文章编号:1007－2985(2012)02－0050－05

在准 1 维分子晶格模型中的量子孤波*

邓翊群,李德俊
(吉首大学物理科学与机电工程学院,湖南 吉首 416000)

摘 要:通过使用数态方法和准离散多标度方法,研究了准 1 维分子晶格模型中的量子孤波解,表明在这种模型中,不仅存在运动的量子孤波,也存在静态的量子孤波(即量子内禀局域模).利用所获得的量子孤波解,进一步研究了量子孤波的能级,得知量子孤波的能量是量子化的,这种非线性的量子化特性,可能导致在这种材料中观察到像量子化的热输运等奇妙的量子化现象.

关键词:准 1 维分子晶格;量子孤波;能级
中图分类号:O455;O551　　**文献标志码:**A　　**DOI:**10.3969/j.issn.1007－2985.2012.02.012

近几年来,在低维晶格体系中热传导的研究,无论在实验上还是在理论上都取得了令人瞩目的成就.在实验上,人们发现在一些低维晶格体系中,Fourie 热传导定律不满足,存在反常热传导现象[1].特别令人高兴的是,在 2006 年,张之威等[2]在实验室制备出了第 1 个准 1 维固态热二极管或称为热整流器,这种奇妙的装置具有不对称的热输运性质,这些性质为设计制作颇具应用前景的低维热器件开辟了一个新领域,在全世界掀起了对热流控制器件的研究高潮[3-10].如何从理论上理解这些低维热器件中的热输运现象,目前已成为人们倾心探索的热门课题.在 1967 年,Rider 等就严格求解了 1 维简谐晶格中的热传导,表明在简谐晶格中没有温度梯度形成,Fourie 热传导定律被违背.人们对这些异常热传导的微观动力学起源进行了广泛的研究,取得了不少重要的成果[11-14].目前对这些现象的理解还不是很充分,但可以肯定的是,要正确理解这些奇妙的热现象,原子之间的非线性相互作用以及孤波等非线性激发将起着重要的作用.因此,研究准 1 维分子晶格模型中的孤波激发,将具有重要的学术和应用价值.1988 年,A. J. Sievers 等[15]利用格林函数方法,首次研究了具有 4 次方非谐性的 1 维离散晶格链的非线性性质,提出了内禀局域模(也就是静态孤波)的思想.这一新思想的提出,为解释一些固体材料异常的低温比热性质提供了一条可能的途径.后来,黄国翔等[16]利用多标度方法和级数展开方法,研究了具有立方和 4 次方非谐性的 1 维离散晶格链中的孤波,发现这种离散非线性晶格链中不仅存在着运动的孤波,在一定条件下,即在布里渊区边界,也存在着静态的孤波(即内禀局域模).这一发现具有重要的意义,它不仅为理解各种凝聚态物质和生物体系中能量的输运机理提供了重要的新思想,而且为理解固体材料中的热输运性质、温差的形成原因开辟了一条重要的途径.

笔者研究了准 1 维分子晶格模型中的量子孤波及其特性.首先,将从准 1 维分子晶格的非线性哈密顿量出发,引进局域声子产生和湮灭算符,得到了量子化的非线性哈密顿量;其次,通过数态空间的量子波函数,利用 Hartree 近似和变分原理,得到单声子波函数所满足的非线性运动方程;最后,采用多标度方法得到单声子波函数所满足的 1 维非线性薛定谔方程,从而得到量子孤波解,并求得量子孤波的量子能级.

* **收稿日期:**2011－02－19
基金项目:湖南省教育厅科学研究项目(10A100)
作者简介:邓翊群(1977－),男,湖南衡阳人,吉首大学物理科学与机电工程学院研究生,主要从事凝聚态物理研究
通讯作者:李德俊(1956－),男,湖南澧县人,吉首大学物理科学与机电工程学院教授,硕士,主要从事凝聚态物理研究.

1　哈密顿量及其量子化

考虑模型是由分子所组成的准 1 维分子晶体,其非线性主要是来自分子的内部,在这种情况下,1 维分子晶格的非线性哈密顿量为[17]

$$\hat{H}=\sum_{n}(\frac{p_{n}^{2}}{2m}+\frac{1}{2}kx_{n}^{2}+k_{3}x_{n}^{3}-k_{4}x_{n}^{4})+\sum_{n<m}D_{nm}x_{n}x_{m}. \tag{1}$$

其中:m 是分子的有效质量;k 是弹性常数;k_3 和 k_4 是非线性常数;D_{nm} 是分子间的耦合系数. 为了对(1)式进行量子化,引进局域声子产生和消灭算符如下:

$$x_{n}=(\frac{\hbar}{2\sqrt{km}})^{\frac{1}{2}}(a_{n}^{+}+a_{n}), \tag{2}$$

$$p_{n}=(\frac{\hbar\sqrt{km}}{2})^{\frac{1}{2}}\mathrm{i}(a_{n}^{+}-a_{n}). \tag{3}$$

其中:a_n^+ 表示在格点 n 处产生一个声子;a_n 表示在格点 n 处消灭一个声子. 为了减少复杂性,假定(1)式中的各系数间存在以下关系:$\sum_{n}|D_{nm}|\ll k$,$|k_{3}\bar{x}|\ll k$,$|k_{4}\bar{x}^{2}|\ll k$,其中 $\bar{x}$ 表示坐标 x_n 的方均根值. 将(2),(3)式代入(1)式,在准确到最低级近似的情况下,得到声子数守恒的哈密顿量为

$$\hat{H}_{0}=\sum_{n}E_{0}a_{n}^{+}a_{n}+\sum_{nm}d_{nm}a_{n}^{+}a_{m}-\Gamma\sum_{n}a_{n}^{+}a_{n}^{+}a_{n}a_{n}. \tag{4}$$

文献[17]已经证明,声子数不守恒的项可以忽略. (4)式中的 E_0 为零级声子能量,关联系数 d_{nm} 和声子之间相互作用系数 Γ 可由(1)式中的各系数确定. 笔者将(4)式作为基本模型,第 1 项和第 2 项表示声子的线性相互作用,第 3 项表示声子之间的非线性相互作用.

2　单声子波函数所满足的非线性运动方程

(4)式是声子的二次量子化哈密顿量,声子是玻色子,满足玻色子之间的对易关系,声子数算符 $\hat{N}=\sum_{i}a_{i}^{+}a_{i}$,根据量子理论,声子的量子态函数满足下列含时薛定谔方程:

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\mid\Psi\rangle=\hat{H}\mid\Psi\rangle, \tag{5}$$

其中普朗克常量 $\hbar$ 被假定为 1. 容易证明 $\hat{H}$ 与粒子数算符 $\hat{N}$ 可对易,因而 $\hat{H}$ 和 $\hat{N}$ 有共同本征函数,声子数是一个守恒量. 在声子数态空间,n 个声子的量子态函数能被展开为

$$\mid\Psi_{n}(t)\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}\sum_{j_1=1}^{f}\sum_{j_2=1}^{f}\cdots\sum_{j_n=1}^{f}\theta_{n}(j_{1},j_{2}\cdots j_{n},t)a_{j_1}^{+}a_{j_2}^{+}\cdots a_{j_n}^{+}\mid 0\rangle. \tag{6}$$

其中:$|0\rangle=|0\rangle_1|0\rangle_2\cdots|0\rangle_f$ 为真空态;$\theta_n(j_1,j_2\cdots j_n,t)$ 为数态空间的 n 个声子的波函数,满足归一化条件 $\sum_{j_1=1}^{f}\sum_{j_2=1}^{f}\cdots\sum_{j_n=1}^{f}|\theta_{n}(j_{1},j_{2}\cdots j_{n},t)|^{2}=1$.

利用(4)至(6)式,并注意到玻色子算符的对易关系 $[a_i,a_j^+]=\delta_{ij}$,经过推导,n 个声子的波函数 $\theta_n(j_1,j_2\cdots j_n,t)$ 满足下列的薛定谔方程:

$$(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}-nE_{0})\theta_{n}(j_{1}\cdots j_{n},t)=\sum_{n_1=1}^{N}nd(j_{1}n_{1})\theta_{n}(n_{1}j_{2}\cdots j_{n},t)-\Gamma\sum_{k=1}^{n}\sum_{\theta\neq k}\delta_{j_k,j_l}\theta_{n}(j_{1},\cdots j_{k},\cdots j_{\theta}\cdots j_{n},t).$$

在 Hartree 近似下,n 个玻色子的量子玻函数 $\theta_n(j_1\cdots j_n,t)$ 可表示为单个玻色子波函数的直积,即

$$\theta_{n}(j_{1}\cdots j_{n},t)=\prod_{k=1}^{n}\Phi_{n,j_k},\ \sum_{j_k=1}^{N}|\Phi_{n,j_k}|^{2}=1.$$

利用(9)和(10)式,并借助于变分方法,单个玻色子波函数 Φ_{n,j_k} 满足方程

$$\mathrm{i}\frac{\partial\Phi_{j}}{\partial t}-E_{0}\Phi_{j}=\sum_{n=1}^{N}d(jn)\Phi_{n}-\Gamma(n-1)|\Phi_{j}|^{2}\Phi_{j}. \tag{7}$$

在上述方程中,为方便起见,忽略了下标 n,将 Φ_{n,j_k} 写作 Φ_j. 为处理简单起见,只考虑最近邻分子之间

的相互关联,并且认为 $d(nj+1)=d(nj-1)=d$,这样,(7) 式为

$$\mathrm{i}\frac{\partial \Phi_j}{\partial t}-E_0\Phi_j-d(\Phi_{j+1}+\Phi_{j+1})+\Gamma(n-1)|\Phi_j|^2\Phi_j=0. \tag{8}$$

3 量子孤波解

为了求出(8) 式的近似解,利用一种简化的准离散多标度方法[18-21]. 由于单声子波函数 $\Phi_{n,j}$ 满足归一化条件,即 $\sum_{j=1}^{f}\Phi_{n,j}=1$,因此不难看出,当自由度 f 足够大时,$\Phi_{n,j}$ 是一个一级小量,因而可以做下列的标度变换:

$$\Phi_j=\varepsilon\psi_j, \tag{9}$$

其中 ε 是一个一级小量. 将(9) 式代入(8) 式,则

$$\mathrm{i}\frac{\partial \psi_j}{\partial t}-E_0\psi_j-d(\psi_{j+1}+\psi_{j+1})+\varepsilon^2\Gamma(n-1)|\psi_j|^2\psi_j=0. \tag{10}$$

现在来寻找(10) 式的包络孤子解. 一般来讲,包络孤子的包络是时间和空间的慢变函数,而载波是时间和空间的快变函数,因此引进下列多标度变量:$t_1=\varepsilon t$,$t_2=\varepsilon^2 t$,$\xi_j=\varepsilon ja$.

(10) 式的包络孤子解被假定为 $\psi_j=\alpha_j(t_1,t_2,\xi_j)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kja-\omega t)}$. 其中:$k$ 和 ω 分别是快变载波的波数和频率;$\alpha_j(t_1,t_2,\xi_j)$ 是包络孤子的包络函数,且是时间和空间的缓变函数;a 是晶格常数. 利用以上各式可得到以下方程:

$$\frac{\mathrm{d}\psi_j}{\mathrm{d}t}=(-i\omega\alpha_j+\varepsilon\frac{\partial\alpha_j}{\partial t_1}+\varepsilon^2\frac{\partial\alpha_j}{\partial t_2})\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kja-\omega t)}, \tag{11}$$

$$\psi_{j+1}=(\alpha_j+a\frac{\partial\alpha_j}{\partial x}+\frac{1}{2}a^2\frac{\partial^2\alpha_j}{\partial x^2}+\cdots)\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kja-\omega t)}, \tag{12}$$

$$\psi_{j-1}=(\alpha_j-a\frac{\partial\alpha_j}{\partial x}+\frac{1}{2}a^2\frac{\partial^2\alpha_j}{\partial x^2}+\cdots)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kja-\omega t)}. \tag{13}$$

将(11) 至(13) 式代入(10) 式,合并 ε 的同幂项,则有

$$(\omega-\omega_0-2d\cos ka)\alpha_j+\varepsilon(\mathrm{i}\frac{\partial\alpha_j}{\partial t_1}-\mathrm{i}2da\cdot\sin ka\cdot\frac{\partial\alpha_j}{\partial\xi_j})+\varepsilon^2(\mathrm{i}\frac{\partial\alpha_j}{\partial t_2}-$$
$$da^2\cdot\cos ka\cdot\frac{\partial^2\alpha_j}{\partial\xi_j^2}+(n-1)\Gamma\cdot|\alpha_j|^2\alpha_j)+0(\varepsilon^3)=0.$$

令 ε 的同幂项的系数为 0,则有

$$\omega=E_0+2d\cdot\cos ka, \tag{14}$$

$$\frac{\partial\alpha_j}{\partial t_1}-2da\cdot\sin ka\cdot\frac{\partial\alpha_j}{\partial\xi_j}=0, \tag{15}$$

$$\mathrm{i}\frac{\partial\alpha_j}{\partial t_2}-da^2\cdot\cos ka\cdot\frac{\partial^2\alpha j}{\partial\xi_j^2}+(n-1)\Gamma|\alpha_j|^2\alpha_j=0. \tag{16}$$

(14) 式是简谐载波的色散关系. 从(15) 和(16) 式可看出,包络函数 α_j 只是 t_2 和 z 的函数,若令 $\alpha_j=\alpha_j(t_2,z)$,这里 $z=\xi_j+2dat_1\cdot\sin ka$,在这种情形下,则有

$$\frac{\partial\alpha_j}{\partial t_1}=\frac{\partial\alpha_j}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial t_1}=2da\cdot\sin ka\cdot\frac{\partial\alpha_j}{\partial z},$$
$$\frac{\partial\alpha_j}{\partial\xi_j}=\frac{\partial\alpha_j}{\partial z}. \tag{17}$$

应用以上关系,可将(16) 式写为

$$\mathrm{i}\frac{\partial\alpha_j}{\partial t_2}-da^2\cdot\cos ka\cdot\frac{\partial^2\alpha_j}{\partial z^2}+(n-1)\Gamma|\alpha_j|^2\alpha_j=0.$$

令 $\alpha_j=\frac{u}{\varepsilon}$,$z_j=\frac{z}{\varepsilon}=ja+2dat\cdot\sin ka$,则(17) 式为

$$\mathrm{i}\frac{\partial u}{\partial t}+P\frac{\partial^2 u}{\partial z_j^2}+Q|u|^2u=0, \tag{18}$$

其中 $P=-da^2\cdot\cos ka$；$Q=(n-1)\Gamma$.(18) 式是非线性薛定谔方程，可由逆散射方法求解，它的单孤子解为

$$u=\left(\frac{2P}{Q}\right)^{\frac{1}{2}}\kappa_0\cdot\sec h\{\kappa_0[(j-j_0)a-v_g t]\}\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}\kappa_0^2Pt-\mathrm{i}\varphi_0}.$$

最终得到单声子的 Hartree 近似波函数为

$$\Phi_j=\left(\frac{2P}{Q}\right)^{\frac{1}{2}}\kappa_0\cdot\sec h\{\kappa_0[(j-j_0)a-v_g t]\}\cdot\mathrm{e}^{-(\omega-\kappa_0^2P)t-\mathrm{i}\varphi_0}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kja}. \tag{19}$$

其中：$v_g=-2da\cdot\sin ka=\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}$ 为包络孤子的群速度；κ_0 和 φ_0 为积分常数；j_0 为一个任意的整数.(19) 式代表了一个单声子波函数的包络孤子解，这个包络孤子以群速度 v_g 在准 1 维分子晶体中传播[22]. 但在布里渊区边界，即在 $k=\pm\frac{\pi}{a}$，$v_g=\left.\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right|_{k=\pm\frac{\pi}{a}}=0$，这时，运动的量子孤波成为静态的量子孤波，即量子内禀局域模. 根据所求得的量子孤波解，n 个声子的 Hartree 近似波函数为

$$|\psi_n(t)\rangle^H=\frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\sum_{j=1}^{f}\Phi_{n,j}(t)a_j^+\right)^n|0\rangle, \tag{20}$$

这样，量子孤波所具有的能量为

$$E_n={}^H\langle\psi_n(t)|\hat{H}|\psi_n(t)\rangle^H={}^H\langle\psi_n(t)|\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}|\psi_n(t)\rangle^H. \tag{21}$$

应用(19) 至(21) 式，可求得 $E_n=n(\omega-\kappa_0^2P)^H\langle\psi_n(t)|\psi_n(t)\rangle^H=n(\omega-\kappa_0^2P)$.

通过 $\Phi_{n,j}$ 满足的归一化条件，很容易求得 $\kappa_0=\frac{Qa}{4P}$，这样得到量子孤波的能级为

$$E_n=n\left\{E_0+2d\cdot\cos ka+\frac{(n-1)^2\Gamma^2}{16d\cos ka}\right\}, \tag{22}$$

其中 n 表示声子数.(22) 式代表量子孤波的量子能级，描绘了量子孤波的量子特征，这种量子特性很容易从实验上加以检测.

4　结语

在准 1 维晶格体系中量子孤波的研究，是学术界倾心探索的问题，尽管人们做了不少工作，这些工作很有启发意义，但还没有达到令人十分满意的程度，特别是怎样根据量子孤波的特性来合理地解释准 1 维体系中的反常热传导、热整流、热放大等奇妙的热现象，还未见到有文献报道. 在准 1 维分子晶格体系中的热传导与这种体系中的非线性孤波激发将有密切的联系，因此，研究准 1 维体系中的量子孤波，将具有十分重要的学术意义和重要的应用价值.

根据分析结果可知，量子孤波能够在这种准 1 维分子晶格中存在，而且能量是量子化的，这些结果为解释准 1 维分子晶格中存在的奇妙的物理现象具有一定的指导作用. 例如，如何根据量子孤波的量子特性，对已经观察到的准 1 维材料中的异常热传导、热整流给出理论解释，将是一件很有意义的工作，也是人们今后要探索的重要课题.

参考文献：

[1] CHANG C W，OKAWA D，GARCIA H，et. al. Breakdown of Fourier'S Law in Nanotube Thermal Conductors [J]. Phys. Rev. Lett.，2008，101：075 903 - 075 906.

[2] CHANG C W，OKAWA D，MAJUMDAR A，et al. Solid-State Thermal Rectifier [J]. Science，2006，314：1 121 - 1 224.

[3] WANG Lei，LI Bao-wen，CASATI G. Negative Differential Thermal Resistance and Thermal Transistor [J]. Appl. Phys. Lett.，2006，88：143 501 - 143 503.

[4] YANG Nuo,LI Nian-bei,WANG Lei,et al. Thermal Rectification and Negative Differential Thermal Resistance in Lattices with Mass Gradient [J]. Phys. Rev. ,2007,B76:020 301 - 020 304.

[5] HE D H,BUYUKDAGLI S,HU B. Origin of Negative Differential Thermal Resistance in a Chain of Two Weakly Coupled Nonlinear Lattices [J]. Phys. Rev. ,2009,B80:104 302 - 104 307.

[6] SHAO Zhi-guo,YANG Lei,CHAN H K,et al. Transition from the Exhibition to the Nonexhibition of Negative Differential Thermal Resistance in the Two-Segment Frenkel-Kontorova Model [J]. Phys. Rev. E,2009,79:061 119 - 061 123.

[7] FAN C Z,GAO Y,HUANG J P. Shaped Graded Materials with an Apparent Negative Thermal Conductivity [J]. Appl. Phys. Lett. ,2008,92(3):251 907 - 251 909.

[8] WANG Lei,LI Bao-wen. Thermal Logic Gates:Computation with Phonons [J]. Phys. Rev. Lett. ,2007,99:177 208 - 177 211.

[9] WANG Lei,LI Bao-wen. Phononics Gets Hot [J]. Physics World,2008,27(3):27 - 29.

[10] WANG Lei,LI Bao-wen. Thermal Memory:A Storage of Phononic Information [J]. Phys. Rev. Lett. ,2008,101:267 203 - 267 206.

[11] DHAR D. Heat Conduction in the Disordered Harmonic Chain Revisited [J]. Phys. Rev. Lett. ,2001,86:5 882 - 5 885.

[12] GAUL C,BÜTTNER H. Quantum Mechanical Heat Transport in Disordered Harmonic Chains [J]. Phys. Rev. E,2007,76(12):011 111 - 011 112.

[13] LEPRI S,LIVI R,POLITI A. Heat Conduction in Chains of Nonlinear Oscillators [J]. Phys. Rev. Lett. ,1997,78:1 896 - 1 899.

[14] HU B B,LI Bao-wen,ZHAO Hong. Heat Conduction in One-Dimensional Nonintegrable Systems [J]. Phys. Rev. E,2000,61:3 828 - 3 831.

[15] SIEVERS A J,TAKENO S. Intrinsic Localized Modes in Anharmonic Crystals [J]. Phys. Rev. Lett. ,1988,61:970 - 973.

[16] HUANG Guo-xiong,SHI Zhu-pei,XU Zai-xin. Asymmetric Intrinsic Localized Modes in a Homogeneous Lattice with Cubic and Quartic Anharmonicity [J]. Phys. Rev. B,1993,47:4 561 - 4 564.

[17] KIMBALL J C,FONG C Y. Anharmonicity,Phonon Localization,Two-Phonon Bound States,and Xibrational Spectra [J]. Phys. Rev. B,1981,23:4 946 - 4 958.

[18] LI De-jun,MI Xiao-yun,DENG Ke,et al. Solitons and Intrinsic Localized Modes in a One-Dimensional Antiferromagnetic Chain [J]. Chin. Phys. ,2006,15:39 - 44.

[19] LI De-jun,MI Xiao-yun,DENG Ke. Quantum Solitons and Localized Modes in a One-Dimensional Lattice Chain with Nonlinear Substrate Potential [J]. Commun. Theor. Phys. ,2006,45:869 - 872.

[20] LI Dejun,WANG Xiao-yun,MI Xian-wu,et al. Quantum Solitary Wave Solutions in a Ferromagnetic Chain with Nearest-and Next-Nearest-Neighbor Interaction [J]. Commun. Theor. Phys. ,2008,50:1 177 - 1 180.

[21] LI De-jun,MI Xiao-wu,PENG Jin-zhang,et al. Quantum Solitons and Intrinsic Localized Modes in a One-Dimensional Ferromagnetic Chain with on-Site Anisotropy [J]. Journal of Atomic and Molecular Physics,2007,24:1 233 - 1 238.

[22] LI De-jun,YANG Hong,DENG Yi-qun,et al. Influences of the Nonlinear Substrate Potential on Kinetic Properties of the Solitary Wave in a Discrete Nonlinear Lattice [J]. Journal of Atomic and Molecular Physics,2011,28:527.

Quantum Solitary Wave in a Quasi-One-Dimensional Molecular Crystal Model

DENG Yi-qun,LI De-jun

(College of Physics and Mechatronic & Electrical Engineering,Jishou University,Jishou 416000,Hunan China)

Abstract:By using the number state method and the simplified method of quasidiscreteness multiple scales,the authors have studied quantum solitary wave solutions in a quasi-one-dimensional molecular crystal model. In this model,there are both traveling and stationary quantum solitary waves. With the help of the obtained quantum solitary wave solution,the energy levels of the quantum solitary wave have been investigated further. It is shown that the energy of the quantum solitary wave is of quantization,which makes it possible to observe quantum thermal conduction in the material.

Key words:quasi-one-dimensional molecular crystal model;quantum solitary wave;energy level

(责任编辑 陈炳权)