

电子与双声子相互作用对 Holstein 极化子的影响^{*}

任学藻^{1)†} 廖旭¹⁾ 刘涛²⁾ 汪克林²⁾

1) 西南科技大学理学院, 绵阳 621010

2) 中国科学技术大学近代物理系, 合肥 230026

(2005 年 10 月 25 日收到, 2006 年 1 月 11 日收到修改稿)

在量子化的 Holstein 模型的基础上再考虑电子与双声子相互作用, 运用相干态展开法, 得到了一维分子晶体模型处于基态的极化子满足的非线性薛定谔方程及其定态孤子解、基态能量、晶格位移.

关键词: 相干态, 极化子, 孤子, 非线性薛定谔方程

PACC: 6320K, 7138

1. 引言

在分子晶体介质中, 电子(或空穴)周围的晶格局域畸变形成定域的声子, 由于电子与定域声子的相互作用, 使电子(或空穴)的能量降低, 即晶格畸变提供一个使电子受束缚的势阱, 形成自陷态. 自陷的电子与其诱发的晶格畸变(定域声子)的这一耦合系统就是极化子. 近年来, 人们对电子与定域声子相互作用而形成小极化子的问题产生了浓厚的兴趣, 原因是它与当今的巨磁阻问题、高温超导问题、高聚物材料以及生命科学中的 DNA 问题等有着密切的关系. 对于这些问题人们常利用描述小极化子系统的 Holstein 模型^[1]去处理, 并取得很多有意义的结果^[2-11], 如非线性局域声子激发的动力学性质^[2]和小极化子能带结构^[5]等. 但是上述研究都是基于电子和单声子的相互作用过程, 回溯到讨论电子-声子作用的产生及量子化的过程, 我们知道当把电子与晶格粒子的相互作用势在离开平衡位置的邻域作展开时, 第 1 项是静止的晶格平衡位置分布产生的周期势, 而展开的一级位移项由于在平衡位置处, 相互作用势处于极值而为零, 所以如忽略三级以上的展开项, 只保留二级项并作量子化得到的就是单声子形式的电-声作用项. 实际上在电-声作用较强时, 离子对平衡位置的偏离已不是足够小, 这时, 只保留二级项已不够, 应将展开保留到三级项, 量子化后就会

出现双声子的电-声作用项^[15]. 在文献 [14, 15] 中曾研究了一维晶体中电子-声子耦合系统的一些双声子效应性质. 本文运用相干态展开法, 讨论这类包括电子-双声子耦合项的极化子满足的非线性方程及定态孤子解. 由此我们计算极化子孤子的峰宽、峰值、自陷态的晶格位移等物理量. 从计算的结果中可以清楚看出当相互作用越强时, 电子-双声子的作用会越大, 由此我们可以判断出在多弱的耦合强度范围内考虑简谐项对应的电子-单声子作用即可, 而在多强的耦合作用下就必须考虑进电子-双声子的作用过程.

2. 基态极化子方程

一维电子-双声子耦合系统的哈密顿量为^[14, 15]

$$H = -t \sum_i (c_i^+ c_{i+1} + c_i^+ c_{i-1}) + \omega \sum_i b_i^+ b_i + g \sum_i c_i^+ c_i (b_i + b_i^+) + g_2 \sum_i c_i^+ c_i (b_i b_i + b_i^+ b_i^+), \quad (1)$$

其中 c_i (c_i^+) 和 b_i (b_i^+) 分别是 Wannier 表象下格点坐标 i 上的(不考虑自旋)费米子(电子)和玻色子(声子)的湮没(产生)算符. 模型中第 1 项是在紧束缚近似下的电子在格点间的跃迁(hopping), t 是裸的跃迁积分, 第 2 项是声子能量, 第 3 项是电子与单声子的相互作用项, 第 4 项是电子与双声子耦合项.

^{*} 西南科技大学引进人才基金资助的课题.

[†] E-mail: rxz63@sohu.com

为简单起见,在本文中取如下的单位 $\hbar = a = 1$ (a 是晶格常数)。

由于相干态展开法在求解 Fröhlich 模型以及 Holstein 模型下的极化子问题时,已取得许多好的结果^[8-11],因此本文用变分法求解时也将系统的定态波函数合理地设成如下形式:

$$|\varphi\rangle = \sum_i \psi_i c_i^+ e^{\sum_l (a_l b_l^+ - \frac{1}{2} a_l^2)} |0\rangle, \quad (2)$$

(2) 式中 ψ_i 和 α_i 均为实数。

下面将波函数(2)式及哈密顿量(1)式代入定态薛定谔方程

$$H|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle, \quad (3)$$

在(3)式中左乘 $\langle\varphi|$,可以得到能量的本征值 E 为

$$\begin{aligned} E = 0 & \langle 0 | e^{\sum_l (a_l b_l^+ - \frac{1}{2} a_l^2)} \sum_i \psi_i c_i^+ c_i [-t \sum_i (c_i^+ c_{i+1} + c_i^+ c_{i-1}) \\ & + \omega \sum_i b_i^+ b_i + g \sum_i c_i^+ c_i (b_i + b_i^+) \\ & + g_2 \sum_i c_i^+ c_i (b_i b_i + b_i^+ b_i^+)] \\ & \times \sum_{i_2} \psi_{i_2} c_{i_2}^+ e^{\sum_l (a_l b_l^+ - \frac{1}{2} a_l^2)} |0\rangle / \sum_l \psi_l^2 \\ = & [-t \sum_i (\psi_i \psi_{i+1} + \psi_i \psi_{i-1}) + \omega \sum_i \alpha_i^2 \sum_l \psi_l^2 \\ & + g \sum_i 2\alpha_i \psi_i^2 + g_2 \sum_i 2\alpha_i^2 \psi_i^2] \sum_l \psi_l^2 \\ & \times 0 | e^{\sum_l (a_l b_l^+ - \frac{1}{2} a_l^2)} \cdot e^{\sum_l (a_l b_l^+ - \frac{1}{2} a_l^2)} |0\rangle \\ = & [-t \sum_i (\psi_i \psi_{i+1} + \psi_i \psi_{i-1}) + \omega \sum_i \alpha_i^2 \sum_l \psi_l^2 \\ & + g \sum_i 2\alpha_i \psi_i^2 + g_2 \sum_i 2\alpha_i^2 \psi_i^2] \sum_l \psi_l^2 \\ = & \frac{1}{\sum_l \psi_l^2} [-t \sum_i (\psi_i \psi_{i+1} + \psi_i \psi_{i-1}) \\ & + 2g \sum_i \alpha_i \psi_i^2 + 2g_2 \sum_i \alpha_i^2 \psi_i^2] \\ & + \omega \sum_i \alpha_i^2, \quad (4) \end{aligned}$$

为了计算基态能量和波函数,分别对(4)式中的参量 α_k 和 ψ_k 进行变分。

由变分条件

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha_k} = \frac{2g\psi_k^2}{\sum_l \psi_l^2} + \frac{4g_2\alpha_k\psi_k^2}{\sum_l \psi_l^2} + 2\omega\alpha_k = 0, \quad (5)$$

可得

$$\alpha_k = - \frac{g\psi_k^2}{\omega \sum_l \psi_l^2 + 2g_2\psi_k^2}, \quad (6)$$

再利用变分条件

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial \psi_k} = & - \frac{2\psi_k}{(\sum_l \psi_l^2)^2} [-t \sum_i (\psi_i \psi_{i+1} + \psi_i \psi_{i-1}) \\ & + 2g \sum_i \alpha_i \psi_i^2 + 2g_2 \sum_i \alpha_i^2 \psi_i^2] \\ & + \frac{1}{\sum_l \psi_l^2} [-2t (\psi_{k+1} + \psi_{k-1}) + 4g\alpha_k \psi_k \\ & + 4g_2\alpha_k^2 \psi_k] = 0, \quad (7) \end{aligned}$$

整理后得到

$$\begin{aligned} [-t (\psi_{k+1} + \psi_{k-1}) + 2g\alpha_k \psi_k + 2g_2\alpha_k^2 \psi_k] \sum_l \psi_l^2 \\ + [t \sum_i (\psi_i \psi_{i+1} + \psi_i \psi_{i-1}) - 2g \sum_i \alpha_i \psi_i^2 \\ - 2g_2 \sum_i \alpha_i^2 \psi_i^2] \psi_k = 0. \quad (8) \end{aligned}$$

将(6)式代入(8)式得

$$\begin{aligned} [-t (\psi_{k+1} + \psi_{k-1})] \sum_l \psi_l^2 \\ - \frac{2g^2}{\omega \sum_l \psi_l^2 + 2g_2\psi_k^2} \psi_k^3 \\ + \frac{2g^2 g_2}{(\omega \sum_l \psi_l^2 + 2g_2\psi_k^2)^2} \psi_k^5 \\ + \left[t \sum_i (\psi_i \psi_{i+1} + \psi_i \psi_{i-1}) \right. \\ \left. + \sum_i \frac{2g^2}{\omega \sum_l \psi_l^2 + 2g_2\psi_i^2} \psi_i^4 \right. \\ \left. - \sum_i \frac{2g^2 g_2}{(\omega \sum_l \psi_l^2 + 2g_2\psi_i^2)^2} \psi_i^6 \right] \psi_k = 0. \quad (9) \end{aligned}$$

为方便起见引入常数

$$B = \frac{g^2}{\omega t}, B_2 = \frac{2g_2}{\omega}, \quad (10)$$

考虑到函数 ψ_i 在整个分子链上有缓慢变化的行为,对(9)式采用连续近似,因为 $\psi_{k+1} + \psi_{k-1} = (\psi_{k+1} - \psi_k) - (\psi_k - \psi_{k-1}) + 2\psi_k$,所以在连续化后, $\psi_{k+1} + \psi_{k-1}$ 等价于

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + 2\psi.$$

即

$$\psi_{k+1} + \psi_{k-1} \Rightarrow \frac{d^2 \psi}{dx^2} + 2\psi, \quad (11)$$

再利用归一化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^2 dx = 1. \quad (12)$$

将(10)(11)(12)式代入(9)式,可得

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2B}{1+B_2 \psi^2} \psi^3 - \frac{BB_2}{(1+B_2 \psi^2)^2} \psi^5 \\ & - \psi \left[\int_{-\infty}^{\infty} \psi \left(\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2B}{1+B_2 \psi^2} \psi^3 \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{BB_2}{(1+B_2 \psi^2)^2} \psi^5 \right) dx \right] = 0. \end{aligned} \quad (13)$$

(13)式就是极化子基态满足的带有积分形式的非线性方程.为了简化(13)式,若令

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2B}{1+B_2 \psi^2} \psi^3 - \frac{BB_2}{(1+B_2 \psi^2)^2} \psi^5 = C' \psi, \\ & C' \text{ 为常数.} \end{aligned} \quad (14)$$

再将(14)式代入(13)式,并利用归一化条件(12)式,可以再次得到(14)式,所以(13)式可以化为普通的非线性方程(14)式.这就说明该式中的假设是自洽的.显然在(14)式中,若令 $B_2 = 0$,即不考虑电子与双声子的相互作用,(13)式就成为标准的非线性薛定谔方程,

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + 2B\psi^3 = C\psi, \quad C \text{ 为常数.} \quad (15)$$

3. $B \neq 0, B_2 = 0$ 情形

3.1. 基态孤子解

这时(15)式有精确解析解,其解为

$$\psi = A \operatorname{sech} \mu x, \quad (16)$$

其中 A 是孤子的峰值, μ 是孤子的峰宽.易得

$$C = -\frac{2\mu A^2}{3} + \frac{8BA^4}{3\mu}, \quad (17)$$

及

$$\mu = \frac{B}{2} \text{ 和 } A = \frac{\sqrt{B}}{2}, \quad (18)$$

将(18)式代入(17)式得 $C = \frac{B^2}{4}$,因此基态孤子的解为

$$\psi = \frac{\sqrt{B}}{2} \operatorname{sech} \frac{B}{2} x. \quad (19)$$

3.2. 基态能量 E

将(6)式代入(4)式并采用连续近似和归一化条件得

$$E = -t \int_{-\infty}^{\infty} \psi \left(\frac{d^2 \psi}{dx^2} + 2\psi \right) dx - \frac{g^2}{\omega} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^4 dx, \quad (20)$$

将(19)式代入(20)式,可得

$$\begin{aligned} E &= -t \frac{B^3}{16} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\operatorname{sech}^2 \frac{B}{2} x - 2 \operatorname{sech}^4 \frac{B}{2} x \right) dx \\ &\quad - 2t - \frac{B^2 g^2}{16\omega} \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}^4 \frac{B}{2} x dx \\ &= -t \frac{B^2}{4} + t \frac{B^2}{3} - 2t - \frac{Bg^2}{6\omega} = -2t - \frac{B^2}{12}. \end{aligned} \quad (21)$$

3.3. 晶格位移 u_i

利用关系式

$$b = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi} \right), \quad (22)$$

$$b^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right), \quad (23)$$

而

$$u = \frac{\xi}{\sqrt{M\omega}} \text{ (这里 } \hbar = 1 \text{)}, \quad (24)$$

所以

$$u = \frac{1}{\sqrt{2M\omega}} (b^+ + b), \quad (25)$$

$$\begin{aligned} u_i &= 0 | e^{\sum_l (a_l b_l - \frac{1}{2} a_l^2)} \sum_{i_1} \psi_{i_1} c_{i_1} \frac{1}{\sqrt{2M\omega}} (b_i + b_i^+) \\ &\quad \times \sum_{i_2} \psi_{i_2} c_{i_2}^+ e^{\sum_l (a_l b_l^+ - \frac{1}{2} a_l^2)} | 0 / \sum_l \psi_l^2 \\ &= \sqrt{\frac{2}{M\omega}} \alpha_i = \sqrt{\frac{2}{M\omega}} \frac{gB}{4\omega} \operatorname{sech}^2 \frac{B}{2} x. \end{aligned} \quad (26)$$

在仅考虑电子与单声子相互作用时,我们得到的基态孤子解,基态能量与晶格位移与 Holstein^[11]所得的结果完全一致.

4. $B \neq 0, B_2 \neq 0$ 情形

4.1. 基态孤子解

这时方程(14)式没有精确解析解,只能求近似解,下面我们用函数级数展开法^[16-20]来求解.设其解为

$$\psi = \sum_k b_k \operatorname{sech}^k(\mu x). \quad (27)$$

首先将(14)式变形为

$$\begin{aligned} & (1+B_2 \psi^2)^2 \frac{d^2 \psi}{dx^2} - (1+B_2 \psi^2)^2 C' \psi \\ & + 2B(1+B_2 \psi^2) \psi^3 - BB_2 \psi^5 = 0, \end{aligned} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} & (1+B_2 \psi^2)^2 \frac{d^2 \psi}{dx^2} - C' \psi + \mathcal{X} (B - B_2 C') \psi^3 \\ & + B_2 (B - B_2 C') \psi^5 = 0, \end{aligned} \quad (29)$$

将方程 (27) 式代入 (29) 式, 比较 $\operatorname{sech}^k \mu x$ 的系数, 找出递推关系, 就可以确定出所有的 b_k 与 b_1 的关系, 其中 b_1 和 μ 是待定的. 为推导方便起见, 引入辅助函数

$$F_1^k = \sum_{i+j+l=k} l^2 b_i b_j b_l, \quad (30)$$

$$F_2^k = \sum_{i+j+l=k-2} (l+1) b_i b_j b_l, \quad (31)$$

$$F_3^k = \sum_{i+j+l=k} b_i b_j b_l, \quad (32)$$

$$F_4^k = \sum_{i+j+m+n+l=k} l^2 b_i b_j b_m b_n b_l, \quad (33)$$

$$F_5^k = \sum_{i+j+l+m+n=k-2} (l+1) b_i b_j b_m b_n b_l, \quad (34)$$

$$F_6^k = \sum_{i+j+m+n+l=k} b_i b_j b_m b_n b_l, \quad (35)$$

$$F_7^k = \sum_{i+j=k} b_i b_j, \quad (36)$$

其中, 由 $\operatorname{sech}(\mu x)$ 项前的系数为零可得方程

$$b_1(\mu^2 - C') = 0, \quad (37)$$

因此要得到非零解, 就必然有

$$C' = \mu^2, \quad (38)$$

这样 $\operatorname{sech}^k \mu x$ 项前的系数方程为

$$\begin{aligned} & (k^2 - 1)b_k - (k-1)(k-2)b_{k-2} + 2B_2(F_1^k - F_2^k) \\ & + B_2^2(F_4^k - F_5^k) + 2\left(\frac{B}{\mu^2} - B_2\right)F_3^k \\ & + B_2\left(\frac{B}{\mu^2} - B_2\right)F_6^k = 0. \end{aligned} \quad (39)$$

由此可解出 b_k 与 b_1 的关系表达式, 在这里给出几个低阶的关系式

$$b_3 := -\frac{b(k - \mu^2 + bl^2 B)}{4\mu^2},$$

$$B_5 := \frac{b(k - 3bl^2 B\mu^2 + bl^4 B^2 + 2bl^4 B2\mu^2 B + 2\mu^4)}{16\mu^4},$$

$$\begin{aligned} B_7 := & -b(k - 15bl^4 B^2 \mu^2 + 3bl^6 B^3 + 27bl^2 B\mu^4 \\ & - 30bl^4 B2\mu^4 B + 16bl^6 B2^2 \mu^4 B - 15\mu^6 \\ & + 18B2bl^6 \mu^2 B^2)(192\mu^6). \end{aligned}$$

需要指出以下几点 (1) 为了保证级数解的收敛性, 显然要求在 k 较大时, b_k 必须趋于零 (2) ψ 必须满足归一化条件 (3) 要求解的能量最低. 这就要求选定恰当的变量 b_1 和 μ 使得由此得到的级数解满足上述的 3 个条件. 为此本文用模拟退火法在满足这些条件的情况下来求解这一问题, 当然具体计算时只能计算级数的有限阶 k , 一般情况下当 k 值取的不够大时, 求得的 b_1 和 μ 值会随着 k 而变化, 但当 k 足够大后, b_1 和 μ 趋于一确定值. 换句话说, k 值足够大时, 得到的 b_1 和 μ 以及相应的级数解就

可以达到所需要的精度, 要得到更为精确的解, 可以再增大 k 来计算.

4.2. 基态能量 E'

与仅考虑电子与单声子的情况相似, 将 (6) 式代入 (4) 式并采用连续近似和归一化条件得

$$\begin{aligned} \frac{E'}{t} = & -2 - \int \phi \left(\frac{d^2 \phi}{dx^2} + \frac{2B}{1 + B_2 \phi^2} \phi^3 \right. \\ & \left. - \frac{BB_2}{(1 + B_2 \phi^2)^2} \phi^5 \right) dx \\ & + B \int \frac{\phi^4}{(1 + B_2 \phi^2)^2} dx. \end{aligned} \quad (40)$$

利用 (14) 式、(38) 式和归一化条件得

$$E' = -2t - \mu^2 t + Bt \int \frac{\phi^4}{(1 + B_2 \phi^2)^2} dx. \quad (41)$$

4.3. 晶格位移 u_i

同理可得

$$u_i = \sqrt{\frac{2}{M\omega}} \alpha_i = -\sqrt{\frac{2}{M\omega}} \frac{g\psi_i^2}{\omega(1 + B_2 \psi_i^2)}. \quad (42)$$

利用 (27) (41) (42) 式就可以计算基态解、基态能量和晶格位移.

下面以 $B = 1$ 为例, 给出不同 B_2 对应的基态解、基态能量和晶格位移.

当 $B_2 = 0$ 时, 给出在上一节得到的解析结果.

当 $B_2 \neq 0$ 时, 取 $t = 1$, 极化子基态能量随 B_2 的关系如图 1 所示, 可以看出当 $B_2 < 0$ 时, 考虑双声子与电子的作用后, 基态能量更低一些.

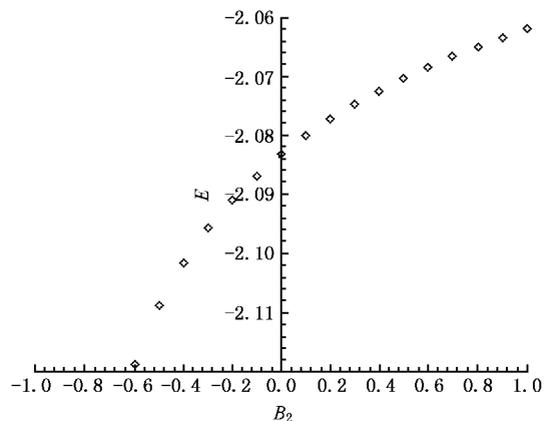


图 1

下面的表 1 中给出了在 $B_2/B = 0.1$ 时, 不同 B 值对应的基态能量, 取 $t = 1$.

表 1

	$B = 0.25$	$B = 1.0$	$B = 2.0$	$B = 3.0$
E	-2.00520833	-2.08333333	-2.33333333	-2.75000000
E'	-2.00519534	-2.08019182	-2.29018836	-2.57121327
$(E' - E)E$	$-0.6498077933 \times 10^{-5}$	$-0.1507934402 \times 10^{-2}$	$-0.1849068557 \times 10^{-1}$	$-0.6501334545 \times 10^{-1}$

由上面的表 1 可以清楚看出在相互作用越来越强时,电子-双声子的作用会越来越大,在 $B \leq 1.0$ 时,只需考虑简谐次对应的电子-单声子作用即可,而在 $B > 1.0$ 就必须考虑进电子-双声子的作用过程,这应证了引言中的结论.

我们从量子化的 Holstein 模型出发,运用相干态展开方法,采用连续近似条件,得到了处于基态的极化子解.因此相干态展开方法在处理与极化子有关的物理问题中是一种非常有效的方法.

- [1] Holstein T 1959 *Annals of Physics* **8** 325
- [2] Roncaglia Roberto , Tsironis George P 1998 *Physica D* **113** 318
- [3] Tekic J , Ivic Z , Zekovic S *et al* 1999 *Phys. Rev. E* **60** 821
- [4] Kornilovitch P E 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 1551
- [5] Wellein G , Fehske H 1997 *Phys. Rev. B* **56** 4513
- [6] Hennig D 1998 *Physica D* **113** 196
- [7] Bonca J , Trugman S A 1999 *Phys. Rev. B* 1999 **60** 1633
- [8] Wang K L , Chen Q H , Wan S L 1994 *Phys. Lett. A* **185** 216
- [9] Chen Q H , Fang M H , Zhang Q R *et al* 1996 *Phys. Rev. B* **53** 11296
- [10] Wan S L , Wang K L 2000 *Chin. Phys. Lett.* **17** 129
- [11] Ren Q B , Chen Q H 2005 *Chin. Phys. Lett.* **22** 2914
- [12] Xu Zongrong , Tian Zhiyue 1995 *Acta. Phys. Sin.* **44** 1467 (in Chinese) [许宗荣、田之悦 1995 物理学报 **44** 1467]
- [13] Wang Kelin , Chen Qinghu , Wan Shaolong 1994 *Acta. Phys. Sin.* **43** 433 (in Chinese) [汪克林、陈庆虎、完绍龙 1994 物理学报 **43** 433]
- [14] Ivanov V A , Zhuravlev M Ye , Murayama Y , Nakajima S 1996 *JETP Lett.* **64** 148
- [15] Germal D Mahan 1990 *Many-Particle Physics* (Now York : Plenum Press) p. 33 34
- [16] Wang Kelin , Feng Mang , Wu Juhao 1995 *Phys. Rev. A* **52** 1419
- [17] Feng Mang , Wang Kelin 1995 *Phys. Lett. A* **197** 135
- [18] Feng M , Chen X L , Wu J H , Wang K L 1997 *J. Atom. and Mol. Phy.* **14** 23 (in Chinese) [冯 芒、陈小林、吴隼昊、汪克林 1997 原子与分子物理学报 **14** 23]
- [19] Feng M , Fang X M , Shi L , Zhu X W 1997 *J. Atom. and Mol. Phy.* **14** 473 (in Chinese) [冯 芒、方细明、施 磊、朱熙文 1997 原子与分子物理学报 **14** 473]
- [20] Rongsheng Han , Kelin Wang , Xianlong Gao , Yi Wang 2001 *Physics Letters A* **285** 39

The influence of the electron and one pair of phonons interaction on Holstein polaron^{*}

Ren Xue-Zao[†] Liao Xu Liu Tao Wang Ke-Lin

(*College of Science , Southwest University of Science and Technology ,Mianyang 621010 ,China*)

(*Modern Physics of Science and Technology of China , Hefei 230026 ,China*)

(Received 25 October 2005 ; revised manuscript received 11 January 2006)

Abstract

This paper set out from Holstein model of the quantization , by means of the method of incoherent state expansion , get the non-Linear Schrödinger equation of the polaron in ground state of one-dimensional molecular crystal , and get the soliton solution of fixed state ,the ground state energy , the lattice displacement .

Keywords : incoherently state , polaron , soliton , the non-Linear Schrödinger equation

PACC : 6320K , 7138

^{*} Project supported by the Imported Talent Foundation of University of Science and Technology of Southwest (Grant No.053002).

[†] E-mail :rxz63@sohu.com