第15卷 第8期　　半　导　体　学　报　　Vol. 15, No. 8
1994年8月　　CHINESE JOURNAL OF SEMICONDUCTORS　　Aug., 1994

在线性型分子晶体中的局域性集体激发特性

庞小峰*
（中国科学院国际材料物理中心　沈阳　110015　西南民族学院物理系　成都　610041）

摘要　本文用一种特殊方法研究了具有非简谐振动的线性链型分子晶体中由结构畸变和局域性涨落导致的局域性集体激发和孤立子运动的特性．研究表明在此时形成的孤立子的能量和振幅与非简谐振动强度有关；并可以超声、次声和声速运动．

PACC: 3176, 7145, 7280L, 3150

象 $(CH_3CONHC_6H_5)_x$ 或 ACN 等这类由有一定间距的众多分子组成的准周期结构的准线性链型分子晶体中的集体激发和孤立子已被研究过[1-7]．研究表明：在体系的过剩电子（或激子）通过同畸变分子链相互作用而"自陷"为孤立子、连同畸变分子区一起运动过一段宏观距离可保持其能量、动量和其它准粒子特性不变的特性．这是一个非常有趣，并有重要实际意义的物理现象．但仅研究过分子作谐振的情况，并导致了孤立子速度 v 趋近于声速 v_0 时，孤立子的能量、动量趋于无穷大、相邻分子间距趋于零的结果．这表明此理论在分子间距小，$v\to v_0$ 时不适用，此情况在晶体具有一定温度时常出现．这表明必须研究分子的非线性振动特性．本文就是解决这个问题的．

1. 分子晶体的集体激发描述和运动方程

根据我们对这类晶体因外界刺激所产生的结构畸变和局域性涨落的特点，考虑到分子链的非线性振动效应下，把描述所产生的集体激发的较好哈密顿函数表示为[5-7]：

$$H = H_{ex} + H_{ph} + H_{int} = \left(\frac{1}{2}\sum_i m\dot{r}_i^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2\sum_i r_i^2 - \frac{1}{2}m\omega_1^2\sum_i r_i r_{i+1}\right)$$
$$+\left(\frac{1}{2}M\sum_i \dot{R}_i + \frac{1}{2}\lambda\sum_i (R_i - R_{i-1})^2 - \frac{1}{3}\lambda_1\sum_i (R_i - R_{i-1})^3\right)$$
$$+\left(\frac{1}{2}m\chi_1\sum_i (R_{i+1} - R_{i-1})r_i^2 + m\chi_2\sum_i (R_{i+1} - R_i)r_i r_{i+1}\right) \qquad (1)$$

其中：m 和 M 是分子内部激发产生的准粒子和一个分子的质量．ω_0 和 ω_1 是振子的动力学矩阵的对角和非对角元，ω_0 是共振 Einstein 频率．r_i 和 $p_i = m\dot{r}_i$ 是振动量子的坐标和共轭动量，R_i 和 $\mathbf{P}_i = M\dot{R}_i$ 是分子的位移算符和共轭动量算符，$2\chi_1 = \dfrac{\partial\omega_0^2}{\partial R_i}$ 和 $2\chi_2 = \dfrac{\partial\omega_1^2}{\partial R_i}$ 是正比于分子振动能和相邻相互作用能在单位伸长后的改变量．若采用二次

*作者是中国高等科学技术中心成员

1992年10月29日收到初稿，1993年2月22日收到修改稿

量子化方法；

$$r_i=\left(\frac{2m\omega_0}{\hbar}\right)^{-\frac{1}{2}}(b_i+b_i^+);\ R_i=\sum_i\left(\frac{\hbar}{2MN\omega_q}\right)^{1/2}(a_q+a_q^+)e^{jir_0q}(j=\sqrt{-1})\qquad(2)$$

其中：$b_i^+(b_i)$ 和 $a_q^+(a_q)$ 分别是激子和声子的产生(消灭算符.N是体系的分子个数，r_0 是分子间距，$\omega_q=2\left(\frac{\lambda}{M}\right)^{1/2}\sin\left(\frac{1}{2}qr_0\right)$是波矢为 q 的声子频率。

代(2)式进入(1)式可得：

$$\begin{aligned}H=&\sum_i\left[\hbar\omega_0\left(b_i^+b_i+\frac{1}{2}\right)-\frac{\hbar\omega_1^2}{4\omega_0}(b_i^+b_{i+1}+b_ib_{i+1}^+)+\sum_q\left(g(q)(b_i^+b_i+b_ib_i^+)\right.\right.\\&\left.\left.+g_1(q)(b_ib_{i+1}^++b_ib_{i+1})\right)(a_q+a_{-q}^+)e^{jir_0q}\right]+\sum_q\hbar\omega_q\left(a_q^+a_q+\frac{1}{2}\right)\\&-\sum_{q_1}\sum_{q_2}F(q_1,q_2)(a_{q_1}+a_{-q_1}^+)(a_{q_2}+a_{-q_2})(a_{(q_1+q_2)}+a_{-(q_1+q_2)})\end{aligned}\qquad(3)$$

其中：$F(q_1q_2)=\frac{1}{3}8j\lambda\left(\frac{\hbar}{2MN}\right)(\omega_{q_1}\omega_{q_2}\omega_{(q_1+q_2)})^{-\frac{1}{2}}\sin\left(\frac{r_0q_1}{2}\right)\sin\left(\frac{r_0q_2}{2}\right)\sin\left(\frac{r_0(q_1+q_2)}{2}\right)$

$$g(q)=\left(\frac{\hbar}{2MN\omega_q}\right)^{1/2}\left(\frac{\hbar\chi_1}{4\omega_0}\right)(e^{jr_0q}-e^{-jr_0q}),\ J=\frac{\hbar\omega_1^2}{4\omega_0},\ \varepsilon_0=\hbar\omega_0,\ s=v/v_0$$

$$g_1(q)=\left(\frac{\hbar}{2MN\omega_q}\right)^{1/2}\left(\frac{\hbar\chi_2}{4\omega_0}\right)(e^{jr_0q}-1)$$

由我们的研究得知在分子晶体中出现的集体激发具有相干特性，应采用我们的相干波函数去描述这种状态[5-7]，即：

$$|\Psi\rangle=|\varphi\rangle\cdot|\alpha_q\rangle=\left(\frac{1}{\lambda^1}\sum_i(1+\varphi_i(t)b_i^+)|0\rangle_{ex}\right)\left(\exp\left\{\sum_q[\alpha_q(t)a_q^+-\alpha_q^*(t)a_q]\right\}|0\rangle_{ph}\right.\qquad(4)$$

这里 $|0\rangle_{ex}$ 和 $|0\rangle_{ph}$ 是激子和声子的基态．利用算符的 Heisenberg 方程和(3)式，可得到运动方程为：

$$j\hbar\dot{\varphi}_i=\hbar\omega_q\varphi_i-J(\varphi_{i+1}+\varphi_{i-1})+\sum_q\{g(q)\varphi_i+g_1(q)(\varphi_{i+1}+\varphi_{i-1})\}(\alpha_{iq}+\alpha_{i-q}^*)e^{jir_0q}\qquad(5)$$

$$\begin{aligned}j\hbar\dot{\alpha}_{iq}=&\hbar\omega_q\alpha_{iq}+\sum_i\left(g(q)|\varphi_i|^2+g_1(q)(\varphi_i^*\varphi_{i+1}+\varphi_i\varphi_{i-1}^*)\right)e^{jir_0q}\\&-\sum_kF(k-q)(\alpha_{ik}+\alpha_{i-k}^*)(\alpha_{i(k-q)}^*+\alpha_{i(q-k)})\end{aligned}\qquad(6)$$

$$\begin{aligned}j\hbar\dot{\alpha}_{i-q}^*=&-\hbar\omega_q\alpha_{i-q}^*-\sum_i\left(g(q)|\varphi_i|^2+g_1(q)(\varphi_i^*\varphi_{i+1}+\varphi_i\varphi_{i-1}^*)\right)e^{-jir_0q}\\&+\sum_kF(k-q)(\alpha_{ik}+\alpha_{i-k}^*)(\alpha_{i(k-q)}^*+\alpha_{i(q-k)})\end{aligned}\qquad(7)$$

考虑 $\langle\alpha_q|R_i(t)|\alpha_q\rangle=\beta_i(t)$和它的傅立叶分量 $\beta_{iq}=\left(\frac{\hbar}{2M\omega_q}\right)^{1/2}\left(\alpha_{iq}(t)+\alpha_{i-q}(t)\right)$之间关

系：$\beta_i(t)=N^{-\frac{1}{2}}\sum_q \beta_{iq}(t)e^{jqx}(x-ir_0)$，从(6)—(7)式得：$\ddot{\beta}_{iq}+\omega_q^2\beta_{iq}=\sum_i\Big(\frac{j\hbar\chi_1}{2MN^{1/2}\omega_0}$
$\times\sin(r_0q)|\varphi_i|^2+\frac{\hbar\chi_2}{2MN^{1/2}\omega_0}(e^{jr_0q}-1)(\varphi_i^*\varphi_{i+1}+\varphi_i\varphi_{i-1}^*)\Big)\cdot e^{-jir_0q}-\frac{j8\lambda_1}{3M}\sin\left(\frac{1}{2}r_0q\right)$
$$\times\sum_i\sin\left(\frac{1}{2}r_0k\right)\sin\left(\frac{1}{2}(q-k)r_0\right)\beta_{ik}\beta_{iq-k} \tag{8}$$

在取 $\omega_q=v_0q$ 和长波近似与连续性近似下，(8)式和(5)式分别变为：

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\beta(x_1t)-v_0^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\beta(x,t)=\frac{\hbar r_0(x_1+x_2)}{2\omega_0M}\frac{\partial}{\partial x}|\varphi(x,t)|^2+\frac{\lambda_1r_0^3}{3M}\frac{\partial}{\partial x}\left|\frac{\partial}{\partial x}\beta(x,t)\right|^2 \tag{9}$$

$$j\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(x,t)=(\varepsilon_0-2J)\varphi(x,t)-Jr_0^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x,t)+\frac{\hbar(\chi_1+\chi_2)r_0}{\omega_0}\frac{\partial\beta(x,t)}{\partial x}\varphi(x,t) \tag{10}$$

(9)—(10) 式就是描述由集体激发所产生的激子与声子的运动方程．如果联合求解便可得到由于激子—声子相互作用导致激子自陷为孤立子解来．

2. 分子晶体中激发的孤立子及其特性

现设(10)式的一般解有[8,9]：$\varphi(x,t)=\phi(x,t)\exp\left\{j\frac{\hbar v}{2Jr_0^2}(x-x_0)-Et/\hbar\right\}$　(11)

将(11)代入(10)式可得：

$$-\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}-\rho' Q\Phi=\varepsilon\phi \tag{12}$$

其中：$Q=-\frac{\partial\beta}{\partial x}$．现设$\zeta=x-vt$，对(9)积两次分后可得：

$$(1-s^2)Q+rQ^2=\sigma|\Phi|^2 \tag{13}$$

这里：$\rho'=\frac{\hbar(\chi_1+\chi_2)}{J\omega_0r_0}$，$\varepsilon=\frac{E-(\varepsilon_0-2J)}{Jr_0^2}-\frac{\hbar v^2}{4J^2}$，$\sigma=\frac{\hbar r_0(\chi_1+\chi_2)}{2\omega_0Mv_0^2}$，$\gamma=\frac{\lambda_1r_0^2}{3Mv_0^2}$，

其中 $\Phi(x,t)$ 满足归一化条件：$\int|\Phi|^2d\zeta=1$　(14)

$$从(13)式得：Q(\Phi)=\frac{(1-s^2)\pm\sqrt{(1-s^2)^2+4\sigma r\Phi^2}}{2r}=\pm\frac{\sqrt{\Phi^2+\mu^2}-\mu}{(r/\sigma)^{1/2}}$$
$$\left(\mu=\frac{1-s^2}{\sqrt{4r\sigma}}\right) \tag{15}$$

当 $\gamma\neq0$ 时，$\mu\to0$ 或 $\mu=0, s=1, v=v_0$ 是有声速孤立子解．$\mu\to\infty$ 时，意味着 $r=0$，相当于分子链作谐振动．当 $s<1$，$v<v_0$ 时，$\mu>0$，则(14)式根号前取“+”号，是次声孤立子解．当 $s>1$，$v_0<v$时，$\mu<0$．相当于 (14) 式根号前取“—”号，即：$Q'(\Phi)=\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{1/2}(-\sqrt{\Phi^2+\mu}+\mu)=-\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{1/2}(\sqrt{\Phi^2+\mu'^2}-\mu')=-Q(\Phi)$

$\left(\mu'=\frac{1}{2}(s^2-1)/\sqrt{r\sigma}=-\mu\right)$，此时有超声孤立子解，它的相对的分子链的相对位移

$Q' = -\frac{\partial \beta}{\partial x}$ 方向刚好与次声孤立子时的相反. 因此在分子链的非简谐振动存在时,晶体中会出现超声、次声和声速孤立子解. 但因超声与次声存在上述关系,我们在下面只需求出次声孤立子解即可.

将(15)式代入(12)式, 并用$\frac{d\Phi}{dx}$乘两边后再积分得:

$$\left(\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}x}\right)^2 = -\varepsilon\Phi^2 + \frac{\rho}{3}[3\Phi^2\mu - 2(\Phi^2 + \mu^2)^{3/2} + 2\mu^3], \tag{16}$$

这里: $\rho = \rho'\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{1/2}$, $\Phi = (\Phi^2 + \mu^2)^{1/2}$, 并利用了自然边界条件.

当 $\mu \geqslant 0$ 时,(15)式与(15)式存在满足自然边界条件, 具有最大值的孤立子解[8,9], 并在孤立子中心 $\zeta = 0$ 处有极大值,即$\left.\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}\zeta}\right|_{\zeta=0} = 0$. 于是从(16)式得到:

$$\varepsilon = \frac{\rho(\Phi_0 - \mu)(2\Phi_0 + \mu)}{3(\Phi_0 + \mu)},\ \Phi_0 = (\Phi_0^2 + \mu^2)^{1/2} \tag{17}$$

将(17)式代入(16)式,再积分可得:

$$\zeta = \pm\left(\frac{2}{2\rho}\right)^{1/2}\int_0^{\Phi_0}\frac{B(\Phi)d\Phi}{(\Phi - \mu)(\Phi_0 - \Phi)^{1/2}},\ \mu < \Phi \leqslant \Phi_0 \tag{18}$$

其中: $B(\Phi) = \Phi\left\{\frac{\Phi_0 + \mu}{[(\Phi\Phi_0 + \mu(\Phi + \Phi_0)](\Phi + \mu)}\right\}^{1/2}$

这里 Φ_0 由归一化条件(14)式决定,现在它可表成:

$$\int_0^{\Phi_0}(\Phi^2 - \mu^2)\mathrm{d}\zeta(\Phi) = \left(\frac{3}{2\rho}\right)^{1/2}\int_0^{\Phi_0}\frac{D(\Phi)(\Phi + \mu)}{(\Phi_0 - \Phi)^{1/2}}d\zeta = \frac{1}{2},(\mu < \Phi < \Phi_0) \tag{19}$$

其中: $D(\Phi) = \left(\frac{(\Phi + \mu)(\Phi_0 + \mu)}{\Phi\Phi_0 + \mu(\Phi + \Phi_0)}\right)^{1/2}$.

于是(17)—(19) 式就是决定此问题解的方程式. 例如当 $\mu = 0$, $s = 1$时, $B = D = 1$, 从(17)式得: $\varepsilon = -\frac{2}{3}\rho\Phi_0$, 从 (19)式得: $\Phi_0(0) = \frac{1}{2}\left(\frac{3}{4}\rho'\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{1/2}\right)^{1/3}$
$= \frac{1}{2}\left(\frac{27\hbar^3(\chi_1 + \chi_2)^3}{32J^2\omega_0^3r_0^2\lambda_1}\right)^{1/6}$.

$$\left.\begin{array}{ll}\text{由(18)式得: } \Phi(\zeta,\ 0) = \Phi_0(0)\mathrm{sech}^2(\nu_0\zeta), & \left(\left(\nu_0 = \frac{1}{2}\left(\frac{\sigma\rho'^2}{6\gamma}\right)^{1/3}\right)\right) \\ \text{从(15)式得: } Q(\zeta,\ 0) = Q_0(0)\mathrm{sech}^2(\nu_0\zeta), & \left(Q_0(0) = \left(\frac{\sigma}{\gamma}\right)^{1/2}\Phi_0(0)\right)\end{array}\right\} \tag{20}$$

现在来求(18)—(19)式的次声 ($v < v_0$)孤立子解. 从(19)式可知: 当μ从零变到无穷大时, $D(\Phi)$从 1 单调地增加到$\frac{2}{\sqrt{3}}$. 注意这一点,再积分(19)式可得:

$$(2\Phi_0 + \mu)(\Phi_0 - \mu)^{1/2} = C(3\rho/8)^{1/2}$$

当μ从零变到无穷大时, C 从 1 单调变到$\frac{\sqrt{3}}{2}$. 注意到这一点,从上式可得:

$$\Phi_0 = \Phi_0(\mu) = \frac{1}{4}(\gamma\sigma)^{-\frac{1}{2}}(\Pi_+ + \Pi_-)$$

其中：$\Pi_\pm = \left\{(1-s^2)^3 + \delta \pm \sqrt{\frac{\delta}{2}(1-s^2)^3 + \delta}\right\}^{1/3}$，$\delta = 3C^2\sigma^2\rho'\gamma$

于是有：$\Phi_0 = \Phi_0(\mu) = \frac{1}{4}(\gamma\sigma)^{-\frac{1}{2}}(\Pi_+ - \Pi_-) = \frac{C}{2}(3\sigma\rho'\omega)^{1/2}$，　　(21)

其中：$\omega = (2(1-s^2)^3 + \delta)\{(1-s^2)^2 + \Pi_+^2 - \Pi_-^2\}^{-2}$. 从(14)式可得：

$$Q_0 = \frac{\sigma\Phi_0^2}{G_0} = \frac{\omega\delta}{4\gamma G_0},\ G_0 = \frac{1}{2}\{(1-s^2) + [(1-s^2)^2 + \omega\delta]^{1/2}\}. \tag{22}$$

另外，当有 $\alpha \leqslant \Phi \leqslant \Phi_0$ 关系时，$B(\Phi)$ 单调从 $\frac{1}{\sqrt{3}}$增加到1. 注意到这一事实，从(18)式得：$\zeta = \pm\left(\frac{3}{2\rho}\right)^{1/2}\frac{1}{\Delta}\int_0^{\Phi_0}\frac{\mathrm{d}\Phi}{(\Phi-\mu)(\Phi_0-\mu)^{1/2}}$，其中 $\Delta=\Delta(\zeta,\Delta)$是 ζ 的对称函数，并单调地从 1 增加到$\sqrt{3}$. 在 $\lim\limits_{\mu\to 0}(\zeta,\mu) = 1$，$\lim\limits_{\mu\to\infty}\Delta(\zeta,\mu) = \sqrt{3}$. 则上式积分得：

$$\Phi(\zeta) = \Phi_0\mathrm{sech}^2(\Delta\nu\zeta) + \mu\tanh^2(\Delta\nu\zeta)$$

则有：$\Phi(\zeta) = \frac{\Phi_0}{\sqrt{G_0}}\mathrm{sech}(\Delta\nu\zeta)\left\{(1-s^2) + \frac{\sigma\gamma}{G_0}\Phi_0^2\mathrm{sech}(\Delta\nu\zeta)\right\}^{1/2}$　　(23)

由(15)式可得：$Q(\zeta) = Q_0\mathrm{sech}^2(\Delta\nu\zeta)\ \left(\nu = \sqrt{\frac{\rho' Q_0}{6}}\right)$　　(24)

(23)—(24)式就是我们求的在非简谐振动存在时分子晶体中激发的次声孤立子解. 它是畸变了的钟型孤立子. 其振幅、位相和速度都与非简谐振系数 γ 或 λ_1 有关. 当 λ_1 增加时，其振幅按 $\lambda_1^{-\frac{1}{2}}$ 关系减少. 由于 $\Delta(\zeta,\mu)$ 和 $C(\mu)$ 与速度有关，当 ν 增加时，孤立子振幅减少，宽度增加，但可证明. 在这种情况下，孤立子仍是十分稳定的.

另外，当 $\gamma\to 0$ 时，上述解与谐振时结果完全一样[5-7]，即：

$$\Phi(\zeta,\infty) = \Phi_0(\infty)\mathrm{sech}(\nu_\infty\zeta),\ Q(\zeta,\infty) = Q_0(\infty)\mathrm{sech}^2(\nu_\infty\zeta) \tag{25}$$

其中：$\Phi_0(\infty) = \frac{\hbar(\chi_1+\chi_2)}{4\omega_0}\left(\frac{1}{\lambda(1-s^2)J}\right)^{1/2}$，$Q_0(\infty) = \frac{\hbar^2(\chi_1+\chi_2)^3 r_0}{32M^2v_0^4(1-s^2)^2\omega_0^3 J}$

上述孤立子的能量和动量可通过下述公式求出[5-9]：

$$E(v) = \int H\mathrm{d}x = \frac{1}{2}mv^2 + Jr_0^2\varepsilon + \frac{1}{2}(1-s^2)Mv_0^2\int Q^2\mathrm{d}\zeta + \frac{1}{2}\gamma M r_0^2\int Q^3\mathrm{d}\zeta$$

$$P(v) = \frac{\hbar}{2ir_0}\int(\varphi^*\varphi_x - \varphi\varphi_x^*)\mathrm{d}x - \frac{M}{r_0}\int\beta_x\beta_t\mathrm{d}x = \left\{m + M\int Q^2\mathrm{d}\zeta\right\}v$$

将(23)—(24)式的解代入上两式，经过运算可得到：

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \left\{1 - \sqrt{\frac{27}{2}}\pi\omega\Gamma\left(1 + s^2 + \frac{8}{15}\gamma Q_0\right)\right\}\left(\frac{2\hbar(\chi_1+\chi_2)r_0}{3\omega_0}Q_0\left(1 - \frac{1-s^2}{4G_0}\right)\right)$$

$$= E_0 + \frac{1}{2}M_{sol}v^2 \tag{26}$$

$$P(v)=\left(m+4y\left(\frac{2}{2p'}\right)^{1/2}Q_0^{3/2}M\right)v \tag{27}$$

这里 $\Gamma=\Gamma(\mu)=cy$ 是单调减少的函数，当 μ 从零变到无穷大时，$y(\mu)$ 单调从 1 减少 $\frac{1}{\sqrt{3}}$ 的函数，$\Gamma(\mu)$ 具有极值：$\Gamma(0)=0,\Gamma(\infty)=\frac{1}{2}$. 其中：$\omega=\omega_0+s^2\omega_1$，$\omega_0=\frac{\delta+2}{(N_0+1)^2}$，$\omega_1=\frac{2(\delta+2)(N_1+1)-3(N_0+1)}{(N_0+1)^3}$，$N=\left(1+\delta+\sqrt{\delta(\delta+2)}\right)^{2/3}+\left(1+\delta-\sqrt{\delta(\delta+2)}\right)^{2/3}$，$N_1=\frac{1+(\delta/(\delta+2))^{1/2}}{(1+\delta+(\delta(\delta+2)^{1/2})^{1/3}}+\frac{1-(\delta/(\delta+2))^{1/2}}{(1+\delta-(\delta(\delta+2)^{1/2})^{1/3}}$，$E_0=-c^2\sigma^2\rho^1(1-T_1)\left(1-\frac{1}{2}F\right)F\omega_0mv_0^2$，$F=(1+(1+\delta\omega_0)^{-\frac{1}{2}})^{-1}$，$T_1=\sqrt{\frac{27}{2}}\cdot(1+\frac{8}{15}F\delta\omega_0)\pi\Delta\omega_0$，$T_3=\omega_0+\omega_1+\frac{1}{2}\left(\omega_0+\omega_1\sqrt{1+\delta\omega_0}\right)$ $T_2=\sqrt{\frac{27}{2}}\pi\omega_0^2\left(1+\frac{8}{15}F\delta\frac{\omega_0+\omega_1+1/2F\delta\omega_0\omega_1}{(1+\delta\omega_0)^{1/2}}\right)$.

当 $\gamma\to 0(\mu\to\infty)$ 时，代入(25)式的次声孤立子解后可得：

$$E(\infty)=\frac{1}{2}mv^2-\frac{1-5s^2}{6(1-s^2)}\sigma Q_0(\infty),\quad P(\infty)=\left(m+\frac{4}{3}\left(\frac{2}{\rho'}\right)^{1/2}Q_0^{3/2}(\infty)\right)v$$

可见在 $v\to v_0$，$s\to 1$时，其孤立子的能量与动量都趋于无穷大，这就是开始所提的谐振时的无穷大困难[5-7]. 但在 $\gamma\neq 0$ 的非简谐振动下，(26)—(27)式的孤立子能量与动量绝不会为无穷大. 而在 $v=v_0$ 时，它们变为：

$$P(0)=\left(m+4\left(\frac{2}{3\rho'}\right)^{1/2}Q_0^{3/2}M\right)v_0=mv_0+\frac{\sigma}{\gamma}Mv_0\neq\infty,$$

$$E(0)=-\frac{\hbar(\chi_1+\chi_2)^2}{2\omega_0^2}\left(\frac{r_0}{3J\lambda_1^2}\right)^{1/3}+\left[\frac{3\hbar(\chi_1+\chi_2)}{2\omega_0\lambda_1}+\left(\frac{27}{16}\right)^{1/3}\frac{\hbar^2(\chi_1+\chi_2)^2}{\omega_0^2}(Jr_0^2)^{-\frac{1}{3}}\cdot\left(\frac{\pi}{\lambda_1}\right)^{5/3}\right]\frac{\hbar r_0(\chi_1+\chi_2)}{2\omega_0\sigma}\neq\infty$$

从而真正消除了无穷大的困难. 这就是本文的目的. 可见研究非线性振动的重要意义. 另外，从(26)式可知孤立子的部分动能 $\frac{1}{2}mv^2$ 低于第二项大约 3—4 个数量级，因此一般情况下可不计及它. 此时所出现的孤立子的能量低于激子能量 $Jr_0^2\varepsilon$ 大约 $\sqrt{\frac{27}{2}}\pi\omega\Gamma\left(1+s^2+\frac{8}{15}\gamma Q_0\right)$. 这表明孤立子是一个最稳定状态.

参　考　文　献

[1] A.S. Davydov, Phys. Scr., 1979, **20**: 387; Phys. Stat. Sol.(b), 1980, **102**: 275.
[2] G. Careri, *et al.*, Phys. Rev., 1984, **B30**: 4689.
[3] A.C. S Cott, *et al.*, Phys. Rev., 1985, **B32**: 5551.
[4] Y.S. Kikivshar, Phys. Rev., 1991, **A43**: 3117.

[5] 庞小峰，原子与分子物理学报，1987，4(1)：383；1990，7(1)：1437；半导体学报，1987，8：175.
[6] 庞小峰，四川大学学报(自然科学版)，1993，30(1)：50；半导体杂志，1993，18(2)：1；物理学报，1993，42(11)：2376.
[7] Pang Xiaofeng, J. Phys. Condensed matter, 1990, 2:9541; Proc. 6th ICPM (Shenyang) 1992, 26.
[8] 郭柏灵，庞小峰，《孤立子》，北京：科学出版社，1987，31—175.
[9] Pang Xiaofeng, J. Low. Temp. Phys., 1985, 58: 334.

Properties of Localized Excitation in Linear Molecular Crystals

Pang Xiaofeng

(*International Centre for Material Physics, the Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110015 and Dept. of Phys. Southwest Institute for Nationalities, Chengdu 610041*)

Abstract The properties of localized collective excitation and solitonic motion resulted from the deformation of structure and the localized fluctuation in the linear molecular crystals with anharmonic vibration have been studied by an especial method. The results obtained show that the energy and the amplitude of solitons depend on the strength of anharmonicity and the speod of solitons.And, the solitons move in supersonic, sonic and subsonic velocities in the crystals.

PACC: 3170, 7145, 7280, 3150.

Received 29 October 1992, revised manuscript received 22 February 1993