第 35卷 第 5期
1996年 9月

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

Vol. 35 No. 5
Sep. 1996

一维环 Aharonov-Bohm势对极化子的影响*

方奕忠 周义昌 何广平
(中山大学物理学系,广州 510275)

摘 要 讨论 Aharonov-Bohm势对极化子的影响,证明了虽然有势无场,对电子不产生直接的动力学作用,但磁通仍然影响极化子的峰高、宽度、迁移速度和晶格形变能.

关键词 Aharonov-Bohm势,极化子,光学振动模
分类号 O 413

Aharonov和 Bohm(AB)提出,即使在粒子运动区域磁场为 0,没有磁场对带电粒子产生直接的罗伦兹作用,但只要矢势不为 0,仍然存在对带电粒子运动的可观察的作用后果.人们现在广义地通称这种有势无场的非动力学作用为 AB效应.研究 AB效应在各个领域的表现,是当前吸引人们的一个课题[1-3].

晶格的纵光学振动造成元胞内正负电荷相对位移,导致电极化场,对电子形成长程库仑作用.电子与其周围极化场作用而形成极化子.本文将讨论 AB势(或 AB磁通)对光学极化子的影响,证明在 AB磁通不大时,极化子仍然采取双曲正割的孤立波形式,但峰高和宽度,有效质量,束缚能,晶格形变能等,均受到 AB磁通的影响.

1 模型和基本方程

考虑 N 个元胞等距 a 排列,组成一维链.每个元胞为双原子分子.本文仅考虑光学振动模,因而只考虑元胞内原子之间的相对振动 u_l 的变化(l表示元胞),而不考虑元胞质心 R_l 的变化,$R_l = la\,(l=1,\cdots,N)$.让此一维链首尾连接成周长为 $L=Na$ 的环,环中心贯穿磁通 Φ,但环上的磁场为 0,环上电子不受到罗伦兹力的动力学作用.环上存在 AB矢势 $\vec{A}=(\Phi/Na)\vec{e}_\theta$ ($\vec{e}_\theta$ 为极坐标角 θ 增大方向的单位矢量).对于环上的电子,下面将采用 $x=(\theta/2\pi)Na$ 为位置变数.环上单个电子与晶格光学振动耦合的哈密顿量为[2]

$$H=\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+\frac{eA}{c}\right)^2+\sum_{l=1}^{N}U(x-R_l,u_l)+H_{ph}\qquad H_{ph}=\sum_{n=1}^{N}\left(\frac{1}{2M}\frac{\partial^2}{\partial u_n^2}+\frac{1}{2}k_0^2u_n^2\right)\tag{1}$$

这里,M表示分子质心的折合质量,k_0表示爱恩斯坦频率,纵光学振动的色散已经近似略去,$U(x-R_l,U_l)$表示第 l 个分子对电子的作用势.(1)式与传统的极化子哈密顿量[2]的差别在于:第一项的括号内出现矢势 A,给出电磁矢势对电子的作用.

首先讨论 AB磁通存在时的分子轨道 $\Phi(x-R_l,u_l)$,满足薛定谔方程

* 收稿日期: 1995-11-13 方奕忠,男,27岁,硕士研究生

$$[\frac{1}{2m}(-i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+\frac{eA}{c})^2+U(x-R_l,u_l)]\varphi(x-R_l,u_l)=\varepsilon(u_l)\varphi(x-R_l,u_l) \qquad (2)$$

若 $\vec{A}=0$时的近似正交归一的分子轨道波函数为 $\varphi_0(x-R_l,u_l)$,则容易证明,(2)式的解为

$$\varphi(x-R_l,u_l)=\varphi_0(x-R_l,u_l)\exp[-(ieA/\hbar c)(x-R_l)] \qquad (3)$$

从 $\vec{A}=0$到 $\vec{A}\neq 0$.分子轨道的能量不改变,仍为 $\varepsilon(u_l)$.分子轨道上的电子能量依赖于振动位移 u_l,$\varphi(x-R_l,u_l)$及 $\varphi_0(x-R_l,u_l)$是高度局域化的,它们仅在 R_l邻近才不为 0[4].

下面讨论(1)式决定的薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t,\vec{u})=H\psi(x,t,\vec{u}) \qquad (4)$$

其中 $\vec{u}\equiv\{u_1,u_2,\cdots u_N\}$表示 N 个元胞的振动位形.波函数 $\psi(x,t,\vec{u})$是分子轨道 $\varphi(x-R_l,u_l)$的线性组合

$$\psi(x,t,\{u_i\})=\sum_{l=1}^{N}A_l(t,\vec{u})\varphi(x-R_l,u_l)=\sum_l A_l(t,\vec{u})\varphi_0(x-R_l,u_l)\exp[-(ieA/\hbar c)(x-R_l)] \qquad (5)$$

$A_l(t,\{u_i\})$ 表示取分子轨道 $\varphi(x-R_l,u_l)$ 的几率幅，亦即电子在第 l个元胞附近的几率幅．将 (5) 式代表 (4) 式，并作近邻近似，可得

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}A_l(t,\vec{u})=[\varepsilon(u_l)+H_{ph}]A_l(t,\vec{u})-J[e^{i\theta}A_{l+1}+e^{-i\theta}A_{l-1}] \qquad (6)$$

其中 $J\equiv\int\varphi_0^*(x-R_l,u_l)\sum_{l'\neq l}U(x-R_{l_1},u_{l_1})\varphi_0(x-R_{l\pm1},u_{l\pm1})\mathrm{d}x$ 为最近邻跳跃积分,已经略去对振动 u_l的依赖.由于 AB势对电子的作用,致使电子在跳跃一个元胞距离上,获得 $\theta=2\pi\Phi/N\Phi_0$ 的相移，这里的 $\Phi_0\equiv hc/e$为 AB磁通量子．类似 Holstein[2]，在 (2) 式及 (6) 式,分子轨道的电子能量对于振动位移 u_l 的依赖取线性近似 $\varepsilon(u_l)=\varepsilon_0-Gu_l$ (G为比例常数)．并考虑原子质量极大于电子质量，作绝热近似，略去晶格振动的动能项．则 (6) 式简化为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}A_l(t,\vec{u})=-Gu_l+\frac{1}{2}\sum_n M\omega_0^2u_n^2A_l(t,\vec{u})-J(e^{i\theta}A_{l+1}+e^{-i\theta}A_{l-1}) \qquad (7)$$

(7) 式是决定极化子形状的基本方程,若 $\theta=0$, 即磁通 $\Phi=0$, 它将回复到文献 [2] 的方程.

2 连续极限及结果

当几率幅 A_l随 l变化缓慢时，可作连续近似: $A_l(t,\vec{u})=A(x,t,\vec{u})|_{x=la}$, $u_l(t)=u(x,t)|_{x=la}$, $A_{l\pm1}(t,\vec{u})\approx[A(x,t,\vec{u})\pm a\frac{\partial A}{\partial x}+\frac{a^2\partial^2A}{2\partial x^2}]_{x=la}$.于是(7)式近似为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}A(x,t,\vec{u})=(H_{ph}-Gu(x)-2J\cos\theta)A(x,t,\vec{u})-i2aJ\sin\theta\frac{\partial A}{\partial x}-Ja^2\cos\theta\frac{\partial^2A}{\partial x^2} \qquad (8)$$

注意(8)式的偏导是在 $\vec{u}=\{u_1,u_2,\cdots,u_N\}$不变下求导数的.设 $A(x,t,u)$有能量为 E,群速为 v 的波包解:

$$A(x,t,\vec{u})=\varphi(\xi,\vec{u})\exp\{-iE(\vec{u})t/\hbar\},\quad u(x,t)=u(\xi),\quad \xi=x-vt \qquad (9)$$

代入 (8) 式，分开实部和虚部 (设 φ和 u都是实函数)，得到两个方程:

$$E\varphi(\xi)=[H_{ph}-Gu(\xi)-2J\cos\theta]\varphi(\xi)-Ja^2\cos\theta(\mathrm{d}^2\varphi/\mathrm{d}\xi^2) \qquad (10)$$

$$v=2Ja\sin\theta/\hbar \qquad (11)$$

方程 (11) 给出波包的群速度, 由 AB磁通决定. 当磁通为 0时, 回到 Holstein的静止极化子.

对 (10) 式求泛函数商 $\delta E/\delta u(Y) = 0$, 定出

$$u^{(0)}(Y) = G|H^{(0)}(Y)|^2/Mk_0^2 \tag{12}$$

上标 (0) 表示能量极小时 $u(Y)$ 的取值, 下面的运算中, 略去此上标. 将 (12) 式代入 (10) 式, 可得 $H(Y)$ 满足非线性方程

$$(d^2H/dY^2) + 2VH^3 = \_^2 H \tag{13}$$

其中, $V = G^2/(2Mk_0^2 Ja^2\cos W)$, 由磁通和材料的参数决定, 而

$$\_^2 = \frac{1}{Ja^2\cos W}\left[\frac{Mk_0^2}{2a}\int_{-L/2}^{L/2} u^2(Y)\,d_a - 2J\cos W - E\right] \tag{14}$$

将决定极化子的总能 E. 非线性方程 (13) 的解为

$$H(Y) = (\_/\sqrt{V})\operatorname{sech}(\_Y) \tag{15}$$

归一化条件 $\int_{-L/2}^{L/2} H(Y)\,dY/a \approx \int_{-\infty}^{+\infty} H^2(Y)\,dY/a = 1$ 给出 $\_ = Va/2 = G^2/(4Mk_0^2 Ja^2\cos W)$.

代入 (15) 式消去 $\_$, 得电子几率幅的包络线

$$H(x-vt) = (a\sqrt{r}/2)\operatorname{sech}[(Va/2)(x-vt)] \tag{16}$$

上式表示, 电子几率幅的包络线是以速度 v 运动的钟形峰, 它是高度局域化的, 电子分布几率在稍远处趋于 0, 峰高和峰宽都通过参数 V 依赖于 AB磁通. 晶格形变可由 (12) 式给出:

$$u(x-vt) = (Ga^2V/4Mk_0^2)\operatorname{sech}^2[(ra/2)(x-vt)] \tag{17}$$

极化子总能量由 (14) 式给出:

$$E = -2J\cos W - (1/12)Ja^2r^2\cos W \tag{18}$$

右边最末一项表示: 由于电子与晶格互作用, 使总能量降低了.

参 考 文 献

1 周义昌, 李华锺. 介观尺度上的物理. 物理学进展, 1993, 13: 423

2 Holstein T. Studies of polaron motion. Ann Phys, 1959, 13 325

3 Davydov A. Effect of electron-phonon interaction on the motion of the electron in 1D system. Sov Phys Usp, 1982, 25 898

4 李华锺, 周义昌. 介观环上的持续电流. 物理学进展, 1995, 15: 392

Effect of Aharonov-Bohm Potential on the Polaron in 1D Ring

*Fang Yizhong**　*Zhou Yichang*　*He Guangping*

Abstract　The effect of Aharonov- Bohm potential on polaron in 1D ring is discussed. The results show that the parameters of soliton- type polaron, such as the height and width of wave- packet, the travelling velocity and the total energy, depend on the magnetic flux.

Keywords　Aharonov-Bohm potential, polaron, optical mode of vibrations

* Department of Physics, Zhongshan University, Guangzhou, 510275