

# 推广的 SSH 哈密顿及其孤子解

朴秋葆 周义昌 刘金明

(中山大学物理学系, 广州 510275)

**摘 要** 使用紧束缚近似方法推导出推广的 SSH 哈密顿, 比 Davydov 孤子的哈密顿多了一个表现电子近邻跳跃与晶格振动的耦合项, 随后使用数值方法计算非线性方程的孤子解. 对一些材料, 与 Davydov 孤子解一致, 对另一些材料, 则产生不同程度的变形.

**关键词** 孤子解, 紧束缚近似

**分类号** O572.2

有机导体材料的制备和应用在近 20 年来得到迅速发展, 促进了一维系统的理论研究<sup>[1]</sup>. 一个重要问题是电子与晶格振动相互作用的物理效果. 早在 50 年代末, Holstein 就研究一维链的电子与晶格光学振动模的相互作用, 得到一个非线性方程的钟形孤子解. 80 年代, Davydov 提出电子与晶格振动声学模的相互作用, 也能导致钟形极化子的形成<sup>[2]</sup>, 人们现在称之为 Davydov 孤子, 并用之解释动物肌肉收缩的能量传递. 决定 Davydov 孤子的哈密顿量, 是作为一种模型提出来的, 没有讨论过它的理论依据. 本文使用紧束缚近似方法, 从电子与晶格的相互作用的基本形式出发, 推导出电子与晶格相互作用的二次量子化形式. 结果发现, 较之 Davydov 使用的哈密顿, 多了晶格振动与电子近邻跳跃耦合的互作用项. 对于不同的准一维材料, 这一项对孤子形状有不同的影响.

## 1 一维链的哈密顿的推导

在一维链,  $N$  个电子的哈密顿量为

$$\hat{H}_e + \hat{H}_l = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{l=1}^N v(x_i - R_l) \right] \quad (1)$$

右边括号内第一项为电子的动能, 第二项为晶格对电子的作用势.  $v(x_i - R_l)$  表示第  $l$  个格点对第  $i$  个电子的作用势, 其中  $R_l = la + u_l$  表示格点位置,  $la$  是平衡位置,  $u_l$  是对平衡位置的偏离. 值得注意的是, 作用于一个电子上的总势  $V(x) \equiv \sum_{l=1}^N v(x - R_l)$  没有周期性. 分

收稿日期: 1992-10-12

子轨道波函数满足

$$[\hat{p}^2/2m + v(x - R_l)]\phi(x - R_l) = \epsilon_0\phi(x - R_l) \quad (2)$$

定义电子场算符

$$\psi(x) = \sum_l \phi(x - R_l)C_l$$

$$\psi^\dagger = \sum_l \phi^*(x - R_l)C_l^\dagger$$

则哈密顿(1)式可写为

$$\begin{aligned} \hat{H} + \hat{H}_I &= \int \psi(x)[\hat{p}^2/2m + V(x)]\psi(x)dx \\ &= \sum_l \epsilon_0 C_l^\dagger C_l + \sum_{l \neq l'} C_l^\dagger C_l \int \phi^*(x - R_{l'})[v(x) - v(x - R_l)]\phi(x - R_l)dx \end{aligned}$$

取  $l' = l$  及近邻近似( $l' = l \pm 1$ ), 则上式近似为

$$\begin{aligned} \hat{H}_e + \hat{H}_I &\approx \sum_l \epsilon_0 C_l^\dagger C_l \sum_l J_0(u_l) C_l^\dagger C_l \\ &= \sum_l t_1(u_{l+1}, u_l) (C_{l+1}^\dagger C_l^\dagger + C_l^\dagger C_{l+1}) \end{aligned} \quad (3)$$

其中  $J_0(u_l) = - \int \phi^*(x - R_l)[v(x) - v(x - R_l)]\phi(x - R_l)dx$

由于  $V(x)$  不具有周期性( $V(x + R_l) \neq V(x)$ ),  $J_0$  仍然与  $u_l$  有关. 取到  $u_l$  的一级项

$$J_0(u_l) = J_0 + \chi u_l \quad (4)$$

类似, 跳跃积分取到一级项

$$\begin{aligned} t(u_{l+1} - u_l) &\equiv \int \phi^*(x - R_{l+1})[v(x) - V(x - R_l)]\phi(x - R_l)dx \\ &\approx t_0 + \alpha \cdot (u_{l+1} - u_l) \end{aligned} \quad (5)$$

将(4)式及(5)式代入(3)式, 得

$$\begin{aligned} \hat{H}_e + \hat{H}_I &= \sum_l (\epsilon_0 - J_0) C_l^\dagger C_l - \chi \sum_l u_l C_l^\dagger C_l - t_0 \sum_l (C_{l+1}^\dagger C_l + C_l^\dagger C_{l+1}) \\ &\quad - \alpha \sum_l (u_{l+1} - u_l) (C_{l+1}^\dagger C_l + C_l^\dagger C_{l+1}) \end{aligned}$$

严格地说, 由于  $V(x)$  不具有周期性, 跳跃积分  $t$  还是  $u_l$  的函数, 我们暂且忽略不考虑.

加上晶格振动动能和弹性能, 并且选择能量的零点使  $\epsilon_0 - J_0 = 0$ , 则一维链的哈密顿

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -t_0 \sum_l (C_{l+1}^\dagger C_l + C_l^\dagger C_{l+1}) - \alpha \sum_l (u_{l+1} - u_l) (C_{l+1}^\dagger C_l + C_l^\dagger C_{l+1}) \\ &\quad - \chi \sum_l u_l C_l^\dagger C_l + \sum_l \left[ \frac{1}{2} M \dot{u}_l^2 + \frac{1}{2} K (u_{l+1} - u_l)^2 \right] \end{aligned} \quad (6)$$

与文献[3]比较, (6)式比 Davydov 的哈密顿多了一项, 系数为  $\alpha$  的项. 但形式与 SSH 哈密顿类似, 我们称之为推广的 SSH 哈密顿.

## 2 孤波解

在二次量子化表象, Wannier 函数为  $C_l^\dagger |0\rangle$ . 电子波函数是它的线性迭加

$$|\psi\rangle = \sum_{l=1}^N \xi_l(u_1, \dots, u_N, t) C_l^\dagger |0\rangle_l \quad (7)$$

迭加系数  $\xi_l$  是振动态  $u_l$  的函数. 由定态方程  $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$  可得

$$E\zeta_i = -t_0(\zeta_{i+1} + \zeta_{i-1}) - \chi u_i \zeta_i - \alpha[(u_i - u_{i-1})\zeta_{i-1} + (u_{i+1} - u_i)\zeta_{i+1}] + [\sum_{i=1}^N \frac{1}{2} M u_i^2 + \frac{1}{2} K(u_i - u_{i-1})^2] \zeta_i \quad (8)$$

我们对晶格振动作如下近似:所有  $u_i$  采取同一频率  $\omega_0$  振动,忽略动能项,相当于对  $\zeta_i$  作绝热近似. 则

$$E\zeta_i = -t_0(\zeta_{i+1} + \zeta_{i-1}) - \chi u_i \zeta_i - \alpha[(u_i - u_{i-1})\zeta_{i-1} + (u_{i+1} - u_i)\zeta_{i+1}] + \sum_i \frac{1}{2} M \omega_0^2 u_i^2 \zeta_i$$

根据归一化条件及极值条件  $\partial E / \partial u_i = 0$ , 可得基态  $u_i$  与  $\zeta_i$  之关系

$$u_i = (1/M\omega_0^2)[\chi|\zeta_i|^2 + \alpha(\zeta_i^* \zeta_{i-1} + c.c) - \alpha(\zeta_i^* \zeta_{i+1} + c.c)] \quad (9)$$

将(9)式代入(8)式,消去  $u_i$ , 得到

$$(E - \frac{1}{2} \sum_i M \omega_0^2 u_i^2) \zeta_i = -t_0(\zeta_{i+1} + \zeta_{i-1}) - (\chi \zeta_i / M \omega_0^2) [\chi \zeta_i^2 + 2\alpha \zeta_i (\zeta_{i-1} - \zeta_{i+1})] - (\alpha / M \omega_0^2) [\chi \zeta_i^2 - \zeta_i^{2l-1} \zeta_{i-1} + \chi (\zeta_i^{2l+1} - \zeta_i^2) \zeta_{i+1}]$$

令  $\epsilon = E - \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} M \omega_0^2 u_i^2$ , 且取  $\zeta_i$  为实数, 则上式简化为

$$\epsilon \zeta_i = -t_0(\zeta_{i+1} + \zeta_{i-1}) - (\chi^2 / M \omega_0^2) \zeta_i^3 - (3\alpha \chi / M \omega_0^2) [\zeta_i^2 (\zeta_{i+1} - \zeta_{i-1})] - (\alpha \chi / M \omega_0^2) (\zeta_{i+1}^2 - \zeta_{i-1}^2) \quad (10)$$

应用微扰方法解方程(10). 因为  $\alpha$  是小量, 把不含  $\alpha$  项的方程当成零级方程, 则得到

$$\epsilon \zeta_i = -t_0(\zeta_{i+1} + \zeta_{i-1}) - (\chi^2 / M \omega_0^2) \zeta_i^3 \quad (11)$$

方程(11)与文献[3]完全相同. 其解是钟形孤子解, 即

$$\zeta_i = \sqrt{b/8} \operatorname{sech}(bl/4) \quad l = 1, 2, \dots, N \quad (12)$$

其中,  $b = \chi^2 / M \omega_0^2 t_0$  (13)

是一个与链性质有关的参数. 不同的  $b$  值表示不同的有机材料.

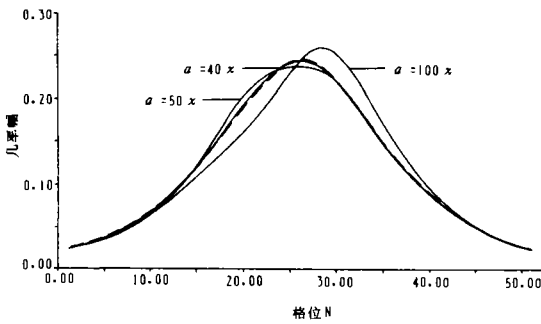


图 1 虚线为 Davydov 孤立子的几率幅, 实线为  $\alpha = 40\chi, 50\chi$  和  $100\chi$  时 SSH 哈密顿的孤子解. 取  $b = 0.48$

Fig. 1 A comparison of the amplitude of soliton in different  $\alpha$  value with  $\alpha = 0$  (dashed line) for  $b = 0.48$

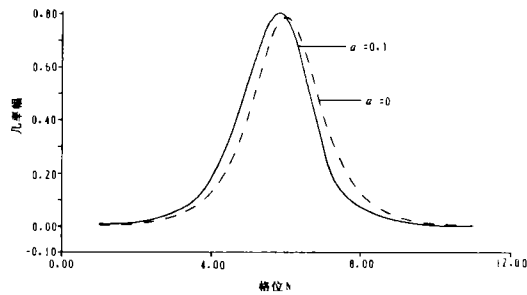


图 2  $\alpha = 0$  (虚线) 与  $\alpha = 0.1\chi$  的孤子几率幅比较,  $b = 5.0$

Fig. 2 A comparison of the amplitude of soliton in  $\alpha = 0$  (dashed line) and  $\alpha = 0.1$  (solid line) for  $b = 5.0$

我们使用计算机进行数值计算,以讨论  $\alpha \neq 0$  情况引起的修正.采用文献[4]的数据:  
 $t_0 = 2.5 \text{ eV}$ .

图 1 的曲线表明,在  $b = 0.48$  时,只有  $\alpha \geq 40 \chi$ ,推广 SSH 哈密顿的孤子解才发生对于 Davydov 孤子解有意义的偏离,因此,对于  $b = 0.48$  的材料, $\alpha$  项是不重要的,Davydov 的解是正确的.

但是, $b$  值不同, $\alpha$  项的影响是不同的.图 2 是  $b = 5.0$  时的数值计算结果,图 3 和图 4 分别取  $b = 7.0$  和  $b = 8.0$ .这 3 种情况都取  $\alpha = 0.1 \chi$ .我们看到,随着  $b$  值的增大,虽然  $\alpha$  值都很小,但图 3 和图 4 已表明孤子解形状发生与 Davydov 钟形解有意义的偏离.

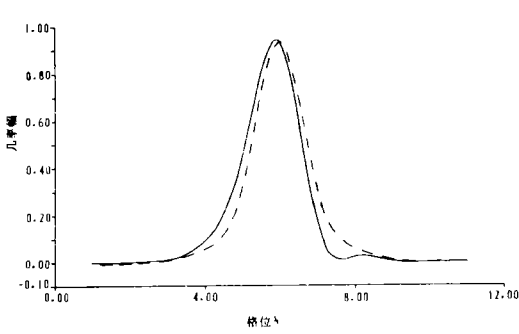


图 3  $\alpha = 0$ (虚线)与  $\alpha = 0.1\chi$ (实线)的孤子几率幅比较, $b = 7.0$

Fig. 3 A comparison of the amplitude of soliton in  $\alpha = 0$  (dashed line) and  $\alpha = 0.1\chi$  (solid line) for  $b = 7.0$

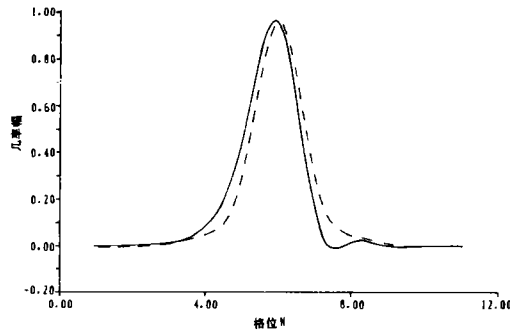


图 4  $\alpha = 0$ (虚线)与  $\alpha = 0.1\chi$ (实线)的孤子几率幅比较, $b = 9.0$

Fig. 4 A comparison of the amplitude of soliton in  $\chi = 0$  (dashed line) and  $\alpha = 0.1\chi$  (solid line) for  $b = 9.0$

由此可见,推广的 SSH 哈密顿量中比 Davydov 哈密顿多了的  $\alpha$  项,对不同的准一维链,此  $\alpha$  项的作用大小将不同:对聚乙炔, $b$  值为 0.48,没有影响,与 Davydov 结果一致.对于大  $b$  的准一维材料,极化子的束缚能大于 1.875 eV 时,它将直接影响到极化子的孤子解. $\alpha$  项的出现给极化子的束缚能以很小的修正,对极化子的寿命结果<sup>[5]</sup> 也就没有影响.聚苯胺(PAN)的能隙的实验值 3.6 eV<sup>[6]</sup> 与前理论值 3.1 eV 不符<sup>[7]</sup>,推广的 SSH 哈密顿所得结果:聚苯胺的能隙,聚乙炔的能隙均与实验相符<sup>[8]</sup>.由推广的 SSH 哈密顿量,也给出了不同准一维材料的极化子孤子解的不同扭变.

### 参 考 文 献

- 1 孙鑫. 低维凝聚态物理进展. 物理学进展, 1985, 5: 101
- 2 Holstein T. Studies of polaron motion. Ann Phys, 1959, 8: 1325
- 3 Davydov A. Effect of the electron-phonon interaction on the motion of the electron in 1D system. Sov Phys Usp, 1982, 25: 898

- 4 Grant P, Batra I. Band structure of polyacetylene,  $(CH)_x$ . Solid State Comm, 1979, 29:225
- 5 Campbell D. Polarons in quasi-one-dimensional systems. Phys Rev, 1982, B26:6862
- 6 Bolterauer H. The quantum lifetime of the Davydov soliton. Opper M. Z Phys, 1991, B82:95
- 7 McCall R. Spectroscopy and defect state in polyanitine. Phys Rev, 1990, B41:5202
- 8 Boudreaux D. J Chem Phys, 1986, 85,4584

## Generalized SSH Hamiltonian and Its Soliton Solution

*Lin Chiubao\* Zhou Yichang Liu Jinming*

**Abstract** The generalized SSH Hamiltonian is derived. It is shown that a term arising from the coupling between lattice vibration and electron hopping is missing in the Davydov's Hamiltonian. We obtain the soliton solution of a Hamiltonian including this term. The results show that this term have different effect in different metarials.

**Keywords** soliton, solution

· 简 讯 ·

### 指压喷射塑料彩条研制成功

中山大学高分子研究所冯敏辉和何宜等已研制和开发成功指压喷射塑料彩条,这种产品属国内首创,且已先后向中山市永利日用化工厂(雅黛)和广东省化工学校高新技术开发部转让制备技术.产品在广州市内和国内一些地区大商场已有出售.这种产品的研制和开发不仅给人们的生活增添一份色彩,也由于这种产品没有噪音和环境污染,作为助庆产品可望逐步得到人们的认识,在某些场合用以代替鞭炮和烟花,以避免燃放鞭炮和烟花带来和可能带来的环境污染和火警.

(何 宜)

\* Department of Physics, Zhongshan University, Guangzhou 510275