

电子相互作用和孤子元激发(I)^{*}

电子关联对孤子定域性的影响

马允胜 吴长勤 孙 鑫 傅荣堂

(复旦大学物理系, 李政道物理学综合实验室, 上海 200433)

傅柔励 褚君浩

(中国科学院上海技术物理研究所, 红外物理国家重点实验室, 上海 200083)

(1995 年 11 月 21 日收到)

研究了电子相互作用对孤子定域性的影响. 由于导电聚合物具有宽能带, 不宜用 Hubbard 模型来描述电子相互作用, 需要改用屏蔽库仑势. 结果表明, 在电子关联对孤子定域性的影响中, 屏蔽起了关键作用: 弱屏蔽时, 电子相互作用会增强孤子的定域性; 强屏蔽时, 则会削弱其定域性. 还从屏蔽与电子关联之间的关系, 说明了产生上述结果的物理原因.

PACC: 7150; 7145G

1 引 言

苏武沛等^[1]提出了 SSH 模型, 并由此建立了导电聚合物的孤子理论, 来解释所观察到的种种奇异的实验现象. 从而开辟了导电聚合物研究的新领域. 此理论首先指出电子和空穴中的电荷与自旋可以分离, 随后此发现被移植至分数量子 Hall 效应、高温超导理论、分数统计中去, 推动了凝聚态物理的发展.

在孤子理论中包含两个核心问题, 一个是孤子激发能的大小, 它关系到孤子能否代替电子-空穴而成为体系中起主要作用的载流子. 这是孤子理论成败的关键; 另一个就是孤子半宽度, 它反映了孤子定域性的好坏, 决定了导电聚合物的输运性质和动力学过程.

在只考虑电子-晶格相互作用的情况下, 苏武沛等^[1]首先应用分立的 SSH 模型, 给出了孤子半宽度 ξ_0 的数值结果. Takayama 等^[2]在弱耦合的情况下将 SSH 模型连续化为 TLM 模型, 给出了与 SSH 模型一致的解析结果.

因为导电聚合物中电子相互作用十分重要, 只有考虑了电子相互作用, 才能合理地解释实验现象. 然而一旦在体系中加入了电子相互作用, 就变成了非常复杂的多体问题, 不再能够严格求解. 只能采用不同的近似手段. 由于大家采用的模型不同, 以及在相同模型下所用的近似方法不同, 所得到的结果很不一样. 就孤子的定域性而言, Kivelson 等^[3]在

^{*} 国家自然科学基金、国家高技术研究发展计划及国家教育委员会博士学科点专项科研基金资助的课题.

仅考虑 Hubbard 排斥相互作用下,应用限制的 HF 方法,同时不考虑电子相互作用强度 U_0 对二聚化基态的影响,当 U_0 比较小(不大于 $1.4 t_0$)时,得到中性孤子的半宽度 ξ_0 基本上不随电子相互作用强度 U_0 改变的结果.Kuprievich^[4]在 Hubbard 模型下,应用 APSG (antisymmetrized product of strongly orthogonal geminala)近似,在 N 为 50 个(CH)元胞的中性偶数链上,得到中性孤子对 $S^0 S^0$ 和荷电孤子对 $S^+ S^-$ 的孤子半宽度 ξ_0 随电子相互作用强度 U_0 的增大而减小的结果.解士杰等^[5]在实空间应用相关基函数(correlated base function, 简记为 CBF)方法,在电子关联考虑不完全的情况下,得到了和 Kuprievich 相似的结果,但他们都不能说明产生此种结果的物理原因.

我们知道,Hubbard 模型只对那些窄能带的体系才是很好的近似,这些系统中不同格点间的波函数交叠很小,电子相互作用的非对角项比对角项小得多,可以忽略.但对于聚乙烯来说情况有所不同,它的带宽大约 10 eV,大于 U ,这时非对角项已经不可忽略,如果仍然用 Hubbard 模型来处理,就会出现问题的.这一点在过去对于二聚化的计算中已经得到证明^[6].因此用 Hubbard 模型求解孤子体系,得到的结论也将同样不可靠.必须用适合于宽能带的电子相互作用模型来描述导电聚合物,这就是屏蔽库仑势.

实际上,在 80 年代中期国际上曾出现过类似的矛盾,当时在研究电子相互作用对高分子二聚化结构的影响时,出现了激烈的争论,一方认为电子相互作用会增强二聚化^[7],另一方则认为电子相互作用要减弱二聚化^[3].后来我们研究组用 CBF 理论澄清了该争论^[6],CBF 理论揭示出电子相互作用对二聚化的影响决定于屏蔽.对于弱屏蔽,电子相互作用增强二聚化,对于强屏蔽,电子相互作用减弱二聚化.

要利用 CBF 方法,必须在坐标空间求得密度分布 $P(\mathbf{r})$ 的关联函数 $g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. SSH 模型采用的是 Wannier 表象,但未在坐标空间给出基函数,而且略去了非近邻跳跃,因而孤子理论的 SSH 模型是不够的,需要根据晶格势能直接在坐标空间求解 Schrödinger 方程得到波函数.因为我们关心的是电子相互作用对孤子特性的影响,晶格周期势场的细节并不重要,晶格势场越是简单,数值计算的准确性就越高,确定电子相互作用的影响也越是可靠.因此本工作将采用 Kronig-Penny 模型来描述晶格周期性势场.

本文的结果将表明:在电子相互作用对孤子定域性的影响中,屏蔽起了关键作用,强屏蔽和弱屏蔽的结果很不一样,这就可澄清现有的看法,本文还将说明屏蔽能左右结果的物理原因.

2 理论方法

在考虑电子相互作用后,实空间一维体系的哈密顿量可一般地表示为

$$H = \sum_i \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx_i^2} + \sum_n V(x_i - X_n) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i,j} v(x_i - x_j) + \frac{K}{2} \sum_n (u_{n+1} - u_n)^2. \quad (1)$$

等号右端第一项表示电子-晶格相互作用,其中, $V(x_i - X_n)$ 是在 X_n 位置上的第 n 个原子对 x_i 位置上的第 i 个电子所产生的势能.第二项表示电子-电子相互作用,在导电高分子中,由于同一条链上 σ 电子以及其他链上电子的影响,同一链上 π 电子之间的库仑相

互作用要受到一定的屏蔽,因而电子之间的相互作用可以一般地用屏蔽库仑势来描述.

$$v(x_i - x_j) = \frac{U_0}{\sqrt{(x_i - x_j)^2 + a^2}} \exp(-\beta |x_i - x_j| / a), \quad (2)$$

其中 U_0 是相互作用强度, β 是屏蔽因子. 这两个参数依赖于材料的性质, 对不同的高分子材料及不同的掺杂浓度, U_0 和 β 的数值也不相同. 由于高分子链不是严格的一维体系, 而有一定的半径, 其半径约为晶格常数 a , 因此我们用 $\sqrt{(x_i - x_j)^2 + a^2}$ 来代替严格一维体系下的 $|x_i - x_j|$, 这样既反映了链的粗细, 又可避免数学上的发散. 第三项表示晶格原子发生形变的弹性能. u_n 是第 n 个格点的原子偏离平衡位置的量值, K 是一维链上 σ 键的弹性系数.

由于(1)式所给的哈密顿量中包含了电子-电子相互作用, 在 CBF 框架下, 该哈密顿量的波函数 $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ (简称为 $\Psi(1, 2, \dots, N)$) 可以用 Jastrow 波函数表示为

$$\Psi(1, 2, \dots, N) = D[\Psi_j] \exp[u(1, 2, \dots, N)], \quad (3)$$

它由两部分所组成: $D[\Psi_j]$ 是单电子轨道波函数 Ψ_j 构成的 Slater 行列式; $\exp[u(1, 2, \dots, N)]$ 是关联部分.

首先考虑第一部分: (1) 式等号右端的第一项——单电子部分, 由于没有电子相互作用, 它可分解为单粒子问题

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \sum_n V(x - X_n) \right] \Psi_j(x) = \epsilon_j \Psi_j(x), \quad (4)$$

其中 ϵ_j 是单电子的能谱, $\Psi_j(x)$ 是单电子的波函数, 体系的波函数是由 $\Psi_j(x)$ 组成的 Slater 行列式.

对于任意给定的晶格势场 $V(x - X_n)$, 从理论上讲都可以求出体系的能量本征值和本征函数, 为使问题得到简化, 对格点原子产生的势场采用 Kronig-Penny 模型, 将每个格点的势场取为

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -\frac{b}{2} \leq x - X_n \leq \frac{b}{2}; \\ V_0 & \text{其他区域,} \end{cases} \quad (5)$$

其中 V_0 是势阱深度, b 是势阱宽度. 在 SSH 哈密顿量中, 体系的性质由 t_0 (跃迁常数)、 α (电子-晶格相互作用) 和 K 完全决定, 而在 Kronig-Penny 模型下决定体系性质的是势阱宽度 b , 势阱深度 V_0 和弹性系数 K , 这两组参数的对应关系将在下面的具体讨论中给出.

对于上述形式的哈密顿量, 体系第 n 个势阱中第 j 个能级的波函数 Φ_{nj}^W 和第 n 势垒中第 j 个能级的波函数 Φ_{nj}^B 可一般地表示为

$$\begin{aligned} \Phi_{nj}^W(x) &= A_{nj} e^{ik_j x} + B_{nj} e^{-ik_j x}, \\ k_j &\equiv \sqrt{2m\epsilon_j / \hbar^2}; \\ \Phi_{nj}^B(x) &= C_{nj} e^{\kappa_j x} + D_{nj} e^{-\kappa_j x}, \\ \kappa_j &\equiv \sqrt{2m(V_0 - \epsilon_j) / \hbar^2}, \end{aligned} \quad (6)$$

其中 m 是电子的质量, ϵ_j 是第 j 个能级的能量本征值, A_{nj} , B_{nj} , C_{nj} 和 D_{nj} 是由边界条件和

归一性条件所确定的波函数的系数. 在势阱和势垒的边缘应用波函数及其一阶导数连续的条件可得到上述波函数中各系数的递推公式

$$\begin{aligned} A_{nj} &= \frac{1}{2} \left[\left(1 - i \frac{\kappa_j}{k_j} \right) e^{\kappa_j d_{n-1}/2} C_{n-1,j} + \left(1 + i \frac{\kappa_j}{k_j} \right) e^{-\kappa_j d_{n-1}/2} D_{n-1,j} \right] e^{i k_j b/2}, \\ B_{nj} &= \frac{1}{2} \left[\left(1 + i \frac{\kappa_j}{k_j} \right) e^{\kappa_j d_{n-1}/2} C_{n-1,j} + \left(1 - i \frac{\kappa_j}{k_j} \right) e^{-\kappa_j d_{n-1}/2} D_{n-1,j} \right] e^{-i k_j b/2}, \\ C_{nj} &= \frac{1}{2} \left[\left(1 + i \frac{k_j}{\kappa_j} \right) e^{i k_j b/2} A_{nj} + \left(1 - i \frac{k_j}{\kappa_j} \right) e^{-i k_j b/2} B_{nj} \right] e^{\kappa_j d_i/2}, \\ D_{nj} &= \frac{1}{2} \left[\left(1 - i \frac{k_j}{\kappa_j} \right) e^{i k_j b/2} A_{nj} + \left(1 + i \frac{k_j}{\kappa_j} \right) e^{-i k_j b/2} B_{nj} \right] e^{-\kappa_j d_i/2}, \end{aligned} \quad (7)$$

其中 d_n 是第 n 个势垒的宽度, 其数值为 $X_{n+1} - X_n = b$. 从上面的递推公式可以看出: (i) 一旦给定了初始值 A_{0j} , B_{0j} 或 C_{0j} , D_{0j} 就可求出体系的本征函数, 而 A_{0j} , B_{0j} 或 C_{0j} , D_{0j} 可根据体系的对称性来确定其初始值. (ii) 如果 A_{0j} 和 B_{0j} 取为共轭复数或 C_{0j} 和 D_{0j} 取为实数, 则对所有的 n , A_{nj} 和 B_{nj} 为共轭复数, 而 C_{nj} 和 D_{nj} 为实数.

最后应用周期性边界条件通过改变 ϵ_j 的值使两端点波函数的值相同, 就可求出能谱 ϵ_j 并确定系数 A_{nj} , B_{nj} , C_{nj} 和 D_{nj} , 再将 Φ_{nj}^B 和 Φ_{nj}^W 连接起来就可得到电子波函数 $\Psi_j(x)$, 从而可确定 Slater 行列式 $D[\Psi_j]$.

再考虑(3)式的第二部分: $\exp[u(1, 2, \dots, N)]$, 它反映电子的关联效应, u 是关联因子, 可一般表为

$$u(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{2!} \sum_{i,j} u_{ij} + \frac{1}{3!} \sum_{i,j,k} u_{ijk} + \dots, \quad (8)$$

u_{ij} , u_{ijk} , $\dots$ 分别称为两体、三体、 $\dots$ 关联因子. 对排斥作用系统, 如果密度不是太高, 可以忽略三体以上的关联. 波函数(3)就变成了通常的 Feenberg-Jastrow-Slater 形式

$$\Psi(1, 2, \dots, N) = D[\Psi_j] \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{i,j} u_{ij} \right]. \quad (9)$$

根据上面所给出的哈密顿量和波函数, 可将体系的能量表示为

$$E = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = E_b + E_{es} + E_{ex} + T + E_{el}, \quad (10)$$

其中 E_b 是单电子的能带能量, E_{es} 是体系的静电能, E_{ex} 是交换能, E_{el} 为弹性能, T 是关联能. 它们分别为

$$E_b = \sum_{occ} \epsilon_k, \quad (11)$$

$$E_{es} = \frac{1}{2} \int d1 [P(1) - n_0] \int d2 [P(2) - n_0] v(12), \quad (12)$$

$$E_{ex} = \frac{1}{2} \int d1 P(1) \int d2 P(2) [g(12) - 1] v(12), \quad (13)$$

$$T = T_3 + T_{41} + T_{42} + T_{43}, \quad (14)$$

$$T_3 = \frac{\hbar^2}{8m} \int d1 P(1) \int d2 P(2) g(12) (\nabla_1 u_{12})^2, \quad (15)$$

$$T_{41} = \frac{\hbar^2}{8m} \int d1 P(1) \int d2 P(2) \int d3 P(3) g(12) g(13) (\nabla_1 u_{12}) \cdot (\nabla_1 u_{13}), \quad (16)$$

$$T_{42} = \frac{\hbar^2}{8m} \int d1 P(1) \int d2 P(2) \int d3 P(3) h(23) (h(12) + g(12)) (\nabla_1 u_{12}) \cdot (\nabla_1 u_{13}), \quad (17)$$

$$T_{43} = \frac{\hbar^2}{8m} \int d1 P(1) \int d2 P(2) \int d3 P(3) \int d4 P(4) h(14) h(24) h(34) (\nabla_1 u_{12}) \cdot (\nabla_1 u_{13}), \quad (18)$$

$$E_{el} = \frac{K}{2} \sum_n (u_{n+1} - u_n)^2. \quad (19)$$

式中的 n_0 为平均电荷密度, $P(1)$ 为电子密度, $g(1,2)$ 为关联函数, $h(12) = g(12) - 1$ 且满足

$$\int d2 P(2) h(12) = -1. \quad (20)$$

该式称为归一条件, 在以后的数值计算中是检验结果的判据.

根据 CBF 理论, $P(1)$ 和 $g(1,2)$ 可以从下述联立方程中解出^[6]:

$$P(1 | \lambda) = P(1 | 0) \exp \left[\int_0^\lambda d\lambda' A(1 | \lambda') \right], \quad (21)$$

$$g(12 | \lambda) = g(12 | 0) \exp \left[\int_0^\lambda d\lambda' K(12 | \lambda') \right], \quad (22)$$

其中 A, K 均是 $P(1), g(12)$ 的泛函, 具体表达式如下:

$$A(1) = \sum_{n=1}^6 A_n(1),$$

$$A_1(1) = \int d2 P(2) u(12),$$

$$A_2(1) = \int d2 P(2) h(12) u(12),$$

$$A_3(1) = \int d2 P(2) \gamma_1(12),$$

$$A_4(1) = \int d2 P(2) A_2(2) h(12),$$

$$A_5(1) = \frac{1}{2} \int d2 P(2) h(12) \gamma_1(12),$$

$$A_6(1) = \int d2 P(2) A_5(2) h(12),$$

其中 $\gamma_1(12) = \int d3 P(3) h(13) u(23).$

$$K(12) = \gamma(12) + \frac{1}{g(12)} [\delta(12) + \delta(21) + \zeta(12) + \xi(12)],$$

$$\gamma(12) = u(12) + \gamma_1(12) + \gamma_1(21) + \gamma_2(12),$$

$$\gamma_2(12) = \int d3 P(3) h(13) \gamma_1(23),$$

$$\delta(12) = \int d3 P(3) h(13) \gamma(13) h(23),$$

$$\zeta(12) = \int d3 P(3) h(13) \delta(32),$$

$$\xi(12) = \int d3 P(3) h(13) h(23) A(3).$$

迭代方程组的初始值 $P(1|0)$, $g(12|0)$ 由单电子能带论给出.

$$P(1|0) = \sum_{k,s} |\Psi_{ks}(1)|^2, \quad (23)$$

$$g(12|0) = 1 - \sum_s \frac{|\sum_k \Psi_{ks}^*(1) \Psi_{ks}(2)|^2}{P(1|0) P(2|0)}, \quad (24)$$

其中 Ψ_{ks} 是波矢为 k , 自旋为 s 的单电子轨道波函数.

至此, 我们完成了研究聚合物体系中孤子性质所需要的理论推导工作, 应用上述公式, 便可求出电子相互作用对孤子激发能以及孤子半宽度的影响.

3 结果与讨论

3.1 单电子体系

如果忽略电子相互作用, (1) 式则变为

$$H = \sum_i \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx_i^2} + \sum_n V(x_i - X_n) \right] + \frac{K}{2} \sum_n (u_{n+1} - u_n)^2, \quad (25)$$

体系的总能量变为

$$E = \sum_{\text{occ}} \epsilon_j + \frac{K}{2} \sum_n (u_{n+1} - u_n)^2. \quad (26)$$

求解上述哈密顿量就可得到电子-晶格相互作用下体系的各种性质.

具体计算的体系是由 100 个单元组成的环, 每一个单元提供一个可自由移动的 π 电子, 这是一种能带半满的结构. 晶格常数 a 为 1.22 埃, 在文献[6]中已说明. 为了拟合一般聚合物的能带宽度, 能隙, 电子-晶格相互作用 α , 势阱宽度 b 应取 0.6 埃, 势阱深度 V_0 应取 40 eV. 格点原子的弹性系数 K 的变化范围从 43 eV/埃² 到 66 eV/埃², 后面的计算表明, 对应的电子-晶格耦合常数 λ 的变化范围是在 0.178—0.273.

1) 二聚化

对于能带半满的一维导体, 由于 Peierls 不稳定性, 晶体格点原子不能保持等间距排列, 要发生二聚化, 第 n 个原子的位置由原来的 $X_n = na$ 变为 $X_n = na \pm (-1)^n u$, 则第 n 个原子的位移为

$$u_n = \pm (-1)^n u, \quad (27)$$

其中 u 是二聚化常数, 正负号分别代表二聚化的 A 相和 B 相. 在上述位形下求解体系哈密顿量, 并通过对二聚化常数 u 变分, 求体系能量极小值, 就能确定不同参数下二聚化常数 u 的大小.

图 1 给出了能隙 E_g 随二聚化常数 u 的变化关系, 从中可以看到 E_g 随 u 的变化非常接近线性关系, 这与 SSH 模型给出的结果 $E_g = 8 \alpha u$ 相吻合, 通过这个公式求出体系的电

声子相互作用系数 α 等于 7.05 eV/Å . 用这种方法就可以建立 Kronig-Penny 模型和 SSH 模型之间的对应关系.

2) 孤子

由于所考虑的电子-晶格体系具有二度简并基态 A 相和 B 相, 这两种简并的相可以在同一条链中稳定存在, 此时在两相的界面处形成一个畴壁, 这种畴壁就是孤子. 我们把 A 相和 B 相的连接称为孤子 S, 把 B 相和 A 相的连接称为反孤子 $\bar{S}$, 我们把孤子的中心取为第 0 个格点, 反孤子的中心在第 $N/2$ 个格点, 孤子的位形取为

$$X_n = na + (-1)^n u \tanh\left(\frac{na}{\xi_0}\right), \quad (28)$$

其中, u 就是上面所求出的二聚化常数, ξ_0 是孤子半宽度, 在计算中通过对 ξ_0 变分, 求能量极小来确定孤子位形.

(i) 孤子激发能 对于中性孤子对 $S^0\bar{S}^0$ 和正负电孤子对 $S^+\bar{S}^-$, 孤子对激发能为

$$2\epsilon_s = E_S - E_D. \quad (29)$$

其中 E_S 是孤子对体系的总能量, E_D 是二聚化体系的总能量. 在不存在电子相互作用的情况下, 这两个激发能是相同的. 同时孤子和反孤子也是相互等价的, 两者的激发能相等. 图 2 给出了孤子激发能 ϵ_s 随电声子耦合常数 λ 的变化曲线. 图中的虚线是 TLM 模型的结果, 可以看出在弱耦合的极限下我们的结果(图中实线)和 TLM 模型的结果一致, 这从一个侧面说明我们对晶格势场取 Kronig-Penny 模型近似的合理性.

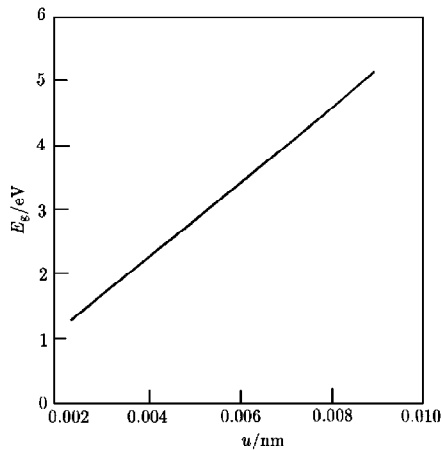


图 1 能隙随二聚化常数的变化

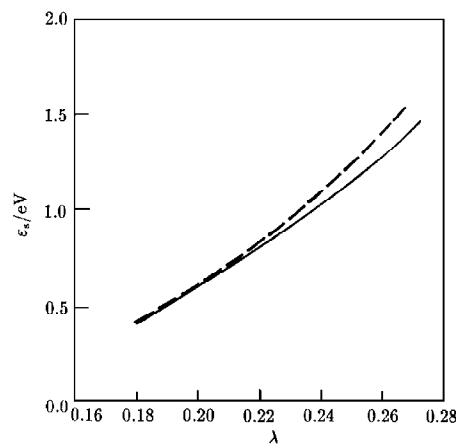


图 2 孤子激发能随电声子耦合常数 λ 的变化关系
——为本文结果, ---为 TLM 模型的结果

(ii) 孤子半宽度 ξ_0 图 3 给出了孤子半宽度 ξ_0 与能隙 E_g 的乘积随 λ 的变化, 在 TLM 模型下 ξ_0 和 E_g 有如下关系:

$$\xi_0 = 4at_0/E_g. \quad (30)$$

从上式可以看出 ξ_0 乘以 E_g 应是一条和 x 轴平行的直线, 到 x 轴的距离为 $4at_0$. 从图 3

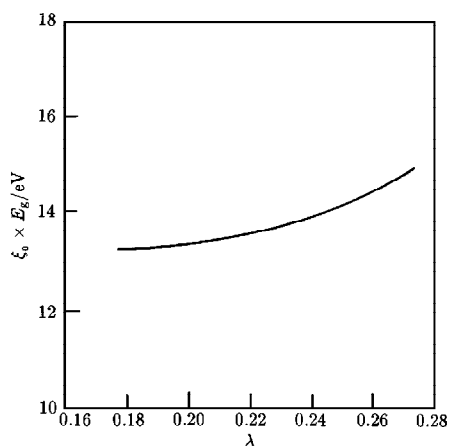


图3 孤子半宽度与能隙的乘积随电声子耦合常数的变化

中可以看到在弱耦合的情况下 ξ_0 乘以 E_g 接近于一个常数, 从图 3 可以得到 t_0 为 2.7 eV . 有了 t_0 和 α , 就可以由公式

$$\lambda = \frac{2\alpha^2}{\pi K t_0} \quad (31)$$

求出 λ , 从而建立和 SSH 模型的对应关系.

应该指出, SSH 模型已作了紧束缚近似, 略去了非近邻的跳跃, 而本文的 Kronig-Penny 模型给出的是准确解. 上述根据 SSH 或 TLM 模型的关系来确定 α 和 t_0 都是近似的, 由此得到的 λ 也是近似的. 因此若用如此定义的 λ 来描述本文的各种物理量, 在定量上会与 SSH 或 TLM 的结果有些差异. 重要的是各种物理量之间的相互关系, 例如 E_g 与 u 的关系, ξ_0 与 E_g 的关系. 在弱耦合下,

趋向于解析理论.

3.2 电子相互作用体系

按照本文的方法求解(1)式. 由于考虑到计算机的速度和容量, 以及孤子半宽度的大小, 所取的体系为 64 个单元组成的环, 弹性系数取为 $50.0 \text{ eV}/\text{Å}^2$, 其他参数不变. 首先解单电子波函数, 由此组成 Slater 行列式, 以作为求解 C-W 方程的初始条件. 求解 C-W 方程得到 P 和 g . 由 P 和 g 进一步求出体系的总能量. 通过对位形参量进行能量变分, 最后确定出二聚化和孤子自洽的位形结构. 由于孤子产生于二聚化, 因此我们仍然先讨论二聚化的位形结构, 然后讨论孤子的位形结构.

1) 二聚化

图 4 给出了二聚化常数 u 随电子相互作用强度 U_0 的变化关系. 从图中可以看到在 U_0 比较小的情况下, 当屏蔽因子 β 较小时, u 随 U_0 的增大而增大. 当 β 较大时, u 随 U_0 的增大而减小. 这点和吴长勤等^[6]的结果一致.

2) 孤子

应用上面所计算出的二聚化常数 u 的值, 将孤子位形代入体系, 对孤子半宽度 ξ_0 变分求能量最小, 就能得出孤子位形. 图 5 给出了 ξ_0 随 U_0 的变化关系. 结果显示, 当 $\beta > 0.5$ 时, 孤子半宽度随 U_0 的增大而增大, 当 $\beta < 0.5$ 时, 孤子半宽度随 U_0 的增加而减小. 这一结果和前人的结论有明显的不同.

本文的结果说明, 在电子相互作用对孤子的定域性产生影响时, 屏蔽起了关键性的作用. 在强屏蔽 ($\beta > 0.5$) 情况下, 电子相互作用减弱了孤子的定域性, 它使孤子增宽; 在弱屏蔽 ($\beta < 0.5$) 情况下, 则产生了相反的影响, 电子相互作用增强了孤子的定域性, 它使孤子变窄. 产生这些结果的物理原因是可以理解的, 这要分析一下屏蔽与关联的关系. 文献[6]已经指出, 利用二次量子化表象可看到, 屏蔽库仑势包含了对角相互作用项(由格点上

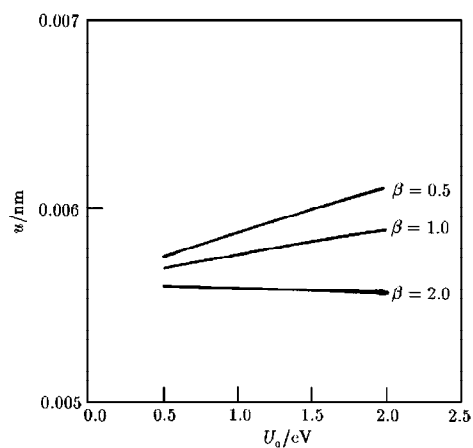


图4 二聚化常数随电子相互作用强度和屏蔽常数的变化

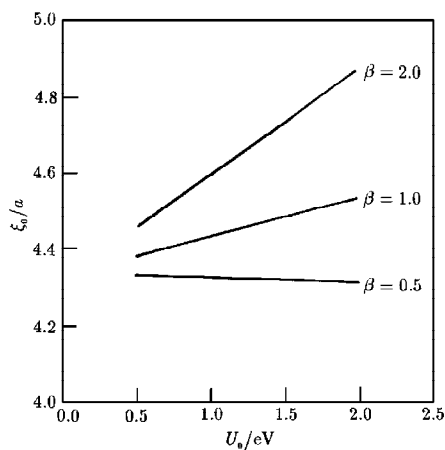


图5 孤子半宽度随电子相互作用强度和屏蔽常数的变化

的电荷密度 $n_{i\sigma}$ 所组成,例如 $n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$) 和非对角相互作用项(由键上的密度算符 $a_{i,\sigma}^\dagger a_{i+1,\sigma}$ 所组成,例如 $a_{i,\uparrow}^\dagger a_{i+1,\uparrow}$, $a_{i,\downarrow}^\dagger a_{i+1,\downarrow}$),前者对应于 Hubbard 或 Extended Hubbard 模型,它反映了格点电荷的排斥;后者是 Hubbard 模型所没有的,它反映了键电荷的排斥.当屏蔽增强时,非对角相互作用的矩阵元逐渐变大^[9],它对聚合物的结构产生重要的贡献.这时键电荷的排斥会减弱单键和双键的差异,这使二聚化变小.我们知道,孤子是两种反向二聚化(A相和B相)之间的畴壁,在孤子的两侧,单双键的排列是相反的,一旦单键与双键的差异减少,A相与B相之间的畴壁就变“软”,这时过渡区域就要扩展,于是孤子就会增宽.这就是强屏蔽时,电子相互作用使孤子定域性减小的物理原因.反过来,在弱屏蔽情况下,非对角相互作用矩阵元比对角矩阵元小得多,键电荷排斥可忽略,主要是格点电荷的排斥起作用,它阻碍了单键和双键的互换,于是就增强了二聚化和单双键之间的差异,畴壁变“硬”,这时孤子两侧的过渡区域就要减小,使得孤子变窄.

文献[4,5]认为电子相互作用总使孤子变窄,这是不确切的,我们可以找到产生这种结果的原因.如果不解 C-W 方程,直接用单电子近似下求得的 Slater 行列式去计算关联函数,也能求出 ξ_0 ,此时结果如图

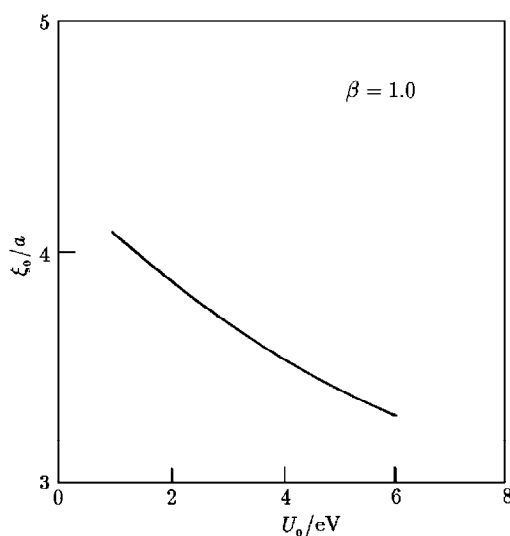


图6 在没有完全计入电子关联的情况下孤子半宽度随电子相互作用强度和屏蔽常数的变化

6 所示,它和文献[4,5]一致.这说明,当电子关联未完全计入时,就会得到他们的结果.只有完全考虑了电子关联(自洽求解 C-W 方程后的关联函数)后,才能得到正确的结论.另外,从孤子半宽度 ξ_0 和二聚化常数 u 的关系来看,在不考虑电子相互作用的情况下, ξ_0 随 u 的增大而减小.现在,考虑了电子相互作用后,无论在强屏蔽或弱屏蔽下,这种关系依然成立.

- [1] W.P.Su, J.Schrieffer, A.Heeger, *Phys. Rev. Lett.*, **42**(1979),1698.
- [2] H.Takayama *et al.*, *Phys. Rev.*, **B21**(1980),2388.
- [3] S.Kivelson *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987),1899.
- [4] V.Kuprievich, *Phys. Rev.*, **B40**(1989),3882.
- [5] 解士杰等,物理学报,**40**(1991),957.
- [6] C.Wu, X.Sun, K.Nasu, *Phys. Rev. Lett.*, **59**(1987),831.
- [7] D.Baeriswyl *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **60**(1988),70.
- [8] Schakravarty and C.W.Woo, *Phys. Rev.*, **B13**(1976),4815.
- [9] X.Sun *et al.*, *Proc. of Interacting Electron in Reduced Dimensions*, ed. D.Baeriswyl and D.K.Campbell (Plenum Press, New York, 1989), p.179.

ELECTRON-ELECTRON INTERACTION AND SOLITON EXCITATION(I)

THE EFFECT OF ELECTRON CORRELATION ON THE LOCALIZATION OF SOLITON

MA YUN-SHENG WU CHANG-QIN SUN XIN FU RONG-TANG

(*Department of Physics, T. D. Lee Physics Laboratory, Fudan University, Shanghai 200433*)

FU ROU-LI ZHU JUN-HAO

(*State Key Laboratory of Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics,
Academia Sinica, Shanghai 200083*)

(Received 21 November 1995)

ABSTRACT

The effect of electron-electron interaction on the localization of soliton is studied. Because the conducting polymer possesses wide bandwidth, the Hubbard model is no longer a suitable approximation. It is needed to use a screened Coulomb potential to describe the e-e interaction. Our theory shows that the screening plays a key role in the effect of e-e interaction on the localization of soliton: in weak screening, the localization of soliton will be enhanced by the e-e interaction; in strong screening, it will be reduced. In the end, the physical reason of above-mentioned results is explained by analysing the relation between screening and electron correlation.

PACC: 7150; 7145G