ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

Р17 - 10448

В.Г.Маханьков, В.К.Федянин, Л.В.Якушевич

ЭКСИТОН-ФОНОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В ДЛИННОВОЛНОВОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

1977

P17 - 10448

В.Г.Маханьков, В.К.Федянин, Л.В.Якушевич

ЭКСИТОН-ФОНОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В ДЛИННОВОЛНОВОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Направлено в "Physics Letters"

Маханьков В.Г., Федянин В.К., Янушевич Л.В. Р17 - 10448

Экситон-фононное взаимодействие в длинноволновом приближении

В приближении самосогласованного поля получены нелинейные уравнения для шредингеровских амплитуд.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1977

Makhankov V.G., Fedyanin V.K., Yakuschevich L.V. P17 - 10448

Exciton-Phonon Interaction in Long-Wave Approximation

Nonlinear equations for the Schrödinger amplitudes have been obtained in the self-consistent field approximation.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1977

В работе /I/ показано, что в линейном по смещениям относительно равновесных положений молекул приближении вклады фононов и экситонов разделяются, и весь эффект фононной подсистемы выражается: (i) в перенормировке параметров эффективного экситонного гамильтониана, (ii) в возникновении дополнительного, четверного по операторам слагаемого. При этом эффективный экситонный гамильтониан запишется:

$$H=\sum_n \tilde{\Delta}\, a_n^+ a_n + \sum_n \tilde{\mu}\left(a_{n+1}^+ a_n + a_n^+ a_{n-1}\right) + \qquad (1)$$
$$+\sum_n \tilde{\mu}'\left(a_{n+1}^+ a_n^+ - a_{n+1} a_n\right) + \sum_n \tilde{h}\left(a_{n+1}^+ a_{n+1} + a_{n-1}^+ a_{n-1}\right) a_n^+ a_n .$$

Здесь, как и в /2/, мы учли вклад резонансного взаимодействия с интенсивностью $\tilde{\mu}'$ и использовали точное в одномерном случае преобразование /3/ от паули-операторов к ферми-операторам (a_n - операторы Ферми: $a_k a_e^+ + a_e^+ a_k = \delta_{ke}$, $N_k = a_k^+ a_k$). Конкретный вид формул для $\tilde{\Delta}, \tilde{\mu}, \tilde{\mu}', \tilde{h}$ приведён в работе /I/, ниже он нами нигде не используется.

В гейзенберговском представлении имеем следующее уравнение для оператора $a_k(t)$ /I/:

$$i\hbar\, \dot{a}_n(t) = \tilde{\Delta} a_n(t) + \tilde{\mu}\left[a_{n+1}(t) + a_{n-1}(t)\right] + \qquad (2)$$
$$+\tilde{\mu}'\left[a_{n+1}^+(t) - a_{n-1}^+(t)\right] + \tilde{h}\left[N_{n+1}(t) + N_{n-1}(t)\right] a_n(t).$$

Вид гамильтониана (I) подсказывает следующий выбор пробной шредингеровской волновой функции системы:

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\lambda(t)}\left[1+\sum_k\left(\alpha_k(t)\, a_k^+ - \alpha_k^*(t)\, a_k\right)\right]|0\rangle \equiv \qquad (3)$$
$$\equiv U(t)\,|\Psi(0)\rangle\ , \quad \text{и} \quad |\Psi(0)\rangle \equiv |0\rangle\ , \quad a_\nu|0\rangle = 0.$$

При этом, если $\lambda^*\lambda = 1+\sum_k \alpha_k^*(t)\, \alpha_k(t)$, то

$$U^+ U = U U^+ = 1, \qquad (4)$$

и (3) представляет унитарное преобразование состояния в момент времени $t=0$ $|\psi(0)\rangle$ в состояние $|\psi(t)\rangle$ ($\mathcal{U}(t)$ - оператор эволюции). α_k/λ суть амплитуды вероятности состояния $a_k|0\rangle$.

Чтобы получить уравнения для $\alpha_k(t)$, рассмотрим, как обычно [4], уравнение для матричных элементов, получаемое из операторного уравнения (2)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle 0|a_n(t)|0\rangle = \tilde{\Delta}\langle 0|a_n(t)|0\rangle + \tilde{\mu}\left\{\langle 0|a_{n+1}(t)|0\rangle + \langle 0|a_{n-1}(t)|0\rangle\right\} + \tilde{\mu}'\left\{\langle 0|a^+_{n+1}(t)|0\rangle - \langle 0|a^+_{n-1}(t)|0\rangle\right\} + \tilde{h}\left\{\langle 0|N_{n+1}(t)a_n(t)|0\rangle + \langle 0|N_{n-1}(t)a_n(t)|0\rangle\right. \quad (5)$$

Постулируем следующее расцепление для последних двух слагаемых

$$\langle 0|N_p(t)a_k(t)|0\rangle \simeq \langle 0|a^+_p(t)|0\rangle\langle 0|a_p(t)|0\rangle\langle 0|a_k(t)|0\rangle .$$

Учитывая, что

$$\langle 0|a_n(t)|0\rangle = \langle 0|\mathcal{U}^+(t)a_n(0)\mathcal{U}(t)|0\rangle = \frac{\alpha_n(t)}{\lambda^*(t)\lambda(t)} = \varphi_n(t), \quad (6)$$

получаем из (5) уравнение для $\varphi_n(t)$

$$i\hbar\dot{\varphi}_n(t) = \tilde{\Delta}\varphi_n(t) + \tilde{\mu}\left[\varphi_{n+1}(t)+\varphi_{n-1}(t)\right] + \tilde{\mu}'\left[\varphi^*_{n+1}(t) - \varphi^*_{n-1}(t)\right] + \tilde{h}\left[\varphi^*_{n+1}(t)\varphi_{n+1}(t) + \varphi^*_{n-1}(t)\varphi_{n-1}(t)\right]\varphi_n(t). \quad (7)$$

Следуя [5], перейдем к континуальному аналогу (7), разлагая $\varphi_{n\pm 1}(t)$ в ряд Тейлора до φ_{xx} включительно:

$$\varphi_{n\pm 1}(t) \simeq \varphi(x,t) \pm \varphi_x(x,t) + \frac{1}{2!}\varphi_{xx}(x,t).$$

В результате в "длинноволновом приближении" получим нелинейное дифференциальное уравнение для шредингеровских амплитуд $\varphi(x,t)$

$$i\hbar\dot{\varphi} = \tilde{\Delta}\varphi + \tilde{\mu}(2\varphi+\varphi_{xx}) + \tilde{\mu}'(2\varphi^*_x) + \tilde{h}\left(2|\varphi|^2 + 2|\varphi_x|^2 + \frac{1}{2}|\varphi_{xx}|^2 + \varphi^*_{xx}\varphi + \varphi^*\varphi_{xx}\right)\varphi = 0,$$

в котором отбросим члены более высокого, чем φ^3, порядка по нелинейности и дисперсии. Окончательно имеем

$$i\hbar\dot{\varphi} = (\tilde{\Delta}+2\tilde{\mu})\varphi + \tilde{\mu}\varphi_{xx} + 2\tilde{\mu}'\varphi^*_x + 2\tilde{h}|\varphi|^2\varphi. \quad (8)$$

Сравнительно с [5] мы получили дополнительное слагаемое $2\tilde{\mu}'\varphi^*_x$, что естественно, поскольку авторы работы [5] исходили из обычного варианта описания экситонов, в котором третье слагаемое в гамильтониане опускается.

Переходя к безразмерным переменным

$$\varphi = \sqrt{\frac{\tilde{\Delta}+2\tilde{\mu}}{2\tilde{h}}}\,\Phi,\quad t = (\tilde{\Delta}+2\tilde{\mu})^{-1}t,\quad x = \sqrt{\frac{|\tilde{\mu}|}{\tilde{\Delta}+2\tilde{\mu}}}\,x,$$

получим уравнение

$$F(\Phi,\alpha) \equiv i\Phi_t - \Phi + \alpha\Phi^*_x + \Phi_{xx} + \Phi|\Phi|^2 = 0 \quad (9)$$

с малым параметром

$$\alpha = \left|\frac{\tilde{\mu}'}{\tilde{\mu}}\right|\left(\frac{|\tilde{\mu}|}{\Delta+2\tilde{\mu}}\right)^{1/2} \ll 1 \quad (10)$$

в силу $\tilde{\mu} \ll \tilde{\Delta}$.

Уравнение (9) допускает квазисолитонные решения, спектр которых значительно богаче, чем обычное уравнение с $\alpha=0$. Здесь мы отметим лишь следующие качественные результаты. Уравнение (9) имеет лишь один первый интеграл, представляющий собой закон сохранения числа квантов-экситонов

$$\frac{dQ}{dt} = 0,\quad Q = \int|\Phi|^2 dx \quad (11)$$

или

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Phi|^2 + \frac{\partial}{\partial x}i\left\{\frac{\alpha}{2}(\Phi^2-\Phi^{*2}) + (\Phi\Phi^*_x - \Phi^*\Phi_x)\right\} = 0.$$

в то время как $F(\Phi,0)=0$ является уравнением Лагранжа-Эйлера, вполне интегрируемо и имеет счетное число первых интегралов /6/.

В связи с этим качественным отличием уравнение (9) допускает как формирование, так и взаимодействие солитонов. Наконец, кроме известных ранее для $F(\Phi,0)=0$ безусловных одномерных солитонов в рамках уравнения (9) возможно существование солитонов с одним, двумя и т.д. узлами полевой функции, как это имеет место в сферически симметричных моделях /7/.

Все это означает, что несмотря на малый параметр перед членом Φ_x^* , последний качественно изменяет характер уравнения.

Мы признательны А.С.Давыдову за обсуждение деталей работы.

Литература:

1. В.К. Федянин, Л.В. Якушевич. Препринт ОИЯИ Р17-9627, Дубна, 1976, ТМФ, 30, 1, 1977.
2. В.К. Федянин, Л.В. Якушевич. Препринт ОИЯИ Р17-9628, Дубна, 1976.
3. D.B.Chesnut, A.Suna. J.Chem. Phys. 39, 146. 1963.
4. П.А.М. Дирак. Основы квантовой механики,М.,1960.
5. А.С. Давыдов, Н. Кислуха. Phys.Stat.Solid (b) 59, 465, 1973.
6. В.Е. Захаров, А. Шабат. ЖЭТФ, 61, 118, 1971.
7. R.Friedberg, T.D.Lee, A.Sirlin. Phys. Rev. D13, 2739, 1976.

Рукопись поступила в издательский отдел
16 февраля 1977 года.