

## 非线性强度任意二聚的非线性链的透射性质\*

胡冬生<sup>1)†</sup> 张艳玲<sup>1)</sup> 尹小刚<sup>1)</sup> 徐江<sup>2)</sup>

1) (南京航空航天大学理学院, 南京 211100)

2) (南京航空航天大学材料科学与技术学院, 南京 211100)

(2011年9月26日收到; 2012年2月15日收到修改稿)

用离散的非线性薛定谔的递推关系研究了非线性强度任意二聚的非线性链的透射性质. 结果表明该链存在一个共振透射态, 共振态的能量为非线性强度与入射波振幅模平方的乘积; 取出射波振幅为定值和取入射波振幅模为定值来计算透射系数, 其结果在非共振态有明显的差别: 取出射波振幅为定值时电子的透射随能量为单值函数, 而取入射波振幅模为定值时电子的透射呈现多稳态. 并指出只有取入射波振幅模为定值时才能真正反映非线性强度对电子透射性质的影响.

关键词: 无序结构, 退局域, 多稳态

PACS: 71.55.Jv, 73.20.Jc, 42.65.Pc

## 1 引言

自从安德森提出无序系统中局域态和退局域态的概念后<sup>[1]</sup>, 无序系统的性质引起了广泛的兴趣. 单参量标度理论指出一维无序系统中的单电子总是局域的<sup>[2]</sup>. 然而, 在存在关联的一维、准一维无序系统和无序的非线性系统中, 人们仍然能够发现退局域态<sup>[3-13]</sup>. 一维任意二元合金链模型中(两种原子 A 和 B 分别以概率  $p$  和  $(1-p)$  构成的链)所有的态都是局域态<sup>[14,15]</sup>. 如果一维任意二元合金链模型中每个原子 A (或 B) 用两个相同的原子 AA (或 BB) 代替, 就是有名的短程关联无序模型: 任意二聚物模型<sup>[3]</sup>. 该模型存在一个共振透射态, 其能量恰好为二聚原子格点势能. 人们在关联无序的超晶格中发现了共振透射态<sup>[16]</sup>, 从实验上证明了任意二聚物模型结论的正确性. 随后, 任意二聚物模型得到了多种推广, 能够出现多个共振透射态<sup>[4-6]</sup>, 其实质是关联长度变长导致共振态数量增加. 这些关联的长度依然有限, 仍然为

短程关联. 当关联长度遍及整个系统时, 这样的关联称之为长程关联. 当一维无序系统存在长程关联且系统趋于无穷大时会有一段连续的扩展态出现<sup>[7,8]</sup>, 在扩展态和局域态之间存在迁移率边. 这就意味着在一维无序系统中长程关联可以导致金属—绝缘体相变. 另一方面, 非线性相互作用常存在于实际系统中, 如粒子与晶格振动模式的相互作用<sup>[17]</sup>、玻色-爱因斯坦凝聚<sup>[18]</sup>. 当非线性存在时, 通常用非线性薛定谔方程来描述系统的性质. 近年来, 非线性强度对系统性质的影响越来越受到关注<sup>[12,13,19-31]</sup>. 存在非线性项的任意二元合金系统中两种原子的格点势能相同, 而两种原子所在位置的非线性强度却不同, 研究发现: 该系统的透射系数随系统的长度呈幂率衰减; 当两种非线性强度都较小时电子呈现弹道输运<sup>[12]</sup>. 在对角无序的非线性系统中, 平均透射率随着系统长度的增加而指数衰减<sup>[20]</sup>. 非线性可以导致势能无序的系统出现退局域态<sup>[13]</sup>. Senouci 等人利用克罗尼格-潘尼模型 (Kronig-Penney model) 研究了非线性相互作用对系统传输性质的影响, 进一步说明了非线性

\* 国家自然科学基金 (批准号: 51175245), 江苏省自然科学基金 (批准号: BK2010073) 和南京航空航天大学基金 (批准号: NS2010207) 资助的课题.

† E-mail: dongshenghu@nuaa.edu.cn

性强度对局域态-扩展态的转变起着不可忽视的作用<sup>[23]</sup>. 在格点无序而非线性强度一定的非线性晶格系统中, 波函数扩散时其二阶矩满足幂率关系, 且幂率指数与理论值  $d/(3d+2)$  ( $d$  为系统的维度) 一致<sup>[24]</sup>. 在具有斐波拉希结构的非线性链中, 波函数扩散的特性也得到了详细的研究<sup>[25]</sup>. 非线性项会导致系统透射率按  $\exp(-3^L)$  衰减<sup>[26,27]</sup>, 并致使透射出现双稳或多稳的现象<sup>[26]</sup>. 弱的非线性强度虽然不改变安德森局域区小透射系数指数衰减的性质, 却能剧烈地影响无序引起的局域态并导致透射的双稳现象<sup>[28]</sup>. 在格点势能都相同但非线性强度任意二聚或  $N$  聚的非线性链中会分别有一个或  $N-1$  个共振透射态<sup>[29-31]</sup>. 以上是对非线性系统研究所得的一些结论. 其研究方法是利用非线性薛定谔方程计算波函数随时间扩散的性质, 或求非线性系统的透射系数来描述系统的性质. 因非线性系统存在非线性项, 不能直接由取入射波振幅为定值求出透射系数. 一些文献就取出射波的振幅为定值 1 来讨论透射性质<sup>[27,29-31]</sup>. 并认为出射波振幅为定值和入射波振幅为定值并不影响计算结果<sup>[29]</sup>. 我们分别以出射波振幅和入射波振幅模平方为定值来研究格点势能都相同而非线性项二聚的非线性链, 结果表明该链存在一个共振透射态, 共振态的能量为非线性强度与入射波振幅模平方的乘积; 取出射波振幅为定值和取入射波振幅模平方为定值, 电子的透射性质在非共振态有明显的差别: 前者电子的透射随能量为单值函数, 而后者电子的透射呈现多稳态. 取出射波振幅为定值求透射系数不能真正反映非线性系统的性质, 只有取入射波振幅为定值时才能真正反映非线性强度对电子透射性质的影响.

## 2 模型及方法

我们用离散的非线性薛定谔方程来描述非线性系统<sup>[12,29]</sup>

$$V\varphi_{n+1} = (E - \varepsilon_n - \beta_n |\varphi_n|^2)c_n - V\varphi_{n-1}. \quad (1)$$

其中,  $\varepsilon_n$  和  $\beta_n$  分别表示电子在编号为  $n$  的格点处的势能和非线性强度;  $V$  为电子波函数在相连格点间的交叠积分, 取为常数 1;  $\varphi_n$  为电子在编号为  $n$  的格点处的波函数. 我们在本文中的研究

对象是由两种原子 A 和 B 随机构成的一段长度为  $N$  的非线性链, 其中原子 B 总是以二聚的形式出现. 原子 A 的非线性强度为 0, 二聚原子 B 的非线性强度为  $\beta_n$ , 所有格点势能都为 0. 该链的两端由半无限长的金属导线连接. 非线性链从左到右的格点编号分别为 1 到  $N$ . 假设一个电子从右端入射, 从左端出射. 则电子在链右端金属导线中的波函数可以表示为  $\varphi_n = Ae^{-ikn} + re^{ikn}$ , ( $n \geq N$ ); 电子在链左端金属导线中的波函数可以表示为  $\varphi_n = te^{-ikn}$ , ( $n \leq 0$ ). 编号为  $-1$  和  $0$  的格点的波函数分别为  $\varphi_{-1} = te^{ik}$  和  $\varphi_0 = t$ . 由 (1) 式的递推关系可以求出编号为  $N+1$  和编号为  $N+2$  的格点的波函数  $\varphi_{N+1}$  和  $\varphi_{N+2}$ . 再由  $\varphi_{N+1} = Ae^{-ik(N+1)} + re^{ik(N+1)}$  和  $\varphi_{N+2} = Ae^{-ik(N+2)} + re^{ik(N+2)}$  可以求出  $r$  和  $A$ .

$$r = \frac{e^{ik} \cdot \varphi_{N+2} - \varphi_{N+1}}{e^{ik(N+1)} \cdot (e^{2ik} - 1)}, \quad (2)$$

$$A = \frac{e^{ik} \cdot \varphi_{N+1} - \varphi_{N+2}}{e^{-ikN}(1 - e^{-2ik})}. \quad (3)$$

由 (2) 和 (3) 式可求出透射系数  $T$  和反射系数  $R$ , 即

$$T = \left| \frac{t}{A} \right|^2 = \frac{|t|^2 \cdot |1 - e^{-2ik}|^2}{|e^{ik}\varphi_{N+1} - \varphi_{N+2}|^2}, \quad (4)$$

$$R = \left| \frac{r}{A} \right|^2 = \frac{|\varphi_{N+2} - e^{-ik}\varphi_{N+1}|^2}{|\varphi_{N+1} - e^{-ik}\varphi_{N+2}|^2}. \quad (5)$$

## 3 结果和讨论

由 (4) 式, 我们可以设定出射振幅, 根据递推关系求出透射系数. 图 1 是由两种原子 A 和 B 随机构成的链长为 200 (或 199) 个原子时, 当电子出射振幅为定值, 电子能量和非线性强度变化时的电子透射区. 这条链是这样产生的: 在某一位置 A 原子出现的概率为  $2/3$ , B 原子出现的概率为  $1/3$ , 但 B 原子总是以二聚的形式出现, 当产生链的原子数达到 199 或 200 时, 这条链就产生好了. 用这种方式产生的链, A 原子和 B 原子出现的概率相等. 在以后的图中所有的链都是这样产生的. 我们这样定义透射区: 当  $|t/A| > m$ , 就认为电子能完全透过样品, 其中  $A$  和  $t$  分别为透射电子入射波和出射波的振幅,  $m$  为小于但接近 1 的值. 图 1 中我们设定  $t = 0.3$  时,  $m = 0.99$ ; 其他  $t$  值  $m = 0.9$ . 图 1(a) 和 (c) 都是对 10 次随机结构取平均. 图 1(b) 和 (d)

只是取一次随机结构的透射区. 从图 1(a) 和 (c) 可以看到透射区在  $E$ - $\beta_B$  平面内是关于原点中心对称的, 每个确定  $t$  值的透射都有一过原点的直线. 文献 [29] 指出  $t = 1$  时, 透射区有一条直线  $E = \beta_B$ , 并从理论证明了这种关系. 我们在计算中发现当出射振幅不为 1 时, 透射区仍然有一条直线, 但直线的斜率发生了变化. 文献 [29] 指出

出射振幅取其他值时, 其结果是相同的. 这显然是不对的. 透射区为透射系数接近 1 时能量  $E$  和二聚的非线性强度  $\beta_B$  对应的点所构成, 所以这条直线对应共振透射. 此时的共振透射是由非线性强度二聚产生的, 因此二聚的浓度对共振透射不会产生影响. 我们只讨论 A 原子和 B 原子浓度相同的情况.

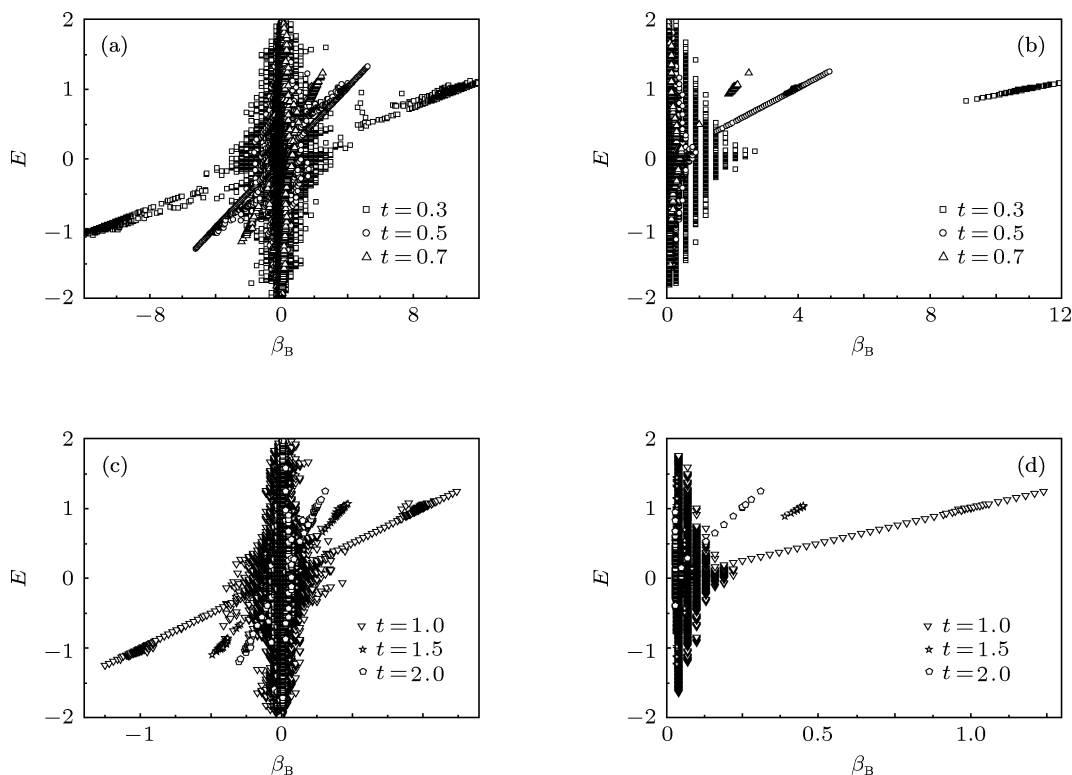


图 1 非线性强度任意二聚的非线性链的透射区, 链长为  $N = 200$  (或  $199$ ). 如果  $|t/A| > m$ , 我们就认为电子能完全透过样品, 其中  $A$  和  $t$  分别为透射电子入射波和出射波的振幅.  $E$  是电子的能量,  $\beta_B$  是非线性强度. 我们设定  $t = 0.3$  时,  $m = 0.99$ ; 其他  $t$  值  $m = 0.9$ . (a) 和 (c) 都是取的 10 次平均

为了进一步确定波函数振幅对非线性系统的影响, 我们计算了在透射情况下入射波振幅模的平方与非线性强度之间的关系. 图 2 为链长为 200 (或 199) 时, 当电子能量为定值, 电子入射振幅模的平方与非线性强度变化时的电子透射区. 从插图可以看出当  $E = \beta_B \cdot |A|^2$  时, 电子能完全透射样品. 图 1 中的直线也满足  $E = \beta_B \cdot |t|^2$ . 因为完全透射时  $|t|^2 = |A|^2$ , 所以图 1 中的完全透射能量仍然满足  $E = \beta_B \cdot |A|^2$ . 事实上从非线性薛定谔方程 (1) 即可看出非线性强度  $\beta_n$  和波函数模的平方  $|\varphi_n|^2$  对电子的运输起同等的作用. 对于确定的链, 当出射波的振幅取定值时, 不同能量电子的入射波振幅模的平方也互不相同, 因此入射电子的振幅也参与

了对运输性质的影响. 故讨论非线性系统中电子的运输特性时应该取入射波的振幅模的平方为定值 1, 而不宜取出射振幅为定值 1.

当链长为 100 (或 99), 非线性强度为 0.5 时, 我们分别计算了出射振幅模的平方为定值和入射振幅模的平方趋于定值时, 100 次随机结构的平均透射系数 (如图 3). 从图中可以看出完全透射的位置都满足  $E = \beta_B \cdot |t|^2$  (或  $E = \beta_B \cdot |A|^2$ ). 从图 3(a) 和 (b) 可以看出除共振位置之外, 在相同条件下, 取出射波函数平方为某定值比取入射波函数模平方为该定值时所对应的平均透射系数要小, 且共振峰的形状也明显不相同.

非线性会导致电子透射呈现双稳态和多稳态

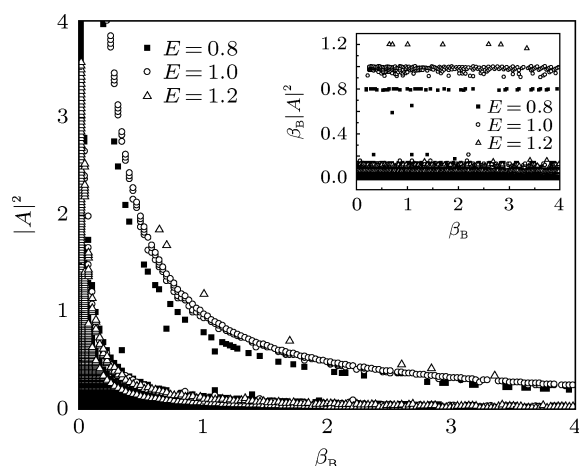


图2 电子能量设定时的透射区(链长为  $N = 200$  (或  $199$ ). 当  $|t/A| > 0.98$  时, 就认为电子能完全透射. 插图是纵轴重整化时的图形)

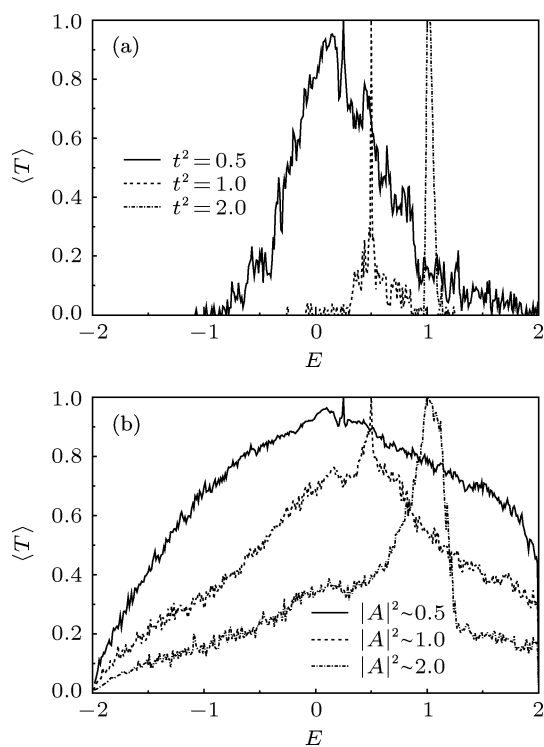


图3 链长  $N = 100$  (或  $99$ )、非线性强度  $\beta_B = 0.5$  时平均透射系数随电子能量的变化曲线(图中每条曲线都取了 100 次平均) (a) 出射波振幅模的平方为定值时的平均透射系数; (b) 电子透射波振幅在区间  $[0, 2]$  变化, 且电子入射波振幅模的平方分别趋于  $0.5, 1.0, 2.0$  时的平均透射系数

现象<sup>[26]</sup>. 在双稳态和多稳态的系统中取透射系数的平均值会抹平透射系数在相同条件下的多值现象. 图4为链长取 100 (或 99), 非线性强度取 0.2 时, 出射振幅模的平方为定值 1 和入射振幅模的平方属于  $[0.98, 1.0]$  时的透射系数. 从图 4(a) 可以看出

取出射振幅为定值时, 透射系数与能量的关系是单值函数; 而从图 4(b) 中的插图可以清楚的看到, 当取入射波振幅模的平方趋于定值时, 透射系数与能量的关系是多值函数. 因非线性系统中电子的透射是多稳态<sup>[26]</sup>, 用出射波振幅为定值不能正确的反映非线性强度对电子透射性质的影响, 而且透射的多稳态现象也得不到体现.

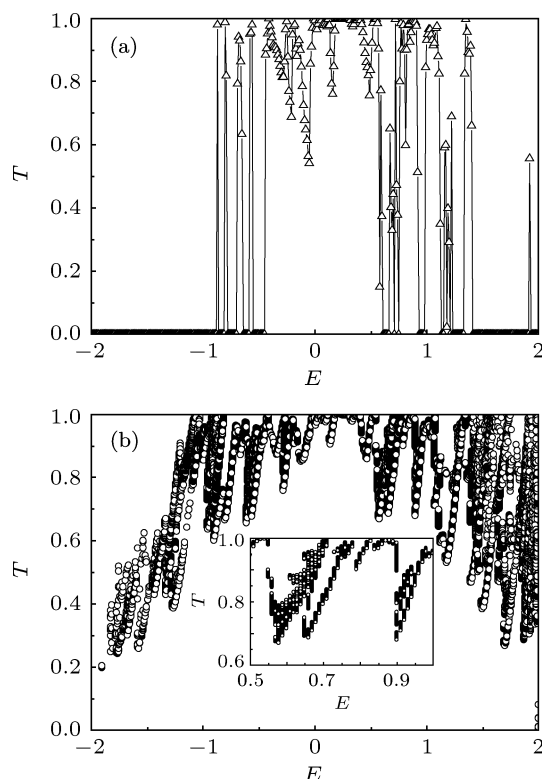


图4 链长  $N = 100$  (或  $99$ )、非线性强度  $\beta_B = 0.2$  时透射系数随电子能量的变化曲线 (a) 出射波振幅模的平方为定值 1 时的透射系数; (b) 电子透射波振幅在区间  $[0, 1]$  变化且电子入射波振幅模平方属于区间  $[0.98, 1]$  时的透射系数(插图为放大时的情形)

## 4 结论

我们利用非线性薛定谔方程的递推关系研究了非线性强度任意二聚的非线性链的透射性质. 结果表明该链存在一个共振透射态, 共振态的能量为非线性强度与入射波振幅模平方的乘积; 取出射波振幅为定值时透射系数随能量变化的曲线是单值函数, 而取入射波振幅模平方为定值时其曲线是多值函数. 如果取平均透射系数则非线性系统的多稳态现象就被抹平了. 取出射振幅为定值时计算的透射系数是非线性强度与入射振幅模平方的乘积共同

产生的影响. 而一旦取出射波振幅为定值则入射波振幅模平方就会随电子能量的改变而变化, 在这种情况下透射系数并不能直接体现非线性强度对系

统透射的影响; 而且非线性系统的多稳性质也得不到体现. 因此只有取入射波振幅模平方为定值时才能真正反映非线性强度对电子透射性质的影响.

- [1] Anderson P W 1958 *Phys. Rev.* **109** 1492
- [2] Abrahams E, Anderson P W, Licciardello D C, Ramakrishnan T V 1979 *Phys. Rev. Lett.* **42** 673
- [3] Dunlap D, Wu H L, Philips P W 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 88
- [4] Xiong S J 1993 *Appl. Phys. Lett.* **63** 81
- [5] Ojeda P, Huerta-Quintanilla R, Rodríguez-Achach M 2002 *Phys. Rev. B* **65** 233102
- [6] Sedrakyan T 2004 *Phys. Rev. B* **69** 085109
- [7] de Moura F A B F, Lyra M L 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 3735
- [8] Zhang G P, Xiong S J 2002 *Eur. Phys. J. B* **29** 491
- [9] Kivshar Y S, Gredeskul S A, Sánchez A, Vásquez L 1990 *Phys. Rev. Lett.* **64** 1693
- [10] Hu D S, Lu X J, Zhang Y M, Zhu C P 2009 *Chin. Phys. B* **18** 2498
- [11] Hu D S, Zhu C P, Zhang Y M 2011 *Chin. Phys. B* **20** 017104
- [12] Molina M I, Tsinoris G P 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 464
- [13] Kottos T, Weiss M 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 190604
- [14] Davids P S 1995 *Phys. Rev. B* **52** 4146
- [15] Liu X L, Xu H, Ma S S, Song Z Q 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2949 (in Chinese) [刘小良, 徐慧, 马松山, 宋招权 2006 物理学报 **55** 2949]
- [16] Bellani V, Diez E, Hey P, Toni L, Tarricone L, Parravicini G B, Dominguez-Adame F, Gómez-Alcala R 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 2159
- [17] Hostein T 1959 *Ann. Phys. (N. Y.)* **8** 325
- [18] Trombettoni A, Smerzi A 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 2353
- [19] Hopkins V A, Keat J, Meegan G D, Zhang T M, Maynard J D 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 1102
- [20] Molina M I 1998 *Phys. Rev. B* **58** 12547
- [21] Senouci K, Zekri N 2000 *Phys. Rev. B* **62** 2987
- [22] Cota E C, José J V, Maytorena J, Monsivais G 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 3302
- [23] Senouci K, Zekri N, Bahlouli H, Sen A K 1999 *J. Phys.: Condens. Matter* **11** 1823
- [24] García-Mata I, Shepelyansky D L 2009 *Phys. Rev. E* **79** 026205
- [25] Zhang Z J, Tong P Q, Gong J B, Li B W 2011 *Phys. Rev. E* **83** 056205
- [26] Delyon F, Lévy Y E, Souillard B 1986 *Phys. Rev. Lett.* **57** 2010
- [27] Cota E, José J V, Maytorena J, Monsivais G 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 3302
- [28] Shadrivov I V, Bliokh K Y, Bliokh Y P, Freilikher V, Kivshar Y S 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 123902
- [29] Datta P K 2007 *Phys. Rev. B* **75** 205127
- [30] Senouci K 2007 *J. Phys.: Condens. Matter* **19** 076202
- [31] Senouci K 2010 *Physica B* **405** 694

# Transport properties of nonlinear chains with random dimer nonlinearity parameters\*

Hu Dong-Sheng<sup>1)†</sup> Zhang Yan-Ling<sup>1)</sup> Yin Xiao-Gang<sup>1)</sup> Xu Jiang<sup>2)</sup>

1) (College of Science, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 211100, China)

2) (Department of Material Science and Engineering, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 211100, China)

(Received 26 September 2011; revised manuscript received 15 February 2012)

## Abstract

By using the recursion relation of discrete Schrödinger equation we investigate the transport properties of nonlinear chains with random dimer nonlinearity parameters. It is shown that there is a resonance state, which is just the product of the nonlinearity and the square of the incident wave amplitude modulus. The transmission coefficients are calculated in two conditions. One is that the transmission wave amplitude is a certain value, the other is that the incident wave amplitude modulus is a certain value. There are obvious differences in non-resonant states between the two kinds of conditions. The transmission is a single value function of the electronic energy for the former. However, it will be multi-stability for the latter. It is pointed out that the influence of the nonlinearity parameters on the transport properties can be exactly reflected only when the modulus of incident wave is set to be a certain value.

**Keywords:** disordered structures, delocalization processes, multistability

**PACS:** 71.55.Jv, 73.20.Jc, 42.65.Pc

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51175245), the Natural Science Foundation of Jiangsu Province, China (Grant No. BK2010073), and NUAA research foundation (Grant No. NS2010207).

† E-mail: dongshenghu@nuaa.edu.cn