第32卷 第2期
1993年

中山大学学报（自然科学版）
ACTA SCIENTIARUM NATURALIUM UNIVERSITATIS SUNYATSENI

Vol.32 №.2
1993

一维单原子链中电子的运动

周义昌　　余超凡

（中山大学物理学系）　（广东教育学院物理学系）

摘　要　应用相干态方法讨论一维链中的电子与晶格声学振动模的非微扰作用，给出亚声速和超声速孤立子解及孤立子的形状，并指出在适当条件下可简化为Davydov孤立子。

关键词　孤立子，亚声速与超声速

在讨论晶体中电子运动时，通常第一步是假设晶格原子都处于周期排列的平衡位置上不动，电子能级形成带状，电子状态为扩展全晶体的布洛赫波；第二步则把偏离平衡位置的晶格振动对电子作用视为微扰，微扰效果之一是对电子散射形成电阻。

但电子与晶格振动的相互作用可以是很强的，以致不能认为是微扰。电子引起晶格极化又反过来作用于电子本身，并降低它的能量，极化趋向于跟随电子运动。可以将电子和它的感应极化场的联合体视为一个准粒子，通常称为极化子，极化子概念是Landau在1933年首先提出的[1]，Fröhlich、Lee等人和Holstein对它也进行了大量的理论研究[2~4]。晶格振动一般包含光学振动模和声学振模，而上述文献讨论的都是电子与光学振动模的相互作用效果。电子与声学模的相互作用，直到近十多年来Davydov的一系列研究工作之后[5,6]，才引起人们更多的关注。Davydov证明，在一维链中，电子与晶格振动的声学模的相互作用，虽然是短程的，但也可以形成双曲正割型的钟形孤立波。人们称这种孤立波为Davydov孤立子[7]，Davydov孤立子稳定存在的条件是传播速度小于链的声速。文献〔8〕考虑一维链中近邻格点互作用存在非简谐项时，大于声速和小于声速的孤立子都可存在。但若只考虑近邻格点的简谐作用时，只能存在亚声速孤立子。

本文将证明，如果自洽地处理运动方程的连续极限，不必如Davydov那样引进格点与格点的非简谐作用，在一维链中也可以存在超声速和亚声速的孤立子。本文还将给出形状不同于文献〔5～8〕的孤立子。文中还讨论了电子-声学振动耦合常数不同大小时非线性方程的解，结果表明，耦合常数很小时，给出Davydov孤立子；耦合常数增大，只要满足$|v^2a^2\phi^2|<1$时，我们仍得到孤立子解。

1　哈密顿量与运动方程

考虑电子与晶格的声学振动模的互作用，一维晶体可以简化为一维单原子链，设考

本文1991年12月11日收到

虑单原子链上有一个多余电子的系统，系统的哈密顿量

$$H = H_e + H_{vib} + H_i \tag{1}$$

电子哈密顿量

$$H_e = -D\sum_l \left(C^+_{l+1}C_l + C^+_l C_{l+1} \right) \tag{2}$$

C^+_l 及C_l表示格位l上的电子产生及湮灭算符，D是最近邻跳跃矩阵元，（2）式给出电子能带

$$\epsilon(k) = -2D\cos ka$$

a是晶格常数，电子能带中心位于$\epsilon = 0$处，能带底在$-2D$。晶格振动项

$$H_{vib} = \sum_l \left[(P^2_l/2M) + \frac{1}{2}K_0(u_l - u_{l-1})^2 \right] \tag{3}$$

式中的u_l表示格点l对平衡位置的偏离，P_l为相应的正则动量，M为格点原子质量，K_0是恢复力系数。（3）式完全忽略3次方以上的非简谐作用。

电子与晶格声学振动模的互作用，可采用Bardeen-Shotkly 形变势模型[9]。晶格振动u_l与u_{l-1}的差异$(u_l - u_{l-1})$导致晶格距离的相对变化

$$\Delta_l = (u_l - u_{l-1})/a$$

对能带底部的电子产生正比于Δ_l的作用势$c\Delta_l$(c为比例常数)，在二次量子化表象

$$H_i = \sum_{ll'} \langle l|c\Delta_l|\rangle C^+_l C_l{}'$$

$|l\rangle$及$|l'\rangle$是电子的瓦尼尔（Wannier）函数，显然矩阵元$\langle l|(a/c)(u_n - u_{n-1})|l'\rangle$是对角的，即

$$\langle l|(a/c)(u_l - u_{l-1})|l'\rangle = (a/c)(u_l - u_{l-1})\delta_{ll'}$$

于是得

$$H_i = g\sum_l (u_l - u_{l-1})C^+_l C_l \tag{4}$$

式中的$g = a/c$为电子-晶格声学振动耦合常数。

综合上述的（1）、（2）、（3）、（4）式，系统的哈密顿量为

$$H = -D\sum_l C^+_l(C_{l+1} + C_{l-1}) - g\sum_l (u_l - u_{l-1})C^+_l C_l + \sum_l \left[(P_l{}^2/2M) + \frac{1}{2}K_0(u_l - u_{l-1})^2 \right] \tag{5}$$

电子消灭算符C_l的运动方程为

$$i\hbar\frac{\partial C_l}{\partial t} = [C_l, H] = -D(C_{l+1} + C_{l-1}) + g(u_l - u_{l-1})C_l \tag{6}$$

这是一个非线性算符方程。利用Glauber的相干态[10]

$$|\Psi\rangle = \prod_l |A_l\rangle \tag{7}$$

可以得到电子在格位l上的概率幅方程。这里的数值A_l及态$|A_l>$是电子消灭算符C_l的本征值及本征函数，即

$$C_l|A_l> = A_l|A_l>$$

电子在l格位上的概率幅为

$$A_l = <\Psi|C_l|\Psi> \tag{8}$$

相应式(6)的概率幅方程为

$$i\hbar\frac{\partial A_l}{\partial t} = -D(A_{l+1}+A_{l-1}) + g(u_l - u_{l-1})A_l \tag{9}$$

求总哈密顿量H的平均值，得

$$E = <\Psi|H|\Psi> = \sum\left\{A_l^*\left[-D(A_{l+1}+A_{l-1}) + g(u_l-u_{l-1})A_l\right] + \frac{1}{2M}P_l^2 + \frac{1}{2}K_0(u_l-u_{l-1})^2\right\} \tag{10}$$

使用经典哈密顿方程处理晶格振动，得到

$$\dot{u}_l = \partial E/\partial P_l = P_l/M$$

$$\dot{p}_l = -\partial E/\partial u_l = -g(A_l^*A_l - A_{l+1}^*A_{l+1}) + K_0(2u_l - u_{l+1} - u_{l-1})$$

由此不难得到u_l满足方程

$$\frac{\partial^2 u_l}{\partial t^2} = -\frac{K_0}{M}(2u_l - u_{l+1} - u_{l-1}) - \frac{g}{M}(|A_l|^2 - |A_{l+1}|^2) \tag{11}$$

(9)及(11)是描述一维链电子和晶格声学振动的基本方程。

2　连续极限与孤立子解

2.1　连续极限

设电子运动概率幅$A_l(t)$的变化空间尺度远大于晶格间距，可以采用连续模型。在连续模型近似中，我们对方程(9)及(11)的任何离散量都取到二级微商项，即

$$A_l(t) = A(x,t)$$

$$u_l(t) = u(x,t)$$

$$A_{l\pm1}(t) \approx A(x,t) \pm a\frac{\partial}{\partial x}A(x,t) + \frac{a^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}A(x,t)$$

$$u_{l\pm1}(t) \approx u(x,t) \pm a\frac{\partial}{\partial x}u(x,t) + \frac{a^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}u(x,t)$$

……

于是(9)及(11)式变为

$$i\hbar\frac{\partial A}{\partial t} = -2DA - Da^2\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} + ga\frac{\partial u}{\partial x}A - \frac{ga^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}A \tag{12}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}=v_0^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial a}{M}\frac{\partial}{\partial x}|A|^2+\frac{ga^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial x^2}|A|^2 \tag{13}$$

其中 $v_0^2=K_0a^2/M$

为声速平方值。(12)及(13)不同于文献〔5〕，因为我们作连续近似时，所有量统一地取得二级微商项。

设运动方程(12)及(13)具有如下形式的行波解：

$$A(x,t)=\phi(\xi)e^{i(kx-\omega t+\varphi)} \tag{14}$$

$$u(x,t)=u(\xi) \tag{15}$$

$$\xi=x-vt \tag{16}$$

代入方程(13)，可得

$$(v^2-v_0^2)u_{\xi\xi}=\frac{ga}{M}(\phi^2)_\xi+\frac{ga^2}{2M}(\phi^2)_{\xi\xi} \tag{17}$$

积分一次得

$$u_\xi=\left[\frac{-g}{K_0a^2(1-s^2)}\right]\left[\phi^2+\frac{a}{2}(\phi^2)_\xi\right] \tag{18}$$

其中

$$s=v/v_0$$

将(14)及(18)代入(12)，并令

$$U=g^2/[2Da^2K_0(1-s^2)]$$

可得

$$\phi_{\xi\xi}=\mu^2\phi-2U\phi^3+\frac{1}{2}Ua^2\phi(\phi^2)_{\xi\xi} \tag{19}$$

其中 $\mu^2=\frac{1}{Da^2}(-2D+Da^2k^2-\hbar\omega)$

$$k=\hbar v/2Da^2$$

对(19)式积分一次得

$$(\phi_\xi)^2=\phi^2(\mu^2-U\phi^2)(1-Ua^2\phi^2)^{-1} \tag{20}$$

2.2 孤立子解

如果电子-晶格声学振动耦合使式(20)分母的$|va^2\phi^2|\ll 1$，对(20)式作展开，得

$$(\phi_\xi)^2=\phi^2(\mu^2+c_1\phi^2+c_2\phi^4) \tag{21}$$

其中 $c_1=-U(1-\mu^2a^2)$，$c_2=-U^2a^2$

令 $\phi^2(\xi)=1/f(\xi)$

代入(21)，可得$f(\xi)$满足的方程

$$\frac{df}{d\xi}=2\mu\sqrt{\left(f+\frac{c_1}{2\mu^2}\right)^2-\frac{1}{4\mu^2}(c_1^2-4\mu^2c_2)} \tag{22}$$

令 $$\alpha\equiv\frac{-c_1}{2\mu^2}=\frac{U}{2\mu^2}(1-\mu^2a^2) \tag{23}$$

$$\beta^2\equiv\frac{1}{4\mu^4}(c_1{}^2-4\mu^2c_2)=\frac{1}{4\mu^4}U^2(1+\mu^2a^2)>0 \tag{24}$$

于是(22)式整理为

$$2\mu\mathrm{d}\xi=\frac{\mathrm{d}f}{\sqrt{(f-\alpha)^2-\beta^2}}$$

在$\beta^2>0$条件下，对上式两边积分得

$$2\mu(\xi-\xi_0)=\cosh^{-1}[(f-\alpha)/\beta]$$

按照(14)式，电子概率幅的包络

$$\phi(\xi)=1/[\alpha+\beta\cosh 2\mu(\xi-\xi_0)]^{1/2} \tag{25}$$

等价的形式为

$$\phi(\xi)=1/[(\alpha-\beta)+2\beta\cosh^2\mu(\xi-\xi_0)]^{1/2} \tag{26}$$

或

$$\phi(\xi)=1/[\alpha+\beta+2\beta\sinh^2(\xi\mu-\xi_0)]^{1/2} \tag{27}$$

当$\alpha-\beta\ll 2\beta$，这对应耦合很弱的情况。我们的孤立子解简化为Davydov 给出的孤立子解[5～8]

$$\phi(\xi)=\frac{1}{\sqrt{2\beta}}\mathrm{sech}\ \mu(\xi-\xi_0) \tag{28}$$

3　孤立子解成立的条件

由于$0\leqslant\sinh x<+\infty$，孤立子解(27)成立的条件是：

(1)$\beta>0$。从定义(24)式，取

$$\beta=\frac{1}{2\mu^2}|U(1+\mu^2a^2)| \tag{29}$$

则不论U的正负，此条件总能满足。

(2)$\alpha+\beta>0$。这一条件复杂一些，分开两种情况进行讨论：

①$U>0$。按定义，对应于孤立子速度v小于声速v_0。使用(23)式及(27)式，有

$$\alpha+\beta=\frac{U}{2\mu^2}(1-\mu^2a^2)+\frac{U}{2\mu^2}(1+\mu^2a^2)=\frac{U}{\mu^2}>0$$

孤立子解成立。

②$U<0$，对应于孤立子速度v大于声速v_0的情况。则

$$\alpha+\beta=\frac{U}{2\mu^2}(1-\mu^2a^2)-\frac{U}{2\mu^2}(1+\mu^2a^2)=-Ua^2=|U|a^2>0$$

孤立子解也成立。

即是说，在一维简谐晶格中，由于电子-声学振动的互作用，存在亚声速和超声速的孤立子解。

综上所述，电子-晶格的声学振动模的互作用，可以导致非线性极化孤立子存在，即使只考虑格点之间的简谐作用，极化孤立子的传播速度可以小于和大于声速；孤立子形状一般不同于Davydov孤立子形状，在耦合很弱时，简化为Davydov 给出的形状。

参考文献

1 Landau L. Phys Sowjetunion 1933, 3:664
2 Fröhlich H. Adv Phys 1954, 3:325
3 Lee T D, Low F E, Pines D. Phys Rev 1953 90:297
4 Holstein T. Ann Phys (New York), 1959, 8:325, 343
5 Davydov A S, Kislukha N I. Phys Status Solidi (b), 1973, 59:465
6 Davydov A S. Uspekhi Fiz Nauk (Russ Ed), 1982, 138:603; Sov Phys Usp, 1982, 25:898
7 Scott A C. Phys Sev, 1982, A26:578
8 Davydov A S, Zolotariuk A V. Physica Scripta, 1984, 30:426
9 Bardeen J, Shockley W. Phys Rev. 1950, 80:72
10 Glauber R Z. Phys Rev, 1963, 131:2766

Electronic Motions in One-dimensional Chains

Zhou Yichang Yu Chaofan*

Abstract Non-perturbation interaction of an electron with lattice acoustic mode is studied by the method of coherent state. Solutions of solitary wave travelling with subsonic or supersonic velocity are derived, which is shown to reduce to Davydov soliton solution in the weak coupling condition.

Keywords soliton, subsonic and sapersonic velocities

* Department of Physics, Zhongshan University