

电子相互作用和孤子元激发(Ⅱ)*

电子关联对孤子激发能的影响

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 叶红娟

(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)

电子相互作用对孤子的激发能是增加还是减小, 各种理论相互矛盾, 分析了产生矛盾的原因, 提出了计算孤子激发能的新方法, 结果表明: 电子相互作用使荷电孤子对的激发能增加, 其增加的幅度小于电子-空穴对激发能的增加幅度.

PACC: 7150; 7145G

1 引 言

目前, 在研究电子关联对孤子激发能的影响时, 都从 Hubbard 模型出发, 但所得到的结果分歧很大, 甚至相互冲突. 具有代表性的有 Campbell 等应用量子 Monte Carlo 方法求得的孤子激发能随电子相互作用强度 U 的增大而减小^[1]; Kuprievich 用 APSG (antisymmetrized product of strongly orthogonal geminals) 方法得到相反的结果^[2], 电子相互作用强度 U 使孤子激发能增加. 还有其他工作, 有的使孤子激发能增加^[3], 有的使其减小^[4]. 这些结果相互矛盾. 鉴于孤子激发能在导电高分子理论中的重要地位, 必须对此问题进行深入研究, 澄清上述相互矛盾的结论.

这些工作的哈密顿量是相同的, 都从 Hubbard 模型出发, 为什么会产生相互矛盾的结果? 分析一下这些工作所存在的共同问题就能发现其原因, 并且针对这些问题提出解决的方法, 澄清上述矛盾.

孤子的激发能 ϵ_s 为

$$\epsilon_s = E_S - E_D, \quad (1)$$

其中 E_D 是二聚化长链的基态总能量, E_S 是此长链中激发起孤子后的总能量. 很明显, E_D 和 E_S 都是广延量, 它们随长链中的元胞数目 N 而线性增长, 因为 N 要足够大, 所以 E_D 和 E_S 都是大量 (约为 10^2 eV). 但当链足够长时, 孤子激发能 ϵ_s 与链长无关, 因而是与 N 无关的内含量, ϵ_s 只有零点几电子伏, 它比 E_D 和 E_S 小得多.

* 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.

现有的各种理论都是直接根据(1)式来计算孤子激发能,先算出两个广延量 E_D 和 E_S ,将两个大量相减求得微小的内含量 ϵ_s .当考虑了电子相互作用之后,计算 E_D 和 E_S 是复杂的多体理论,必须采用近似.由于 E_D 和 E_S 都是大的广延量,即使近似方法很好,只具有百分之几的相对误差,但其绝对误差已超过了孤子激发能 ϵ_s 本身.因此用计算广延量 E_D 和 E_S 的方法来求 ϵ_s 是不可靠的.各种理论方法由于用了不同的近似,所以求得的 ϵ_s 有时会相互矛盾.

从上述分析可以看到,要解决存在的矛盾,必须改变现有的思路,不能用两个广延量之差来确定 ϵ_s .因为 ϵ_s 是内含量,应该先建立起计算 ϵ_s 的新公式,此公式中的各项都是内含量,与 N 无关,不像(1)式中的各项都是广延量.这样一来,所有的计算都是算内含量,即使相对误差大一些,其绝对误差也比 ϵ_s 小得多,由此求得的孤子激发能才可信.本文将推导出计算 ϵ_s 的新公式,使其只包含内含量.

现有的各种理论除了上述问题之外,还存在另一个缺点,他们都是用 Hubbard 模型来描述电子相互作用.文献[5]指出,Hubbard 模型对窄能带体系是好的近似,由于高分子的能带很宽,不符合应用 Hubbard model 的条件,此时,非对角电子关联(键电荷的相互作用)有重要的作用,而 Hubbard model 只包含了对角电子关联(格点电荷的相互作用).因此需要用屏蔽库仑势来描述电子相互作用,它包含了对角和非对角关联.

2 理论方法

文献[5]详细阐述了应用相关基函数(CBF)理论计算二聚化体系和孤子体系总能量的方法.如果用求得的孤子体系的总能量和二聚化体系的总能量直接相减,就是前面所提到的广延量相减的方法.其结果的可靠性很难保证.有必要发展新的理论方法来解决这一矛盾.

首先分析一下孤子和反孤子的拓扑结构.孤子和反孤子是简并二聚化基态 A 相和 B 相连接时所形成的拓扑扭结.左边是 A 相右边是 B 相的称为孤子;左边是 B 相右边是 A 相的称为反孤子.对于孤子和反孤子,其晶格畸变主要是在孤子和反孤子的中心附近.

畸变的范围就是文献[5]所研究的孤子宽度 $2\xi_0$.离中心足够远时($na \gg 2\xi_0$),晶格畸变消失,恢复为二聚化结构.因此在远离孤子中心的区域,带有孤子的键结构与二聚化基态的键结构是相同的.在这些区域内,两者的能量相同,可以使它们相互抵消.在抵消以后,只留下孤子中心的部分,这部分与链长无关,其能量就是内含量.

对于孤子而言,其左边是二聚化的 A 相,右边是二聚化的 B 相,二聚化 A 相和 B 相的能量是相同的.如果将孤子结构的左边和二聚化的 A 相相减,孤子的右边和二聚化的 B 相相减,相减后就只剩下孤子中心附近的贡献,它不再与链长有关.

要实现这一想法,就要将体系的总能量在坐标空间展开,一旦总能量能写成空间的积分形式,就能使孤子中心范围之外的能量相互抵消,CBF 方法正好符合这一要求.

根据 CBF 理论,体系的总能量为

$$E = E_b + E_{es} + E_{ex} + T + E_{el}, \quad (2)$$

式中 E_b 是单电子能量之和, E_{el} 是晶格的弹性能, E_{es} , E_{ex} 和 T 分别是电子相互作用引起

的静电能、交换能和关联能,其表达式为

$$E_{es} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{1} [P(\mathbf{1}) - n_0] \int d\mathbf{2} [P(\mathbf{2}) - n_0] v(\mathbf{12}), \quad (3)$$

$$E_{ex} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{1} P(\mathbf{1}) \int d\mathbf{2} P(\mathbf{2}) [g(\mathbf{12}) - 1] v(\mathbf{12}), \quad (4)$$

$$T = T_3 + T_{41} + T_{42} + T_{43}, \quad (5)$$

$$T_3 = \frac{\hbar^2}{8m} \int d\mathbf{1} P(\mathbf{1}) \int d\mathbf{2} P(\mathbf{2}) g(\mathbf{12}) (\nabla_1 u_{12})^2, \quad (6)$$

$$T_{41} = \frac{\hbar^2}{8m} \int d\mathbf{1} P(\mathbf{1}) \int d\mathbf{2} P(\mathbf{2}) \int d\mathbf{3} P(\mathbf{3}) g(\mathbf{12}) g(\mathbf{13}) (\nabla_1 u_{12}) \cdot (\nabla_1 u_{13}), \quad (7)$$

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

$$T_{43} = \frac{\hbar^2}{8m} \int d\mathbf{1} P(\mathbf{1}) \int d\mathbf{2} P(\mathbf{2}) \int d\mathbf{3} P(\mathbf{3}) \int d\mathbf{4} P(\mathbf{4}) h(\mathbf{14}) h(\mathbf{24}) h(\mathbf{34}) (\nabla_1 u_{12}) \cdot (\nabla_1 u_{13}). \quad (9)$$

由这些公式可见,能量已在坐标空间展开,就可实现上述的想法.

对于静电能部分((3)式),若代入带有孤子的电荷密度 $P^S(\mathbf{1})$,就是激发起孤子后的静电能;若代入二聚化的电荷密度 $P^D(\mathbf{1})$,就是二聚化基态的静电能.这两者都是广延量,它们都随链长而线性增加.但是将孤子的左半部与二聚化的 A 相相减,孤子的右半部与二聚化的 B 相相减,远离孤子中心部分的能量就消去了,其差就是静电能对孤子激发能的贡献,它就是内含量,所以此贡献为

$$\begin{aligned} \epsilon_{es} = & \frac{1}{2} \int_L d\mathbf{1} \left\{ \int d\mathbf{2} [P^S(\mathbf{1}) - n_0] v(\mathbf{12}) [P^S(\mathbf{2}) - n_0] \right. \\ & \left. - \int d\mathbf{2} [P_A^D(\mathbf{1}) - n_0] v(\mathbf{12}) [P_A^D(\mathbf{2}) - n_0] \right\} \\ & + \frac{1}{2} \int_R d\mathbf{1} \left\{ \int d\mathbf{2} [P^S(\mathbf{1}) - n_0] v(\mathbf{12}) [P^S(\mathbf{2}) - n_0] \right. \\ & \left. - \int d\mathbf{2} [P_B^D(\mathbf{1}) - n_0] v(\mathbf{12}) [P_B^D(\mathbf{2}) - n_0] \right\} \\ & + \delta_{es}, \end{aligned} \quad (10)$$

其中 $\int_L d\mathbf{1}$ 和 $\int_R d\mathbf{1}$ 分别为对孤子左半部分和右半部分积分, $P^S(\mathbf{1})$ 为孤子体系的电子密度, $P_A^D(\mathbf{1})$ 和 $P_B^D(\mathbf{1})$ 分别是二聚化 A 相和 B 相的电子密度, δ_{es} 是为了消除电子密度不均匀性给计算带来的误差而引入的附加项.由于孤子结构和二聚化结构的对称性,对孤子左边和右边积分的结果应该相等.因此(10)式可写为

$$\begin{aligned} \epsilon_{es} = & \int_L d\mathbf{1} \left\{ \int d\mathbf{2} [P^S(\mathbf{1}) - n_0] v(\mathbf{12}) [P^S(\mathbf{2}) - n_0] \right. \\ & \left. - \int d\mathbf{2} [P_A^D(\mathbf{1}) - n_0] v(\mathbf{12}) [P_A^D(\mathbf{2}) - n_0] \right\} + \delta_{es}, \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \delta_{es} = & \int_{-a/2}^0 d\mathbf{1} \int d\mathbf{2} [P_A^D(\mathbf{1}) - n_0] v(\mathbf{12}) [P_A^D(\mathbf{2}) - n_0] \\ & - \frac{1}{2} \int_{-a/2}^{a/2} d\mathbf{2} [P_A^D(\mathbf{1}) - n_0] v(\mathbf{12}) [P_A^D(\mathbf{2}) - n_0]. \end{aligned} \quad (12)$$

同理可得交换能对孤子激发能的贡献为

$$\begin{aligned} \epsilon_{\text{ex}} = & \int_{\text{L}} d\mathbf{1} \left\{ \int d\mathbf{2} P^{\text{S}}(\mathbf{1}) P^{\text{S}}(\mathbf{2}) [g^{\text{S}}(\mathbf{12}) - 1] v(\mathbf{12}) \right. \\ & \left. - \int d\mathbf{2} P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{1}) P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{2}) [g_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{12}) - 1] v(\mathbf{12}) \right\} + \delta_{\text{ex}}, \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \delta_{\text{ex}} = & \int_{-a/2}^0 d\mathbf{1} \int d\mathbf{2} P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{1}) P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{2}) [g_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{12}) - 1] v(\mathbf{12}) \\ & - \frac{1}{2} \int_{-a/2}^{a/2} d\mathbf{1} \int d\mathbf{2} P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{1}) P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{2}) [g_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{12}) - 1] v(\mathbf{12}). \end{aligned} \quad (14)$$

关联能对孤子激发能的贡献为

$$\begin{aligned} \epsilon_{\text{T}_3} = & \frac{\hbar^2}{4m} \int_{\text{L}} d\mathbf{1} \left\{ \int d\mathbf{2} P^{\text{S}}(\mathbf{1}) P^{\text{S}}(\mathbf{2}) g^{\text{S}}(\mathbf{12}) (\nabla_1 u_{12})^2 \right. \\ & \left. - \int d\mathbf{2} P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{1}) P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{2}) g_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{12}) (\nabla_1 u_{12})^2 \right\} + \delta_{\text{T}_3}, \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \delta_{\text{T}_3} = & \frac{\hbar^2}{4m} \left\{ \int_{-a/2}^0 d\mathbf{1} \int d\mathbf{2} P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{1}) P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{2}) g_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{12}) (\nabla_1 u_{12})^2 \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \int_{-a/2}^{a/2} d\mathbf{1} \int d\mathbf{2} P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{1}) P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{2}) g_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{12}) (\nabla_1 u_{12})^2 \right\}, \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \epsilon_{\text{T}_{41}} = & \frac{\hbar^2}{4m} \int_{\text{L}} d\mathbf{1} \left\{ \int d\mathbf{2} \int d\mathbf{3} P^{\text{S}}(\mathbf{1}) P^{\text{S}}(\mathbf{2}) P^{\text{S}}(\mathbf{3}) \right. \\ & \times g^{\text{S}}(\mathbf{12}) g^{\text{S}}(\mathbf{13}) (\nabla_1 u_{12}) \cdot (\nabla_1 u_{13}) \\ & - \int d\mathbf{2} \int d\mathbf{3} P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{1}) P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{2}) P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{3}) \\ & \times g_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{12}) g_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{13}) (\nabla_1 u_{12}) \cdot (\nabla_1 u_{13}) \left. \right\} + \delta_{\text{T}_{41}}, \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \delta_{\text{T}_{41}} = & \frac{\hbar^2}{4m} \left\{ \int_{-a/2}^0 d\mathbf{1} \int d\mathbf{2} \int d\mathbf{3} P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{1}) P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{2}) P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{3}) \right. \\ & \times g_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{12}) g_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{13}) (\nabla_1 u_{12}) \cdot (\nabla_1 u_{13}) \\ & - \frac{1}{2} \int_{-a/2}^{a/2} d\mathbf{1} \int d\mathbf{2} \int d\mathbf{3} P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{1}) P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{2}) P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{3}) \\ & \times g_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{12}) g_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{13}) (\nabla_1 u_{12}) \cdot (\nabla_1 u_{13}) \left. \right\}, \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \epsilon_{\text{T}_{42}} = & \frac{\hbar^2}{4m} \int_{\text{L}} d\mathbf{1} \left\{ \int d\mathbf{2} \int d\mathbf{3} P^{\text{S}}(\mathbf{1}) P^{\text{S}}(\mathbf{2}) P^{\text{S}}(\mathbf{3}) \right. \\ & \times h^{\text{S}}(\mathbf{23}) (h^{\text{S}}(\mathbf{12}) + g^{\text{S}}(\mathbf{12})) (\nabla_1 u_{12}) \cdot (\nabla_1 u_{13}) \\ & - \int d\mathbf{2} \int d\mathbf{3} P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{1}) P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{2}) P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{3}) \\ & \times h_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{23}) (h_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{12}) + g_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{12})) (\nabla_1 u_{12}) \cdot (\nabla_1 u_{13}) \left. \right\} + \delta_{\text{T}_{42}}, \end{aligned} \quad (19)$$

$$\delta_{\text{T}_{42}} = \frac{\hbar^2}{4m} \left\{ \int_{-a/2}^0 d\mathbf{1} \int d\mathbf{2} \int d\mathbf{3} P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{1}) P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{2}) P_{\text{A}}^{\text{D}}(\mathbf{3}) \right.$$

$$\begin{aligned} & \times h_A^D(23)(h_A^D(12) + g_A^D(12))(\nabla_1 u_{12}) \cdot (\nabla_1 u_{13}) \\ & - \frac{1}{2} \int_{-a/2}^{a/2} d1 \int d2 \int d3 P_A^D(1) P_A^D(2) P_A^D(3) \\ & \times h_A^D(23)(h_A^D(12) + g_A^D(12))(\nabla_1 u_{12}) \cdot (\nabla_1 u_{13}) \Big\}, \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \epsilon_{T_{43}} &= \frac{\hbar^2}{4m} \int_L d1 \Big\{ \int d2 \int d3 \int d4 P^S(1) P^S(2) P^S(3) P^S(4) \\ & \times h^S(14) h^S(24) h^S(34) (\nabla_1 u_{12}) \cdot (\nabla_1 u_{13}) \\ & - \int d2 \int d3 \int d4 P_A^D(1) P_A^D(2) P_A^D(3) P_A^D(4) \\ & \times h_A^D(14) h_A^D(24) h_A^D(34) (\nabla_1 u_{12}) \cdot (\nabla_1 u_{13}) \Big\} + \delta_{T_{43}}, \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \delta_{T_{43}} &= \frac{\hbar^2}{4m} \Big\{ \int_{-a/2}^0 d1 \int d2 \int d3 \int d4 P_A^D(1) P_A^D(2) P_A^D(3) P_A^D(4) \\ & \times g_A^D(12) g_A^D(13) (\nabla_1 u_{12}) \cdot (\nabla_1 u_{13}) \\ & - \frac{1}{2} \int_{-a/2}^{a/2} d1 \int d2 \int d3 \int d4 P_A^D(1) P_A^D(2) P_A^D(3) P_A^D(4) \\ & \times h_A^D(14) h_A^D(24) h_A^D(34) (\nabla_1 u_{12}) \cdot (\nabla_1 u_{13}) \Big\}. \end{aligned} \quad (22)$$

在这些表达式中, 远离孤子中心的区域都没有贡献, 所以这些量都是内含量, 而孤子的激发能 ϵ_s 就是这些部分之和

$$\begin{aligned} \epsilon_s &= \sum_{\text{occ}} (\epsilon_k^S - \epsilon_k^D) + \epsilon_{es} + \delta_{es} \epsilon_{ex} + \delta_{ex} + \epsilon_{T_3} + \delta_{T_3} + \epsilon_{T_{41}} + \delta_{T_{41}} \\ & + \epsilon_{T_{42}} + \delta_{T_{42}} + \epsilon_{T_{43}} + \delta_{T_{43}} + (E_{el}^S - E_{el}^D). \end{aligned} \quad (23)$$

此式中的所有项都是内含量, 这就达到了我们的目标, 建立了用内含量来计算孤子激发能的公式。

3 结果与讨论

为了从数值上说明上述理论方法的合理性, 我们计算含有 64 格点的闭链在激发出孤子对 $S^+ \bar{S}^-$ 后和在二聚化基态时电子密度的差值, 其孤子和反孤子的中心分别位于第 0 和第 32 个格点上, 由于对称性, 链的另外一半没有画出(图 1). 从图 1 显示出, 两者的差别集中在孤子和反孤子的中心附近, 在远离孤子中心的区域其值很快衰减为零, 同样, 关联函数的差别也是如此, 由于其差别比起电子密度要小得多, 在此我们没有画出. 因此作为电子密度和关联函数的能量在远离孤子中心的区域其差别也就趋近于零, 从而对孤子激发能的贡献很小, 因此电子关联对孤子激发能的贡献主要集中在孤子和反孤子的中心附近, 其他区域在计算过程中可以忽略. 这和我们前面的分析相符.

在计算孤子激发能的过程中, 我们仍应用文献[5]中所选定的参数. 用上述计算方法得到孤子对 $S^+ \bar{S}^-$ 在不同的电子相互作用强度 U 和屏蔽系数 β 时的激发能(图 2). 从图 2

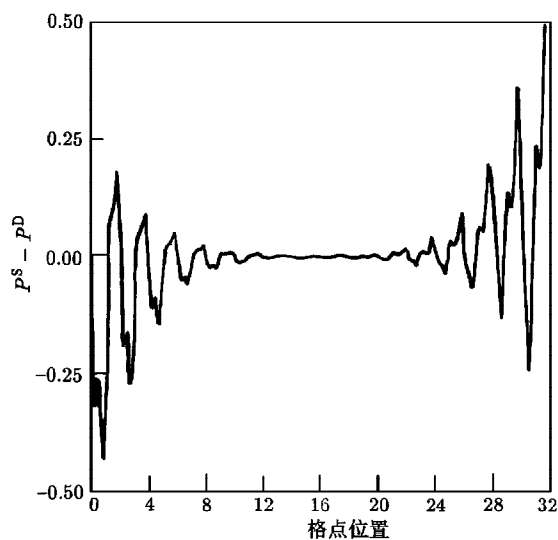


图1 体系激发出孤子后和二聚化基态时电子密度的差异

有孤子的成分,但由于其含量太少而不能发挥主导作用.电子-空穴对的激发能也随电子相互作用而变化,文献[6,7]详细计算了电子相互作用对电子-空穴对的影响,电子-空穴激发能可用光学能隙来度量,其定义如下^[4]:

$$E_g = E'_d(N-1) + E'_d(N+1) - 2E_d(N), \quad (24)$$

其中 $E'_d(N-1)$ 和 $E'_d(N+1)$ 分别是二聚化状态下体系减少一个电子和增加一个电子时的能量, $E_d(N)$ 是中性体系二聚化状态的能量.当屏蔽不太强时 ($\beta < 4$), 光学能隙也随电子相互作用强度 U 的增加而增加^[6], 其增加的幅度还超过了孤子激发能的幅度.图3给

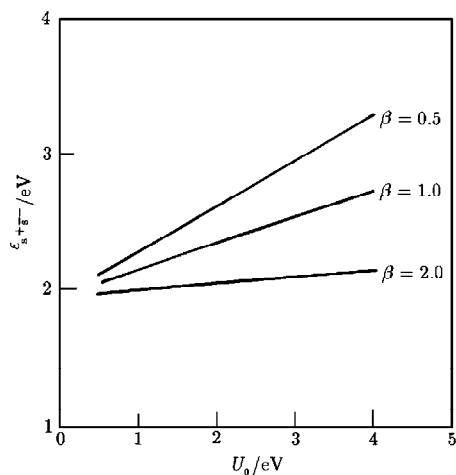


图2 不同电子相互作用强度和屏蔽常数下正反孤子对的激发能

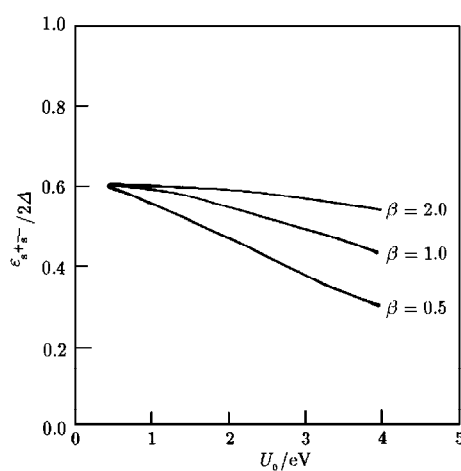


图3 不同电子相互作用强度和屏蔽常数下正反孤子对的激发能与光学能隙的比

可以看到,随着电子相互作用强度的增大,孤子对 S^+S^- 的激发能也随之增加.该结果表明,电子相互作用使得激发一对孤子的阈值变大,在相同的电子相互作用强度下,强屏蔽时较之于弱屏蔽时孤子对的激发能要降低.以上从激发能的角度讨论了电子相互作用对孤子元激发的影响,但要说明孤子在导电聚合物中能否成为起主要作用的元激发,还要将孤子激发能和电子-空穴的激发能进行比较,其比值越小说明孤子在导电聚合物的元激发中占有的比重越高,越能发挥主导作用,一旦孤子的激发能超过了电子或空穴的激发能,虽然在各种元激发中仍

出了孤子对激发能与体系的光学能隙相比较的结果.随着电子相互作用强度 U 的增大,孤子激发能和光学能隙的比值变小,这意味着和电子-空穴元激发相比,孤子元激发在数目上占有更高的比例.另外,在强屏蔽体系中孤子激发能和电子-空穴激发能的比值高于弱屏蔽体系.因此,孤子理论更适合于描述电子相互作用较强而屏蔽较弱的体系.

- [1] D.Campbell *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **52**(1984),1717.
- [2] V.Kuprievich, *Phys. Rev.*, **B40**(1989),3882.
- [3] M.Grabowski *et al.*, *Phys. Rev.*, **B31**(1985),7850.
- [4] W.K.Wu and S.Kivelson, *Phys. Rev.*, **B33**(1986),8546.
- [5] 马允胜、吴长勤、孙 鑫等,物理学报 **46**(1997),353.
- [6] X.Sun *et al.*, *Phys. Rev.*, **B44**(1991),11042.
- [7] E.Jeckelmann, D.Baeriswyl, *Synthetic Metals*, **65**(1994),211.

ELECTRON-ELECTRON INTERACTION AND SOLITON EXCITATION(II)

THE EFFECT OF ELECTRON CORRELATION ON THE CREATION ENERGY 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 YE HONG-JUAN

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

(Received 21 November 1995)

ABSTRACT

Does electron interaction enhance or reduce the creation energy of soliton? The results based on different theories conflict with each other. In this paper, the reason for such conflict has been revealed and a new method is proposed to calculate the creation energy of soliton (only intensive quantities are involved in calculation). Our result shows: the electron interaction enhances the creation energy of soliton, but the enhancement of the soliton is less than that of e-h pair.

PACC: 7150; 7145G