32)$$

$$U = \chi \zeta / 4J', \quad (33)$$

$$\alpha_2 = 4\kappa_1 \zeta^2 / 3\chi. \quad (34)$$

将方程(31)积分一次后得

$$\phi_{\xi}^2 = \phi^2(\mu^2 - \alpha_1 U \phi^2 + \alpha_2 U \phi^4)(1 - 2U\phi^2)^{-1}. \quad (35)$$

下面讨论电子-声学振动弱耦合情况,即

$$|2U\phi^2| \ll 1. \quad (36)$$

这时方程(35)可近似为

$$(\phi_{\xi})^2 = \phi^2(c_0 + c_1\phi^2 + c_2\phi^4 + c_3\phi^6), \quad (37)$$

其中 $c_0 = \mu^2$, 而

$$\begin{aligned} c_1 &= (-\alpha_1 + 2\mu^2)U, \\ c_2 &= (\alpha_2 - 2\alpha_1 U)U, \\ c_3 &= 2\alpha_2 U^2. \end{aligned} \quad (38)$$

作变换

$$f = \phi^2, \quad (39)$$

则得到关于 $f(\xi)$ 的非线性方程为

$$\frac{1}{2} (f_{\xi})^2 = 2f^2(c_0 + c_1 f + c_2 f^2 + c_3 f^3). \quad (40)$$

显然, 非线性方程(40)表示一个单位质量粒子处于五次非谐振势作用下的运动方程。如果将 ξ 和 f 解释为时间和空间变数, 则(40)式表示一个非谐振子运动方程。非线性方程(40)一般有孤波解。下面我们考虑具有超椭圆积分一类的孤波解。将(40)式改写成

$$(f_{\xi})^2 = \Gamma f^2(f + A_{\pm})(f + B), \quad (41)$$

其中 $\Gamma = 4c_3$, 而

$$A_{\pm} = \frac{1}{3} \left\{ \frac{c_2}{c_3} \pm \sqrt{\left(\frac{c_2}{c_3}\right)^2 - \frac{3c_1}{c_3}} \right\}, \quad (42)$$

$$B = \frac{c_2}{c_3} - 2A_{\pm}. \quad (43)$$

令

$$F^2(\xi) = f(\xi) + B, \quad (44)$$

从(41)式有

$$\frac{d\xi}{dF} = k \left[\frac{1}{F^2 - B} - \frac{1}{F^2 + (A_{\pm} - B)} \right], \quad (45)$$

其中

$$k = 2/\sqrt{\Gamma A_{\pm}}. \quad (46)$$

考虑到 $B > 0$ 时 f 满足边界条件

$$f \rightarrow 0, \quad |\xi| \rightarrow \infty, \quad (47)$$

因而从方程(45)有下列的解:

(1) 当 $|F(\xi)| < \sqrt{B}$

$$F_1(\xi) = -\sqrt{B} \tanh \left\{ \frac{\sqrt{B}}{k} (\xi - \xi_0) + \frac{1}{2} G(F(\xi)) \right\}, \quad (48)$$

其中

$$G(F(\xi)) = \frac{2\sqrt{B}}{\sqrt{A_{\pm} - B}} \tan^{-1} \frac{F(\xi)}{\sqrt{A_{\pm} - B}}, \quad (49)$$

由此

$$f_1(\xi) = -B \operatorname{sech}^2 \left\{ \frac{\sqrt{B}}{\kappa} (\xi - \xi_0) + \frac{1}{2} G(F_1(\xi)) \right\}. \quad (50)$$

(2) 当 $|F(\xi)| > \sqrt{B}$

$$F_2(\xi) = -\sqrt{B} \coth \left\{ \frac{\sqrt{B}}{\kappa} (\xi - \xi_0) + \frac{1}{2} G(F(\xi)) \right\}, \quad (51)$$

而

$$f_2(\xi) = B \operatorname{csch}^2 \left\{ \frac{\sqrt{B}}{\kappa} (\xi - \xi_0) + \frac{1}{2} G(F(\xi)) \right\}, \quad (52)$$

$F_1(\xi)$ 为非奇异函数, 因此 $f_1(\xi)$ 是我们得到的新的孤波解, 并且是一种非尖头状孤波, 如图 1 所示. 另一方面, $f_2(\xi)$ 为带有奇异性的爆裂型 (explode-type) 孤波解. 我们知

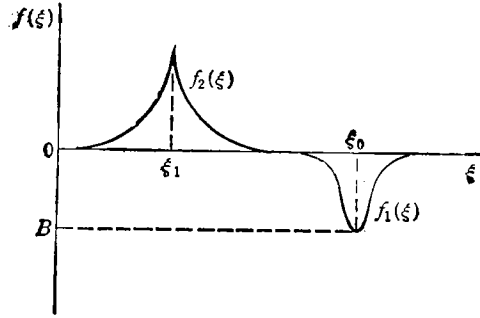


图 1 孤波解 $f_1(\xi)$ 和 $f_2(\xi)$ 其中 $\xi_1 = \xi_0 - \pi K / 2\sqrt{A_{\pm} - B}$

道, 在通常 KdV 方程 $u_t - 6uu_x + u_{xxx} = 0$, 亦存在规则解.

$$u_1(x,t) = -\frac{1}{2} k^2 \operatorname{sech}^2[(kx - k^3t)/2] \quad (k \text{ 为常数})$$

和奇异性爆裂型解

$$u_2(x,t) = \frac{1}{2} k^2 \operatorname{csch}^2[(kx - k^3t)/2].$$

对于我们的规则解 $f_1(\xi)$, 当 $c_3 < 0$ 时, κ 为虚数, $f_1(\xi)$ 将是不稳定的. 因此, 当 $\kappa_1 > 0$ 时, 将会存在 $v < v_0$ 和 $v > v_0$ 的稳定孤波解. 另一方面, 当 $c_1 = 0$ 时, $A = 0$, $F_1(\xi)$ 因不存在实数值而使 $f_1(\xi)$ 不存在稳定的孤波解. 所以稳定的孤波 $f_1(\xi)$ 存在还必须要要求 $(\alpha_1 + 2\tilde{E})U \neq 0$, 即 $\chi \neq 0$.

我们还可以看到, 当 $F(\xi) > \sqrt{A_{\pm} - B}$ 时, $f_1(\xi)$ 可近似表示成

$$f_1(\xi) = -B \operatorname{sech}^2 \left\{ \frac{\sqrt{B}}{\kappa} (\xi - \xi_0) + \frac{\pi\sqrt{B}}{2\sqrt{A_{\pm} - B}} - \frac{\sqrt{B}}{F_1(\xi)} \right\}, \quad (53)$$

且

$$F_1(\xi) = -\sqrt{B} \tanh \left\{ \frac{\sqrt{B}}{\kappa} (\xi - \xi_0) + \frac{\pi\sqrt{B}}{2\sqrt{A_{\pm} - B}} - \frac{\sqrt{B}}{F_1(\xi)} \right\}. \quad (54)$$

特别是 $F(\xi) \gg \sqrt{A_{\pm} - B}$ 情形

$$f_1(\xi) = -B \operatorname{sech}^2 \left\{ \frac{\sqrt{B}}{\kappa} (\xi - \xi_0) - \frac{\pi\sqrt{B}}{2\sqrt{A_{\pm} - B}} \right\}. \quad (55)$$

这正是标准孤子解的形式。

4 弱耦合结果

4.1 钟形孤波

这里对方程(35)作近似展开,并只保留 ϕ^6 的项目,则有

$$(\phi_z)'' = \phi^2(\mu^2 + c_1'\phi^2 + c_2'\phi^4), \quad (56)$$

其中

$$\begin{aligned} c_1' &= (-\alpha_1 + 2\mu^2)U, \\ c_2' &= (\alpha_2 - 2\alpha_1 U)U. \end{aligned} \quad (57)$$

在文献[11]中我们已得出形式为(56)式的孤波解

$$\phi(\xi) = [\alpha + \beta + 2\beta \sinh^2 \mu(\xi - \xi_0)]^{-1/2}, \quad (58)$$

其中

$$\alpha = -c_1'/2\mu^2 = \frac{U}{2\mu^2} (\alpha_1 - 2\mu^2), \quad (59)$$

$$\beta = \pm \frac{1}{2\mu^2} (c_2' - 4\mu^2 c_1')^{\frac{1}{2}} = \pm \frac{1}{2\mu^2} [(\alpha_1 + 2\mu^2)^2 U^2 - 4\mu^2 \alpha_2 U]^{\frac{1}{2}}. \quad (60)$$

由于 $0 \leq \sinh^2 x < \infty$, 此时孤波解(58)式的成立条件为 $\beta > 0$ 与 $(\alpha + \beta) > 0$, 因此 β 应取正根。

当 $U < 0$ ($\zeta < 0, v > v_0$)

当电子-声学振动耦合作用比非谐性势较大时, $(\alpha + \beta)$ 可近似成

$$\alpha + \beta = -2U + \frac{\alpha_2}{\alpha_1 + 2\mu^2} > 0.$$

此时稳定的超声孤子解(58)式可以存在,且相应的德布罗意频率为

$$\hbar\omega = e_0 - J_0 - 2J_1 - 2J_2 - (J_1 + 4J_2)\mu^2 + \frac{1}{2} m^* v^2, \quad (61)$$

其中的 μ 值由下列方程决定:

$$\frac{1}{\mu} \left(1 + \frac{1 - \mu^2}{1 + \mu^2} \frac{8J'\kappa_1\zeta}{3\chi^2} \right) = \tan \frac{|U|}{\sqrt{1 - \frac{4J'\kappa_1\zeta}{3\chi^2}}}, \quad (62)$$

而 m^* 为能带电子有效质量。

当 $U > 0$ ($\zeta > 0, v < v_0$)

此时为使 β 有实根, 必须

$$(\alpha_1 + 2\mu^2)^2 > \frac{4\mu^2\alpha_2}{U}, \quad (63)$$

并且, 当电子-声学振动耦合作用比非谐性势较大时, $(\alpha + \beta)$ 近似为

$$\alpha + \beta = \frac{\alpha_1 U}{\mu^2} - \frac{\alpha_2}{\alpha_1 + 2\mu^2} > 0. \quad (64)$$

因此, 若满足条件(63)和(64)式, 稳定的亚声孤子解(58)式亦可以存在。如果 κ_1 值过大, 则不可能形成这种亚声速孤子。此时相应的孤波的 μ 值由下列方程决定:

$$\frac{1}{\mu} \left(1 - \frac{1 - \mu^2 8J' \kappa_1 \zeta}{1 + \mu^2 3\chi^2} \right) = \tan \frac{|U|}{\sqrt{1 - \frac{4J' \kappa_1 \zeta}{3\chi^2}}}. \quad (65)$$

总结以上, 在一维晶格中, 由于立方非谐振势的作用, 只有满足条件(63)和(64)式才有稳定亚声速孤子解(58)式存在, 但对超声速孤子并无影响。另一方程, 非谐振势的存在导致 μ 值减小, 从而使孤子的激发能隙减小, 以及孤子的局域长度 L , 增大。

4.2 扭结形孤波激发

在扭结激发情形

$$|\phi(x, t)| \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} \phi_0. \quad (66)$$

将(25)式代入(17)式, 只取到 ϕ^6 项近似, 则有下列方程:

$$(\phi_\xi)^2 = \phi^2(\mu_1^2 + a_1\phi^2 + a_2\phi^4), \quad (67)$$

其中

$$a_1 = -\alpha_1 U + 2\mu_1^2 U - \frac{\kappa_1 \zeta^3}{2J'} \phi_0^2, \quad (68)$$

$$a_2 = \alpha_2 U - 2U \left(\alpha_1 U + \frac{\kappa_1 \zeta^3}{2J'} \phi_0^2 \right), \quad (69)$$

$$\mu_1^2 = -(\hbar\omega - A' - J'k^2 - \chi\zeta\phi_0^2 - \kappa_1\zeta^3\phi_0^4)/J'. \quad (70)$$

考虑边界条件(66)式, 方程(67)的积分为^[11]

$$\phi^2 = \phi_0^2 + \frac{1}{A + B \cosh 2\mu_1(\xi - \xi_0)}, \quad (71)$$

其中

$$A = -a_1/2\mu_1^2 = \left[(\alpha_1 - 2\mu_1^2)U + \frac{\kappa_1 \zeta^3}{2J'} \phi_0^2 \right] / 2\mu_1^2, \quad (72)$$

$$B = \pm \frac{1}{2\mu_1^2} [a_1^2 - 4\mu_1^2 a_2]^{\frac{1}{2}} = \pm \frac{1}{2\mu_1^2} \left\{ \left[(\alpha_1 + 2\mu_1^2)U + \frac{\kappa_1 \zeta^3}{2J'} \phi_0^2 \right]^2 - 4\mu_1^2 \alpha_2 U \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (73)$$

由于扭结形激发还必须满足条件 $\phi|_{\xi=\xi_0} = 0$, 因此(71)式最后给出为

$$\phi = \phi_0 \frac{\sinh \mu_1(\xi - \xi_0)}{[\cos^2 \eta + \sinh^2 \mu_1(\xi - \xi_0)]^{\frac{1}{2}}}, \quad (74)$$

其中

$$\phi_0^2 = -1/(A+B), \quad (75)$$

$$\cos^2 \eta = (A+B)/2B. \quad (76)$$

显然, 对于稳定的扭结形激发要求 $\phi_0^2 > 0$ 和 $\cos^2 \eta > 0$, 因此 $(A+B) < 0$, 而 B 必须取负根.

当 $U < 0$ ($v > v_0$)

此时取 $B < 0$, 显见 $(A+B) < 0$, 这样 $\phi_0^2 > 0$ 与 $\cos^2 \eta > 0$ 满足. 当电子-声学振动耦合作用比非谐振势较大时, $(A+B)$ 可近似成

$$A+B = \frac{\alpha_1 U}{\mu_1^2} + \frac{\kappa_1 \zeta^3}{2\mu_1^2 J'} \phi_0^2 - \frac{\alpha_2 U}{(\alpha_1 + 2\mu_1^2)U + \frac{\kappa_1 \zeta^3}{2J'} \phi_0^2} < 0, \quad (77)$$

因此, 稳定的超声扭结形孤波解(74)式可以存在.

当 $U > 0$ ($v < v_0$)

此时 B 为实数值, 要求

$$\left[(\alpha_1 + 2\mu_1^2)U + \frac{\kappa_1 \zeta^3}{2J'} \phi_0^2 \right]^2 > 4\mu_1^2 \alpha_2 U, \quad (78)$$

并且, 当电子-声学振动耦合作用比非谐振势较大时, $(A+B)$ 近似成

$$A+B = -2U + \frac{\alpha_2 U}{(\alpha_1 + 2\mu_1^2)U + \frac{\kappa_1 \zeta^3}{2J'} \phi_0^2} < 0, \quad (79)$$

因此, 当满足条件(78)和(79)式时, 稳定的亚声扭结形孤波解(74)式也可以存在.

为了决定 μ_1 , 我们应用下列条件:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (\phi_0^2 - |\phi(x,t)|^2) dx = 1, \quad (80)$$

将(74)式代入上式, 最后得

$$\phi_0^2 = \frac{\mu_1}{2\eta} \tan \eta. \quad (81)$$

将上面钟形孤波和扭结形孤波的稳定存在条件作比较, 显然它们存在对称的对应关系 $U \rightarrow -U$. 当 $U \rightarrow -U$ 时, $U < 0 \rightarrow U > 0$, 从(77)式可知 $(A+B) < 0$ 成立; 而 $U > 0 \rightarrow U < 0$, 从(79)式可知 $(A+B) < 0$ 亦成立. 因此, 与扭结形孤波相应的德布罗意频率为

$$\begin{aligned} \hbar\omega = \epsilon_0 - J_0 + 2(J_1 + J_2) + \chi\zeta\phi_0 + \kappa_1\zeta^3\phi_0^2 + (J_1 + J_2) \frac{4\eta^2\phi_0^2}{\tan^2\eta} \\ - \frac{1}{2}|m^*|v^2. \end{aligned} \quad (82)$$

5 结 论

我们在次近邻作用近似下, 基于相干态方法, 自洽地处理运动方程的连续极限, 讨论

了非谐性线性链中电子与声学模的相互作用。在非谐振势存在下，导出与以往不同的新的非线性方程，并由此得到了新的超椭圆积分形式的孤波解。当 $\chi \neq 0$ 时，只要 $\kappa_1 > 0$ ，这个新的孤波解对于亚声速和超声速孤子都是稳定的。从弱耦合即 ϕ^6 非线性项近似的结果可知，与文献 [11] 的结果比较，非谐性作用势只对亚声速孤子的存在条件有影响，而对超声速孤子没有影响。另一方面，非谐振力导致 μ 值减小，因而使孤子激发能隙减小和孤子局域 L 变大。至于次近邻作用，并不改变问题的非线性，其后果仅是折合到增加近邻跳跃矩阵元的作用 $J_1 \rightarrow J'$ ，因而展宽能带宽度和减小能带中电子的有效质量。

应该强调指出，从我们结果分析可以看到，除了 Davydov 孤子外，还可以存在第二种类型的扭结形孤波激发。对于 $v > v_0$ 的扭结形孤波总是可以存在的，而对于 $v < v_0$ 的扭结形孤波，由于非谐振势的作用，只有满足条件(78)和(79)式才可以存在。这些扭结形孤波出现在能带 $E_0 = \epsilon_0 - J_0 - 2(J_1 + J_2)$ 的顶部。并且，如果自洽地处理运动方程的连续极限，即使非谐振势不存在，这个扭结形孤波激发也可以存在。此时 ϕ 的非线性方程退化^[11]

$$(\phi_\xi)^2 = \phi^2(\mu_0^2 + b_1\phi^2 + b_2\phi^4), \quad (83)$$

其中

$$\mu_0^2 = (\epsilon_0 - J_0 - 2J_1 - 2J_2 + J'k^2 + \chi\zeta\phi_0^2 - \hbar\omega)/J', \quad (84)$$

$$b_1 = -U_1(1 - \mu_0^2 a^2), \quad (85)$$

$$b_2 = -U_1' a^2, \quad (86)$$

$$U_1 = \chi^2/2J'\kappa_0 a^2(1 - s^2). \quad (87)$$

从方程(83)可得到如下形状的扭结形孤波解：

$$\phi = \phi_0 \frac{\sinh \mu_0(\xi - \xi_0)}{[\cos^2 \eta_0 + \sinh^2 \mu_0(\xi - \xi_0)]^{1/2}}, \quad (88)$$

其中

$$\phi_0^2 = -1/(\alpha' + \beta'), \quad (89)$$

$$\cos^2 \eta_0 = (\alpha' + \beta')/2\beta', \quad (90)$$

$$\alpha' = -b_1/2\mu_0^2, \quad (91)$$

$$\beta' = -\frac{1}{2\mu_0^2} (b_1^2 - 4\mu_0^2 b_2)^{1/2}. \quad (92)$$

显然，扭结形孤波解(88)式的稳定存在条件为 $\phi_0^2 > 0$ 和 $\cos^2 \eta_0 > 0$ ，因此 $(\alpha' + \beta') < 0$ 和 $\beta' < 0$ 。实际分析可知：当 $U_1 < 0$ ， $\alpha' + \beta' = -|U_1|/\mu_0^2 < 0$ ；当 $U_1 > 0$ ， $\alpha' + \beta' = -2U < 0$ 。与钟形孤波结果比较^[11]，他们之间存在对称性的对应关系，即 $\beta > 0 \rightarrow \beta' < 0$ ， $(\alpha + \beta) > 0 \rightarrow (\alpha + \beta) < 0$ ， $U_1 \rightarrow -U_1$ 。

孤波激发是由于色散作用项与非线性作用项这一对矛盾作用的结果。而色散作用项总是存在的，因而不同的非线性作用可以引起不同性质类型的孤波激发。从我们的研究结果可知，当非线性作用中出现更高非线性项即 $b_2 \neq 0$ 时， β' 可以存在正、负值解(而 $b_2 = 0$ 时， $\beta' = -U_1(1 - \mu_0^2 a^2)/2\mu_0^2$ 为单位，只存在钟形孤波解)，因而不但在 E_0 能带底部可以出现钟形孤波激发，而且在 E_0 能带顶部也可以出现扭结形孤波激发。

- [1] A. S. Davydov and N. I. Kislukha, *Phys. Stat. Sol.*, (b)59 (1973), 465.
- [2] A. S. Davydov and N. I. Kislukha, *Phys. Stat. Sol.*, (b)75 (1976), 735.
- [3] A. S. Davydov, *Physica Scripta*, 20 (1979), 387.
- [4] A. S. Davydov, *Uspekhi fiz. Nauk*, 138 (1982), 603.
- [5] A. C. Scott, *Phys. Rev.*, A26(1982), 578.
- [6] H. Bollerauer and M. Opper, *Z. Phys.*, B82(1991), 95.
- [7] A. S. Davydov and A. V. Zolotariuk, *Physica Scripta*, 28 (1983), 249.
- [8] A. S. Davydov and A. V. Zolotariuk, *Phys. Stat. Sol.*, (b) 115 (1983), 115.
- [9] A. S. Davydov *et al.*, *Physica Scripta*, 30(1984), 426.
- [10] D. I. Pushkarov and M. T. Primatarowa, *Physica Scripta*, 39 (1989), 620.
- [11] 周义昌、余超凡, 物理学报, 41(1992), 2016.

SUBSONIC AND SUPERSONIC SOLITONS IN AN ANHARMONIC LINEAR CHAINS WITH SECOND-NEIGHBOUR INTERA- CTION

YU CHAO FAN

(Department of Physics, Guangdong Educational College, Guangzhou
510303)

ZHOU YI-CHANG

(Department of Physics, Zhongshan University, Guangzhou 510275)
(Received 16 October 1993)

ABSTRACT

Based on the method of coherent states, the nonlinear effects caused by the interaction between electrons and acoustic lattice vibrations in an anharmonic linear chains are investigated in the second-neighbour interaction approximation. While the continuous limits of the equations of motion is considered self-consistently, the cubic anharmonicity of the deformable potential leads to a new nonlinear equation for the electronic probability amplitude, which gives a new solitary solution in the form of hyperelliptic integral. This shows that besides the bell-solitons there also exists a second type of solitary excitation with the shape of a kink.

PACC: 7138;7215N