第18卷第9期 半导体学报 Vol. 18, No. 9
1997年9月 CHINESE JOURNAL OF SEMICONDUCTORS Sep., 1997

氢键分子链中扭结-反扭结孤子的非对称特性

成元发 曹万强

(湖北大学物理系 武汉 430062)

摘要 采用微扰方法研究了氢键分子链中原子间存在非简谐相互作用时,对扭结-反扭结孤子的影响,得到了3次方到6次方非简谐项下的扭结-反扭结孤子的非对称解,计算了由非简谐项引起的扭结-反扭结孤子的能量和有效质量.

PACC: 0547, 6170

1 引言

氢键分子链中质子沿氢键链转移是一个十分重要的课题.近年来已有较多的作者开展了仔细的研究[1~8].氢键分子链存在于固态系统和许多生物分子链中,如冰晶格氢键分子链中质子的迁移与质子沿氢键链的转移相联系.研究表明,质子的运动方程具有孤子解形式,由于孤子具有能量不弥散等特殊性质,它可以用来解释质子有效的转移和能量的高效传输.Pnevmatikos[9]提出的模型描述了冰晶体及其他氢键半导体键缺陷的形成与传播.Eigen和Demayer进一步计算了键缺陷所携带的电荷为0.36e[10],Jaccard[10]通过计算发现冰晶体中键缺陷的迁移率大约为$10^{-4}cm^2/(V\cdot s)$.因而键缺陷在质子沿氢键链转移过程中起着重要作用.氢键分子链中键缺陷有两种类型,一种是带负电的L缺陷对应于扭结孤子的缺陷;另一种是带正电的D缺陷对应于反扭结孤子缺陷.L和D缺陷的非对称性已被实验观察到[11].

氢键分子链的一个重要性质就是每个氢键中质子的势能曲线有两个极小值,它们相应于质子的两个平衡位置,质子从双阱势中的一个势阱转移到另一个势阱,将在质子子晶格中激发孤子缺陷.近年来文献[6~8,12,13]中研究了氢键分子链中原子间存在简谐相互作用近似下扭结孤子的特性,成功地解释了很多的实验现象和物理规律.但这些模型中仅计及到氢键分子链中原子间存在的简谐相互作用,因而只能得到扭结与反扭结孤子的对称解,不能解释氢键分子链中被实验观察到的L和D缺陷的非对称性,因而很有必要在简谐相互作用近似的基础上进一步考虑原子间存在的非简谐相互作用.文献[10]中指出,对于氢键固体和铁电体

成元发 男,1949年生,副教授,从事固体物理中非线性理论研究及固体物理教学工作
曹万强 男,1964年生,博士,从事固体,材料物理的研究
1996年7月17日收到初稿,1996年12月17日收到修改稿

考虑非简谐相互作用并用微扰方法进行处理是行之有效的.因而本文作者进一步考虑了氢键分子链中原子间还存在非简谐相互作用,用微扰方法研究了原子间非简谐相互作用对扭结孤子的影响,得到了3次方到6次方非简谐项下扭结-反扭结孤子的非对称解,并计算出由非简谐项引起的扭结-反扭结孤子的能量和有效质量,与实验观察相符合[11].

2 扭结孤子模型

我们的讨论建立在单分量扭结孤子模型的基础上,即假设重离子子晶格(如冰晶体中的氧晶格)是冻结的.氢键分子链中的单分量孤子模型的Hamiltonian是

$$H = \frac{1}{l}\int_{-\infty}^{\infty}[\frac{1}{2}m(u_t^2 + c_0^2u_x^2) + V(u)]\mathrm{d}x \tag{1}$$

其中 l 是晶格常数;m 是质子的质量;c_0 是质子子晶格的特征声速.

在每一个氢键桥中质子的势能具有双阱的形式[12]:

$$V(u) = \varepsilon_0(1 - \frac{u^2}{u_0^2})^2 \tag{2}$$

其中 $u(x,t)$表示质子相对于两个邻近重离子之间的中点位移场;ε_0 是势垒的高度;u_0 是沿氢键分子链从势垒顶端处到双阱势中的一个极小处的距离.相应于(1)式的Euler-Lagrange运动方程是:

$$mu_{tt} - mc_0^2u_{xx} + V'(u) = 0 \tag{3}$$

上述方程是在(1)式中仅考虑简谐相互作用下得到的,进一步考虑到质子子晶格中原子间存在非简谐相互作用,因而在简谐相互作用势的基础上还应计入非简谐相互作用势,这样,我们一般性地引入包括简谐和非简谐项在内的相互作用势[10]:

$$W(u_x) = \frac{1}{2}mc_0^2u_x^2 + \lambda mc_0^2\rho(u_x) \tag{4}$$

其中 λ 是小的常数参数;$\rho(u_x)$是对原子间非简谐相互作用的考虑.则包括非简谐相互作用系统的运动方程可写成:

$$mu_{tt} - W''(u_x)u_{xx} + V'(u) = 0 \tag{5}$$

上式可以看出,在 $\lambda=0$ 的情况下,(5)式将退化为(3)式,在简谐相互作用近似下,(3)式具有对称的扭结-反扭结孤子解[12]:

$$u = \sigma u_0\tanh[\sqrt{\frac{\alpha c_0^2}{2(c_0^2 - v^2)}}](x - vt) = \sigma u_0\tanh\sqrt{\frac{\alpha}{2}}\gamma(x - vt) \tag{6}$$

其中 $\sigma=\pm1$,$\sigma=1$ 对应于扭结孤子,$\sigma=-1$ 对应于反扭结孤子.

$$\alpha = \frac{4\varepsilon_0}{mc_0^2u_0^2},\quad \beta = \frac{4\varepsilon_0}{mc_0^2u_0^4},\quad u_0 = \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}},\quad \gamma = (1 - \frac{v^2}{c_0^2})^{-1/2},$$

v 是扭结孤子沿氢键分子链的传播速度.

3 非简谐相互作用下扭结-反扭结孤子的非对称解

在有微扰存在时 $\lambda\neq0$,并考虑非简谐势的影响,我们假定主要是引起扭结波形的修正,

方程(5)具有行波解：

$$u = u(\xi) = u(x - vt) \tag{7}$$

其中　$\xi = x - vt$，并且有：$u_{tt} = v^2 u_{\xi\xi}$；$u_{xx} = u_{\xi\xi}$；$W(u_\xi) = \frac{1}{2} m c_0^2 u_\xi^2 + \lambda m c_0^2 \rho(u_\xi)$.

将上述各式代入(5)式并整理得到

$$-mc_0^2\gamma^{-2}u_{\xi\xi} - mc_0^2\lambda\rho''(u_\xi)u_{\xi\xi} + V'(u) = 0 \tag{8}$$

用 u_ξ 乘上式并积分

$$\int_{-\infty}^{\xi} -mc_0^2\gamma^{-2}u_{\xi\xi}\cdot u_\xi \mathrm{d}\xi - \int_{-\infty}^{\xi} m(c_0^2\lambda\rho''(u_\xi)u_{\xi\xi}\cdot u_\xi \mathrm{d}\xi + \int_{-\infty}^{\xi} \frac{\mathrm{d}v(u)}{\mathrm{d}u} u_\xi \mathrm{d}\xi = 0$$

其中

$$\int_{-\infty}^{\xi} -mc_0^2\gamma^{-2}u_{\xi\xi}\cdot u_\xi \mathrm{d}\xi = -\frac{1}{2}mc_0^2\gamma^{-2}u_\xi^2;\int_{-\infty}^{\xi} \frac{\mathrm{d}V(u)}{\mathrm{d}u} u_\xi \mathrm{d}\xi = V(u)$$

令

$$\Omega = \int_{-\infty}^{\xi} \rho''(u_\xi)u_{\xi\xi}\cdot u_\xi \mathrm{d}\xi = u_\xi\rho'(u_\xi) - \rho(u_\xi) \tag{9}$$

由此得到

$$-\frac{1}{2}mc_0^2\gamma^{-2}u_\xi^2 - mc_0^2\lambda\Omega + V(u) = 0 \tag{10}$$

设(8)式中扭结的解具有下面的形式：

$$u(\xi) = u(0,\xi) + \lambda\varphi(\xi) \tag{11}$$

其中　$u(0,\xi)$是系统无微扰时的扭结，即 $\lambda=0$ 时的情形. 将(11)式代入(10)式中，并运用展开式：

$$V[u(0) + \lambda\varphi] \approx V[u(0)] + \lambda V'[u(0)]\varphi \tag{12}$$

以及 $u(0,\xi)$和 $V[u(0,\xi)]$的关系式：

$$-\frac{1}{2}mc_0^2\gamma^{-2}u'^2(0) + V[u(0)] = 0 \tag{13}$$

由此并整理，则(10)式成为：

$$-mc_0^2\gamma^{-2}u'(0)\varphi' - mc_0^2\Omega + V'[u(0)]\varphi = 0$$

因为

$$V[u(0)] = \frac{1}{2}mc_0^2\gamma^{-2}u'^2(0)$$

所以

$$V'[u(0)] = mc_0^2\gamma^{-2}u''(0) \tag{14}$$

则(10)式最后成为：

$$\gamma^{-2}u'(0)\varphi' - \gamma^{-2}u''(0)\varphi = -\Omega \tag{15}$$

从上式得到

$$\varphi = u'(0)\int_{-\infty}^{\infty} \frac{-\Omega\gamma^2}{u'^2(0)}\mathrm{d}\xi \tag{16}$$

由于扭结孤子具有极性因子 σ，因而为了寻求计入非简谐相互作用后，扭结-反扭结孤子解，能量和有效质量的一般规律，并预言今后的物理实验中可能得到的更精细的实验结果，我们考虑了从 3 次方到 6 次方的非简谐项：

$$\rho(u_x) = k_1u_x^3 + k_2u_x^4 + k_3u_x^5 + k_4u_x^6$$

其中 $k_1 \sim k_4$ 为耦合系数，则

$$\rho(u_\xi) = k_1u_\xi^3 + k_2u_\xi^4 + k_3u_\xi^5 + k_4u_\xi^6 \tag{17}$$

$$\Omega = u_\xi\rho'(u_\xi) - \rho(u_\xi) = -\frac{2}{3}k_1u_\xi^3 - \frac{3}{4}k_2u_\xi^4 - \frac{4}{5}k_3u_\xi^5 - \frac{5}{6}k_4u_\xi^6$$

$$\varphi = u'(0)\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\gamma^2}{u'^2(0)}(\frac{2}{3}k_1u_\xi^3 + \frac{3}{4}k_2u_\xi^4 + \frac{4}{5}k_3u_\xi^5 + \frac{5}{6}k_4u_\xi^6)\mathrm{d}\xi$$

$$\approx u'(0)\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\gamma^2}{u'^2(0)}(\frac{2}{3}k_1u'^3(0) + \frac{3}{4}k_2u'^4(0) + \frac{4}{5}k_3u'^5(0) + \frac{5}{6}k_4u'^6(0))\mathrm{d}\xi$$

$$= u'(0)\int_{-\infty}^{\infty}\gamma^2(\frac{2}{3}k_1u'(0) + \frac{3}{4}k_2u'^2(0) + \frac{4}{5}k_3u'^3(0) + \frac{5}{6}k_4u'^4(0))\mathrm{d}\xi$$

其中

$$\int_{-\infty}^{\infty}u'(0)\mathrm{d}\xi = 2u_0$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}u'^2(0)\mathrm{d}\xi = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\alpha}{2}\gamma^2\sigma^2u_0^2\mathrm{sech}^4\sqrt{\frac{\alpha}{2}}\gamma(x-vt)\mathrm{d}\xi = \frac{2\sqrt{2}}{3}\alpha^{1/2}\gamma u_0^2$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}u'^3(0)\mathrm{d}\xi = \int_{-\infty}^{\infty}(\frac{\alpha}{2})^{3/2}\gamma^3\sigma u_0^3\mathrm{sech}^6\sqrt{\frac{\alpha}{2}}\gamma(x-vt)\mathrm{d}\xi = \frac{8}{15}\alpha\gamma^2\sigma u_0^3$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}u'^4(0)\mathrm{d}\xi = \int_{-\infty}^{\infty}(\frac{\alpha}{2})^2\gamma^4\sigma^4u_0^4\mathrm{sech}^8\sqrt{\frac{\alpha}{2}}\gamma(x-vt)\mathrm{d}\xi = \frac{8\sqrt{2}}{35}\alpha^{3/2}\gamma^3u_0^4$$

$$\varphi = \sqrt{\frac{\alpha}{2}}\gamma\sigma u_0\mathrm{sech}^2\sqrt{\frac{\alpha}{2}}\gamma(x-vt)[\frac{4}{3}k_1u_0 + \frac{\sqrt{2}}{2}k_2\alpha^{1/2}\gamma u_0^2 + \frac{32}{75}k_3\alpha\gamma^2\sigma u_0^3 + \frac{4\sqrt{2}}{21}k_4\alpha^{3/2}\gamma^3u_0^4]$$

因此，存在微扰并考虑了原子间存在3次方到6次方非简谐相互作用时，氢键分子 中扭结-反扭结的解为：

$$u(\xi) = \sigma u_0\tanh\sqrt{\frac{\alpha}{2}}\gamma(x-vt) + \lambda(\frac{2\sqrt{2}}{3}\sigma k_1\alpha^{1/2}\gamma u_0^2 + \frac{1}{2}\sigma k_2\alpha\gamma^2u_0^3 + \frac{16\sqrt{2}}{75}k_3\alpha^{3/2}\gamma^3u_0^4 + \frac{4}{21}\sigma k_4\alpha^2\gamma^4u_0^5)\mathrm{sech}^2\sqrt{\frac{\alpha}{2}}\gamma(x-vt) \tag{18}$$

显然，当 $\lambda=0$ 时，上式回到无微扰时的扭结解. 上式中的第二项起源于原子间存在非简谐相互作用对扭结孤子波形的修正；由于 λ 项中，有的项出现 σ 因子，有的项则不出现，表明扭结的剖面比起反扭结的剖面更陡峭一些，也就是说扭结变得比反扭结更窄，表明扭结与反扭结的对称性在非简谐性下被破坏.

4 非简谐相互作用下扭结-反扭结孤子的能量

考虑非简谐相互作用势的影响，相应的 Hamiltonian 由(1)式改写为下面的形式：

$$H=\frac{1}{l}\int_{-\infty}^{\infty}[\frac{1}{2}mu_t^2+\frac{1}{2}mc_0^2u_x^2+\lambda mc_0^2\rho(u_x)+V(u)]\mathrm{d}x \tag{19}$$

由(7)式有 $u_x=u_\xi, u_t=u_\xi(-v)$ 代入上式得

$$\begin{aligned}E&=\frac{1}{l}\int_{-\infty}^{\infty}[\frac{1}{2}m(v^2+c_0^2)u_\xi^2+\lambda mc_0^2\rho(u_\xi)+V(u)]\mathrm{d}\xi\\&\approx\frac{1}{l}\int_{-\infty}^{\infty}[\frac{1}{2}m(v^2+c_0^2)u'^2(0)\\&\quad+\lambda mc_0^2(k_1u'^3(0)+k_2u'^4(0)+k_3u'^5(0)+k_4u'^6(0))+V(u)]\mathrm{d}\xi\end{aligned}$$

其中

$$\int_{-\infty}^{\infty}u'^5(0)\mathrm{d}\xi=\int_{-\infty}^{\infty}(\frac{\alpha}{2})^{5/2}\gamma^5\sigma^5u_0^5\mathrm{sech}^{10}\sqrt{\frac{\alpha}{2}}\gamma(x-vt)\mathrm{d}\xi=\frac{64}{315}\alpha^2\sigma\gamma^4u_0^5$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}u'^6(0)\mathrm{d}\xi=\int_{-\infty}^{\infty}(\frac{\alpha}{2})^{6/2}\gamma^6\sigma^6u_0^6\mathrm{sech}^{12}\sqrt{\frac{\alpha}{2}}\gamma(x-vt)\mathrm{d}\xi=\frac{64\sqrt{2}}{693}\alpha^{5/2}\gamma^5u_0^6$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}V(u)\mathrm{d}\xi=\int_{-\infty}^{\infty}\varepsilon_0(1-\frac{u^2}{u_0^2})^2\mathrm{d}\xi=\frac{4\sqrt{2}}{3\gamma}\varepsilon_0\alpha^{-1/2}$$

$$\begin{aligned}E=\frac{1}{l}[&\frac{\sqrt{2}}{3}m(v^2+c_0^2)\alpha^{1/2}\gamma u_0^2+\lambda mc_0^2(\frac{8}{15}\alpha k_1\gamma^2\sigma u_0^3+\frac{8\sqrt{2}}{35}\alpha^{3/2}k_2\gamma^3u_0^4+\\&+\frac{64}{315}\alpha^2k_3\sigma\gamma^4u_0^5+\frac{64\sqrt{2}}{693}\alpha^{5/2}k_4\gamma^5u_0^6)+\frac{4\sqrt{2}}{3\gamma}\varepsilon_0\alpha^{-1/2}]\end{aligned} \tag{20}$$

上式中，当 $\lambda=0$ 时，$E=\frac{1}{l}[\frac{\sqrt{2}}{3}m(v^2+c_0^2)\alpha^{1/2}\gamma u_0^2+\frac{4\sqrt{2}}{3\gamma}\varepsilon_0\alpha^{-1/2}]$. 经计算并整理得：$E=\frac{4}{3}\frac{\sqrt{2m\varepsilon_0}}{lc_0}u_0\gamma c_0^2$，与文献[12]中给出的未考虑非简谐相互作用的扭结孤子能量相一致.

从(20)式可以看出，E 中按 u_0 的奇次幂升幂排列将出现 σ 因子，按 u_0 的偶次幂升幂排列则不出现 σ 因子，表明在非简谐相互作用下扭结孤子能量增加，反扭结孤子能量减小；扭结孤子比反扭结孤子具有更大的能量；反扭结孤子比扭结孤子更易于激发.

5　非简谐相互作用下扭结-反扭结孤子的有效质量

$$\begin{aligned}m_k&=\frac{m}{l}\int_{\infty}^{\infty}\mathrm{d}\xi u_\xi^2|_{\gamma=1}=\frac{m}{l}(\int_{-\infty}^{\infty}u'^2(0)\mathrm{d}\xi-\lambda\int_{-\infty}^{\infty}\Omega\mathrm{d}\xi)\\&=\frac{m}{l}[\int_{-\infty}^{\infty}u'^2(0)\mathrm{d}\xi+\lambda\int_{-\infty}^{\infty}(\frac{2}{3}k_1u'^3(0)+\frac{3}{4}k_2u'^4(0)+\frac{4}{5}k_3u'^5(0)\\&\quad+\frac{5}{6}k_4u'^6(0)\mathrm{d}\xi]\end{aligned}$$

其中

$$\int_{-\infty}^{\infty}u'^5(0)\mathrm{d}\xi|_{\gamma=1}=\frac{64}{315}\alpha^2\sigma u_0^5$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}u'^6(0)\mathrm{d}\xi|_{\gamma=1}=\frac{64\sqrt{2}}{693}\alpha^{5/2}u_0^6$$

$$\therefore \quad m_k = \frac{m}{l}\left(\frac{2\sqrt{2}}{3}\alpha^{1/2}u_0^2 + \frac{16}{45}\lambda k_1\sigma\alpha u_0^3 + \frac{6\sqrt{2}}{35}\lambda k_2\alpha^{3/2}u_0^4 + \frac{256}{1575}\lambda k_3\sigma\alpha^2 u_0^5 + \frac{160\sqrt{2}}{2079}\lambda k_4\alpha^{5/2}u_0^6\right) \tag{21}$$

若仅考虑一级近似，我们还可进一步计算出扭结与反扭结的有效质量之差的关系式：

$$\frac{m_k - m_k^-}{m_0^*} = \frac{8\sqrt{2}}{15}\lambda k_1\alpha^{1/2}u_0 \tag{22}$$

其中 m_k 与 m_k^- 分别为一级近似下正，反扭结孤子的有效质量.

在(21)式中，当 $\lambda=0$ 时，$m_k=\frac{m}{l}\frac{2\sqrt{2}}{3}\alpha^{1/2}u_0^2=m_0^*$，与文献[12]中给出的扭结静止有效质量相一致.

从(21)式可以看出，m_k 中按 u_0 的偶次幂升幂排列不出现 σ 因子，按 u_0 的奇次幂升幂排列出现 σ 因子，表明在非简谐相互作用下，扭结孤子有效质量增加，反扭结孤子有效质量减少；扭结孤子比反扭结孤子具有更大的有效质量.

6 结论

采用微扰方法，研究了氢键分子链中原子间存在非简谐相互作用时，对扭结-反扭结孤子的影响，计及3次方到6次方非简谐势的作用，得到了扭结-反扭结孤子的非对称解. 计算结果表明，非简谐相互作用将使扭结孤子的能量和有效质量增大，使反扭结孤子的能量和有效质量减少. 由于非简谐相互作用的影响，扭结-反扭结孤子的 波形；扭结-反扭结孤子的能量；扭结-反扭结孤子的有效质量都具有非对称特性，与实验观察结果相一致.

致谢 感谢徐济仲教授对本工作的支持和鼓励.

参 考 文 献

[1] Y. Kashimori, T. Kikuchi and K. Nishimoto, J. Chem. Phys., 1982, **77**:1904.
[2] V. Ya. Antonchenko, A. S. Davydov and A. V. Zolotariuk, Phys. Stat. Sol., 1983, **B115**:631.
[3] M. Peyrard, St. Pnevmatikos and N. Flytzanis., Phys. Rev., 1987, **A36**:903.
[4] D. Hochstrasser, H. Büttner, H. Desfontaines *et al.*, Phys. Rev., 1988, **A38**:5332.
[5] A. V. Zolotariuk, K. H. Spatschek and E. W. Laedke, Phys. Lett., 1984, **A101**:517.
[6] J. Z. Xu, Phys. Lett., 1992, **A172**:148.
[7] J. Z. Xu and J. N. Huang, Phys. Phys. Lett., 1995, **A197**:127.
[8] J. Z. Xu, J. Phys. Condens. Matter., 1995, **5**:269.
[9] St. Pnevmatikos., Phys. Rev. Lett., 1988, **60**:1534.
[10] A. S. Davydov., Soliton in molecular systems(second Edition), Dordrecht. Holland: Kluwer Academic publishers, 1991, 17, 95, 96, 318.
[11] St. Pnevmatikos, G. P. Tsironis and A. V. Zolotaryuk, J. Mol. Liq., 1989, **41**:85.
[12] J. Z. Xu, Solid State Commun., 1990, **76**:557.
[13] J. Z. Xu, Phys. Lett., 1996, **A210**:307.

Asymmetric Property of Kink-Antikink Soliton in Hydrogen-Bonded Molecular Chain

Cheng Yuanfa and Cao Wanqiang

(*Department of Physics, Hubei University, Wuhan* 430062)

Received 17 July 1996, revised manuscript received 17 December 1996

Abstract Using the perturbation method, we investigate the influence of the anharmonic interatomic interaction on the kink-antikink soliton in a hydrogen-bonded molecular chain, obtain the asymmetric solutions of the kink-antikink soliton from the cubic to the sixth power of the anharmonicity, calculate the energy and the effective mass of the kink-antikink soliton due to the anharmonicity.

PACC: 0547, 6170