

КОЛЛЕКТИВНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ ВОЛН ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ В КВАЗИОДНОМЕРНЫХ СТРУКТУРАХ

М. В. Садовский

Рассматриваются колебания фазы параметра порядка в квазиодномерных системах, испытывающих пайерлсовский структурный переход. Вычисляется их спектр с учетом эффектов кулоновского взаимодействия волны зарядовой плотности (ВЗП) на различных цепочках и внутри одной цепочки. Показано, что взаимодействие ВЗП с заряженными примесями приводит к ее «пиннингу». Рассматриваются нелинейные возбуждения ВЗП солитонного типа. Взаимодействие ВЗП на соседних цепочках приводит к связыванию солитонов и антисолитонов в пары, играющие роль дефектов структуры ВЗП.

В последние годы наблюдается повышенный интерес к изучению свойств квазиодномерных систем, в частности систем, испытывающих пайерлсовский структурный переход [1]. Интерес этот стимулируется экспериментальным наблюдением пайерлсовского перехода в соединениях типа $K_2Pt(CN)_4Vr_{0.3}Zn_2O$ (KCP) [2-4] и TTF—TCNQ [5, 6], а также возможностью наблюдения аномальной проводимости, связанной с перемещением возникающей при переходе волны зарядовой плотности (ВЗП) [7-9]. Последнее свойство рассматриваемых систем оказывается тесно связанным с коллективными возбуждениями ВЗП [9, 10], которые активно изучаются экспериментально [11-12].

Настоящая работа посвящена рассмотрению спектра коллективных возбуждений ВЗП в низкотемпературной области на основе обобщений полуфеноменологической модели, предложенной в [13, 14]. Модель обобщается с чисто одномерного случая на квазиодномерный, изучается влияние примесей и эффектов соизмеримости. Рассматривается возможность существования новых ветвей спектра коллективных возбуждений солитонного типа в чисто одномерной модели с качественным учетом трехмерных и кулоновских эффектов.

Модель является достаточно общей, и основные результаты могут оказаться применимыми для ВЗП не пайерлсовского типа.

1. Формулировка модели и спектр возбуждений в линейном приближении

Рассмотрим квазиодномерную систему при температурах существенно ниже точки пайерлсовского перехода ($T_p \sim 120$ К для KCP [4], $T_p = 54$ К для TTF—TCNQ [6]). При этом в каждой цепочке существует отличный от нуля параметр порядка ВЗП

$$\text{Re } \Psi(x) = \text{Re} \{ \Delta \exp [iQx + \Phi] \}, \quad (1)$$

где Δ — амплитуда параметра порядка, связанная со щелью в спектре одноэлектронных возбуждений пайерлсовской фазы [1]; Φ — фаза параметра порядка, определяющая положение ВЗП относительно неподвижной системы координат [9]; $Q = 2p_F$, где p_F — импульс Ферми электронов, связанный с их линейной плотностью соотношением $p_F = (\pi/2)n$.

Коллективные возбуждения ВЗП соответствуют тому, что в (1) амплитуда и фаза $\Delta(xt)$ и $\Phi(xt)$ становятся функциями координаты и времени, отличными от их равновесных значений Δ и Φ . В дальнейшем рассматриваются только возбуждения фазы параметра порядка [14], которые в первом приближении могут быть рассмотрены независимо от амплитудных возбуждений [9] по крайней мере при достаточно низких температурах $T \ll T_p$. Более подробно этот вопрос рассмотрен в работе Бразовского и Дзялошинского [10]. Будет предполагаться, что $\Phi(xt)$ является достаточно плавной функцией координаты и времени.

Из вида (1) нетрудно понять [8, 14], что зависимость фазы ВЗП от времени означает перемещение волны вдоль цепочки со скоростью

$$v_1 = -\frac{1}{Q} \frac{\partial \Phi}{\partial t}. \quad (2)$$

Аналогично наличие пространственного градиента фазы означает локальную вариацию импульса Ферми электронов

$$\delta p_F = \frac{1}{2} \frac{\partial \Phi}{\partial x}; \quad (3)$$

тогда возбуждению $\Phi(xt)$ соответствует линейная плотность энергии

$$E = \frac{n_s}{2m} (\delta p_F)^2 + \frac{1}{2} m^* n_s v_s^2 = \frac{n_s m^*}{Q^2} \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} \right)^2 + \frac{s^2}{2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)^2 \right\}, \quad (4)$$

где n_s — линейная плотность электронов, перемещающихся вместе с ВЗП, m^* — эффективная масса, связанная с движением ВЗП [13, 14]; m — эффективная масса электрона в цепочке

$$s^2 = \frac{v_F^2}{mm^*}; \quad (5)$$

феноменологические параметры n_s и m^* должны быть определены из микроскопической теории и зависят от конкретной модели возникновения ВЗП. В простейшей теории пайерлсовского перехода при $T \ll T_p$ имеем [9, 13, 14]

$$\left. \begin{aligned} n_s &\approx n, \\ \frac{m^*}{m} &= 1 + \frac{4\Delta^2}{\lambda\omega_D^2} \approx \frac{4\Delta^2}{\lambda\omega_D^2}, \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

где n — полная линейная плотность электронов в цепочке, Δ — щель в электронном спектре при $T=0$, ω_D — характерная частота «затравочных» фононов ($\omega_D \sim \theta_D$ — дебаевской температуры), λ — безразмерная константа электрон-фононного взаимодействия. Обычно $m^* \gg m$, например для КСР $m^* \approx 10^3 m$ [11, 13].

Из [1, 4] следует эффективный лагранжиан ВЗП на изолированной цепочке

$$\mathcal{L}_0 = nm^* \frac{1}{Q^2} \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} \right)^2 - \frac{1}{2} s^2 \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)^2 \right\}. \quad (7)$$

Вывод подобного лагранжиана из микроскопической теории приведен в [10]. Отсюда следует стандартное волновое уравнение

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} - s^2 \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = 0, \quad (8)$$

совпадающее с учетом (2), (3) с гидродинамическим уравнением движения [14]

$$nm \frac{\partial v_s}{\partial t} = -n \frac{m}{m^*} \nabla^\mu, \quad (9)$$

где μ — химический потенциал (энергия Ферми) электронов, а фактор m/m^* определяет долю массы ВЗП, переносимую электронами. Спектр колебаний фазы ВЗП в сделанных приближениях имеет вид

$$\omega^2 = s^2 q^2, \quad (10)$$

что соответствует голдстоуновской моде Ли, Райса и Андерсона, отвечающей фрэлиховской «сверхпроводимости» в рассматриваемой модели [9].

Наша цель состоит в рассмотрении роли различных взаимодействий, не учитываемых нулевым лагранжианом (7). К таковым относятся прежде всего взаимодействие ВЗП на различных цепочках в квазиодномерной системе, роль кулоновских эффектов в одной цепочке и взаимодействие с заряженными примесями.

Пайерлсовская ВЗП соответствует модуляции плотности электронного заряда вдоль цепочки вида [9]

$$\rho(x) = ne \frac{\Delta}{\lambda E_F} \cos(Qx + \Phi), \quad (11)$$

так что эта цепочка создает вокруг себя электростатическое поле с потенциалом

$$\varphi(r_{\perp}, x) = 2ne \frac{\Delta}{\lambda E_F} \cos(Qx + \Phi) K_0(Qr_{\perp}), \quad (12)$$

где e — заряд электрона, E_F — фермиевская энергия цепочки, r_{\perp} — радиальное расстояние от цепочки $K_0(x)$ — модифицированная функция Бесселя. Соответственно в системе цепочек, образующих регулярную решетку в плоскости, ортогональной цепочкам с постоянной решетки $r_{\perp} = b$, возникает электростатическая энергия взаимодействия (на единицу длины системы)

$$U = nm^* \frac{1}{Q^2} \sum_n \sum_{\langle m \rangle} \omega_c^2 \cos(\Phi_n - \Phi_m), \quad (13)$$

$$\omega_c^2 = \omega_p^2 \left(\frac{\omega_p}{4E_F} \right)^2 \frac{(Qr_{\perp})^2}{2\pi\lambda\varepsilon_{\perp}} K_0(Qr_{\perp})|_{r_{\perp}=b}, \quad (14)$$

n, m определяют положение цепочек в плоской решетке, ω_p — плазменная частота электронов, ε_{\perp} — диэлектрическая проницаемость системы поперек цепочек. В (13) достаточно учесть взаимодействие ближайших соседей, поскольку $K_0(Qr_{\perp})$ экспоненциально мала при $Qr_{\perp} \gg 1$. Взаимодействие (13) приводит, в частности, к тому, что ВЗП на соседних цепочках выгодно выстроиться так, чтобы их фазы отличались на π , что и наблюдается на эксперименте в КСР [4].

Теперь лагранжиан системы приобретает вид

$$\mathcal{L} = nm^* \frac{1}{Q^2} \sum_n \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{\partial \Phi_n}{\partial t} \right)^2 - s^2 \left(\frac{\partial \Phi_n}{\partial x} \right)^2 \right\} - \sum_n \sum_{\langle m \rangle} \omega_c^2 \{1 + \cos(\Phi_n - \Phi_m)\}^1. \quad (15)$$

Рассмотрим линеаризованный вариант теории, что соответствует $\Phi_n \ll 1$, $\Phi_m \approx \pi$, так что (15) переходит в

$$\mathcal{L} \approx nm^* \frac{1}{Q^2} \left\{ \sum_n \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \Phi_n}{\partial t} \right)^2 - s^2 \left(\frac{\partial \Phi_n}{\partial x} \right)^2 - 2\omega_c^2 \Phi_n^2 \right] + \omega_c^2 \sum_n \sum_{\langle m \rangle} \Phi_n \Phi_m \right\}, \quad (16)$$

где все Φ_n, Φ_m означают уже малые отклонения от равновесных значений. Соответствующие уравнения движения имеют вид

$$\frac{\partial^2 \Phi_n}{\partial t^2} - s^2 \frac{\partial^2 \Phi_n}{\partial x^2} - 4\omega_c^2 \Phi_n = \omega_c^2 \sum_{\langle m \rangle} \Phi_m. \quad (17)$$

¹ Здесь добавлена константа, так чтобы основному состоянию системы соответствовал $\mathcal{L}=0$, что предопределяет начало отсчета энергии.

Ищем решение в виде

$$\Phi_n(xt) = \sum_{q\mathbf{q}_\perp} \Phi_{q\mathbf{q}_\perp} \omega e^{i(qx + \mathbf{q}_\perp \mathbf{n} - \omega t)} \quad (18)$$

и находим спектр

$$\omega^2 = s^2 q^2 + 2\omega_c^2 (2 - \cos q_\perp^z b - \cos q_\perp^y b), \quad (19)$$

где решетка цепочек для простоты считается квадратной (b — постоянная решетки). Для $q_\perp = 0$ имеем снова акустический спектр (10). Таким образом, взаимодействие цепочек не приводит к «пиннингу» ВЗП.

Учтем теперь кулоновские эффекты в отдельной цепочке. Градиент фазы, согласно (3) и связи импульса Ферми с плотностью электронов, означает локальную вариацию плотности заряда

$$\delta\rho = \frac{e}{\pi} \frac{\partial\Phi}{\partial x}, \quad (20)$$

создающую соответствующее электрическое поле в цепочке. Учет этого обстоятельства приводит к необходимости решать вместо (17) связанную систему уравнений движения

$$\frac{\partial^2 \Phi_n}{\partial t^2} - s^2 \frac{\partial^2 \Phi_n}{\partial x^2} + 4\omega_c^2 \Phi_n = \omega_c^2 \sum_{\langle m \rangle} \Phi_m + \frac{\pi n e}{m^*} \frac{\partial \varphi_n}{\partial x}, \quad (21)$$

учитывающих действие электрического поля с потенциалом φ_n , определяемым дифференциально-разностным уравнением Пуассона

$$-\varepsilon_b \frac{\partial^2 \varphi_n}{\partial x^2} - \frac{1}{b^2} \sum_{i=y, z} \varepsilon_i [\varphi_{n+b_i} - 2\varphi_n + \varphi_{n-b_i}] = 4e \frac{\partial \Phi_n}{\partial x} \sum_{\mathbf{x}_\perp} e^{i\mathbf{x}_\perp \cdot \mathbf{n}}. \quad (22)$$

Последний член в (21) соответствует замене химического потенциала в (9) на электрохимический. Здесь ε_i — диэлектрическая проницаемость, обусловленная электронными переходами через пайерлсовскую щель,

$$\varepsilon_b = 1 + \frac{\omega_p^2}{6\Delta^2}. \quad (23)$$

В (22) \mathbf{x}_\perp — векторы обратной решетки цепочек. Ищем решение для $\Phi_n(xt)$ $\Phi_n(xt)$ в виде (18) и в аналогичном виде для $\varphi_n(xt)$. Решая соответствующее секулярное уравнение, находим спектр возбуждений

$$\omega^2 = s^2 q^2 + \frac{\omega_p^{*2}}{\varepsilon_b} \frac{q^2}{q^2 + \frac{2\varepsilon_i}{b^2 \varepsilon_i} [2 - \cos q_\perp^z b - \cos q_\perp^y b]} + 2\omega_c^2 [2 - \cos q_\perp^z b - \cos q_\perp^y b], \quad (24)$$

где $\omega_p^{*2} = 4\pi n e^2 / m^*$. Кулоновские эффекты приводят к конечной частоте $\omega_p^{*2} / \varepsilon_b \simeq (3/2) \lambda \omega_0^2$ фазовых колебаний для $q_\perp = 0$; при $q_\perp b \ll 1$ имеем (при $\varepsilon_i = \varepsilon_b$)

$$\omega^2 = \frac{\omega_p^{*2}}{\varepsilon_b} \cos^2 \theta + s^2 q^2 + \omega_c^2 b^2 q^2, \quad (25)$$

где $\text{tg } \theta = q_\perp / q$. Для $\mathbf{q}_\perp = (\pi/b, \pi/b)$ имеем

$$\omega^2 = 8\omega_c^2 + \left\{ s^2 + \frac{1}{8} b^2 \frac{\omega_p^{*2}}{\varepsilon_i} \right\} q^2. \quad (26)$$

Спектр (24) представляет собой естественное обобщение результатов [9, 14] на случай квазиодномерных систем. Смещение атомов в \mathbf{n} -й цепочке при возбуждении малых колебаний фазы параметра порядка пропорционально

$$\begin{aligned} u_n &\sim \exp \left\{ iQx + i \frac{\pi}{b} \mathbf{n} + i\Phi_{q\mathbf{q}_\perp} \omega e^{iqx + i\mathbf{q}_\perp \cdot \mathbf{n} - i\omega t} \right\} \approx \\ &\approx e^{iQx + i \frac{\pi}{b} \mathbf{n}} + i\Phi_{q\mathbf{q}_\perp} \omega e^{i(Q+q)x + i \left(\frac{\pi}{b} + \mathbf{q}_\perp \right) \cdot \mathbf{n} - i\omega t}. \end{aligned} \quad (27)$$

Таким образом, колебания фазы с волновым вектором $\mathbf{q}=(q, q_{\perp})$ соответствуют возбуждению фононов с волновым вектором $(Q+q, \pi/b+q_{\perp}^y, \pi/b+q_{\perp}^z)$, поэтому изучение фононного спектра в точке $(Q, \pi/b, \pi/b)$ соответствует изучению фазовых колебаний с $\mathbf{q}=(0, 0, 0)$. Как видно из (27), эти колебания соответствуют антипараллельным смещениям атомов на соседних цепочках [15]. Аналогично фононный спектр в точке $(Q, 0, 0)$ связан с фазовыми колебаниями с $\mathbf{q}=(0, \pi/b, \pi/b)$, соответствующими параллельным смещениям в соседних цепочках.

В [12] наблюдались низкочастотные оптические фононы в КСР в точках $(Q, \pi/b, \pi/b)$ и $(Q, 0, 0)$, которые можно попытаться интерпретировать как связанные с колебаниями фазы параметра порядка. Слабая дисперсия этих фононов объясняется целевым характером их спектра (в [12] проводилось необоснованное сравнение с акустическим спектром (10)). Вместе с тем остается непонятным равенство фононных частот, наблюдавшееся в точках $(Q, \pi/b, \pi/b)$ и $(Q, 0, 0)$. Подчеркнем, что отсутствие полного трехмерного упорядочения в КСР [4], обусловленное, по-видимому, эффектами неупорядоченности, может привести к ощутимому изменению полученных выше результатов, которые применимы, строго говоря, только для систем, состоящих из одномерных цепочек одного типа, без внутреннего беспорядка, свойственного системам типа КСР.

2. Влияние примесей на спектр возбуждений ВЗП

В работе Ли, Райса и Андерсона [9] были приведены соображения в пользу того, что взаимодействие ВЗП с заряженными примесями переводит спектр фазовых колебаний акустического типа (10) в спектр со щелью, что означает «пиннинг» ВЗП на примесях и ликвидирует фрэлиховскую «сверхпроводимость». Вместе с тем в [16] утверждалось, что взаимодействие ВЗП с хаотическими примесями не приводит к «пиннингу». До сих пор отсутствует расчет спектра фазовых колебаний ВЗП с учетом взаимодействия с примесями в какой-либо конкретной модели. Ниже такой расчет проводится в рассматриваемой полуфеноменологической теории.

Рассмотрим систему зарядов, расположенных случайным образом вдоль цепочки с ВЗП, на расстоянии r_{\perp} от нее. Такая ситуация, по-видимому, реализуется в КСР, где атомы акцепторов (типа Br) располагаются в системе хаотически вдоль цепочек Pt [4]. Плотность заряда примесей

$$\rho(x) = \sum_j e\delta(x - x_j), \quad (28)$$

где x_j — координаты примесей, взаимодействует с потенциалом ВЗП (12), так что энергия взаимодействия на единицу длины системы равна

$$U_{\text{imp}} = nm^* \frac{1}{Q^2} \omega_{\text{imp}}^2 \frac{1}{N} \sum_j \{\cos(Qx_j + \Phi)\}, \quad (29)$$

где

$$\omega_{\text{imp}}^2 = \frac{\omega_p^2}{4\pi\lambda v_{\perp}} \left(\frac{\Delta}{E_F} \right) (Qr_{\perp})^2 K_0(Qr_{\perp}), \quad (30)$$

N — число атомов в цепочке, v — число электронов проводимости на атом.

Рассмотрим снова линеаризованную теорию ($\Phi \ll 1$). Лагранжиан системы приобретает вид

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = nm^* \frac{1}{Q^2} \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} \right)^2 - \frac{s^2}{2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)^2 + \omega_{\text{imp}}^2 \frac{1}{N} \sum_j \sin Qx_j \Phi + \right. \\ \left. + \omega_{\text{imp}}^2 \frac{1}{N} \sum_j \cos Qx_j \Phi^2 \right\}. \quad (31) \end{aligned}$$

Уравнения движения имеют вид

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} - s^2 \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = \omega_{\text{имп}}^2 \frac{1}{N} \sum_j \sin Qx_j + \omega_{\text{имп}}^2 \frac{1}{N} \sum_j \cos Qx_j \Phi. \quad (32)$$

В системе с примесями

$$\Phi = \Phi(xt; \{x_j\}) \quad (33)$$

— функционал положений примесей. С другой стороны, фаза как компонента параметра порядка является термодинамической величиной и должна быть усреднена по ансамблю случайных примесных конфигураций. Усредняя (32), получим

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - s^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \langle \Phi \rangle = \omega_{\text{имп}}^2 \left\langle \frac{1}{N} \sum_j \cos Qx_j \Phi \right\rangle. \quad (34)$$

Естественным образом возникает цепочка уравнений, имеющая в Фурье-компонентах вид

$$\{-\omega^2 + s^2 q^2\} \langle \Phi_{q\omega} \rangle = \omega_{\text{имп}}^2 \left\langle \frac{1}{N} \sum_j \cos Qx_j \Phi \right\rangle_{q\omega}, \quad (35)$$

$$\begin{aligned} \{-\omega^2 + s^2 q^2\} \left\langle \frac{1}{N} \sum_j \cos Qx_j \Phi \right\rangle_{q\omega} &= \omega_{\text{имп}}^2 \left\langle \frac{1}{N^2} \sum_j \sin Qx_j \sum_i \cos Qx_i \right\rangle \delta(\omega) \delta(q) + \\ &+ \omega_{\text{имп}}^2 \left\langle \frac{1}{N^2} \sum_j \cos Qx_j \sum_i \cos Qx_i \Phi \right\rangle_{q\omega}. \end{aligned} \quad (36)$$

Проводя в (36) простейшее расщепление в примесных корреляторах, получим (при $\omega \neq 0$, $q \neq 0$)

$$\left\{ -\omega^2 + s^2 q^2 + \frac{\omega_{\text{имп}}^4}{\omega^2 - s^2 q^2} \frac{1}{2} S(Q) \right\} \langle \Phi_{q\omega} \rangle = 0, \quad (37)$$

где

$$S(Q) = \frac{1}{N^2} \left\langle \sum_{ij} e^{iQ(x_i - x_j)} \right\rangle \quad (38)$$

— структурный фактор положений примесей. Из (37) следует спектр фазовых колебаний

$$\omega^2 = \left\{ \frac{1}{2} S(Q) \right\}^{1/2} \omega_{\text{имп}}^2 + s^2 q^2. \quad (39)$$

Для хаотических примесей $S(Q) = c_{\text{имп}}$ — концентрации примесей. Таким образом, примеси приводят к «пиннингу» ВЗП, причем щель в спектре

$$\omega_T^2 = \left\{ \frac{1}{2} c_{\text{имп}} \right\}^{1/2} \omega_{\text{имп}}^2. \quad (40)$$

Проведенное рассмотрение справедливо для достаточно малых концентраций примесей, не влияющих существенно на сам пайерлсовский переход [17] и допускающих проведенное выше расщепление. Учет квазиодномерности и кулоновских эффектов проводится так же, как и выше; опуская вычисления, укажем, что в результате щель ω_T^2 просто добавляется в правую часть выражения (19) или (25). Щель в спектре отлична от нуля для любых q и q_{\perp} ². Возможно, что равенство фононных частот в точках $(Q, \pi/b, \pi/b)$ и $(Q, 0, 0)$, наблюдавшееся в [12], объясняется доминирующей ролью примесей в формировании щели.

² Поскольку колебания фазы фактически трехмерны, снимаются вопросы о специфике действия примесей в строго одномерной системе.

3. Эффекты соизмеримости и нелинейные возбуждения

Существование голдстоновской моды со спектром (40) непосредственно связано с вырождением энергии ВЗП по фазе Φ . Это вырождение имеет место только для ВЗП с периодом, несоизмеримым с периодом исходной цепочки. В соизмеримом случае $Q = 2\pi m/Ma$, где a — период исходной цепочки, $m < M$ — целые числа. При этом в энергии ВЗП возникает энергия соизмеримости [18, 14, 9]

$$U_{\text{comm}} \sim \Delta^M \cos M\Phi. \quad (41)$$

Соответственно лагранжиан одной цепочки приобретает вид

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 + nm^* \frac{1}{Q^2} \frac{\omega_T^2}{M^2} (\cos M\Phi - 1), \quad (42)$$

где [9, 14]

$$\omega_T^2 \sim \lambda M^2 \omega_Q^2 \left(\frac{\Delta}{E_F} \right)^{M-2}. \quad (43)$$

В линейном приближении можно ограничиться разложением $\cos M\Phi$ до квадратичных членов и получить спектр фазовых колебаний в виде [9]

$$\omega^2 = \omega_T^2 + s^2 q^2. \quad (44)$$

Таким образом, эффекты соизмеримости приводят к «пиннингу» ВЗП. Нелинейный лагранжиан (42) приводит к уравнению движения типа синус-Гордон

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} - s^2 \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = - \frac{\omega_T^2}{M^2} \sin M\Phi, \quad (45)$$

для которого найден богатый спектр классических и квантовых решений [19]. Кроме ветви, соответствующей линейным колебаниям Φ вблизи нуля (44), в системе может быть возбуждено любое число пар солитон—антисолитон, движущихся со скоростью $v < s$,

$$\Phi_{\text{sol}}(xt) = \frac{4}{M} \arctg \left\{ \exp \left(\frac{\omega_T}{s} \frac{x - v/st}{\left(1 - \frac{v^2}{s^2}\right)^{1/2}} \right) \right\}, \quad (46)$$

$$\Phi_{\text{antisol}}(xt) = -\Phi_{\text{sol}}(xt). \quad (47)$$

Энергия солитона выражается стандартной «релятивистской» формулой

$$E_{\text{sol}} = \frac{M_{\text{sol}} s^2}{\left(1 - \frac{v^2}{s^2}\right)^{1/2}} = \sqrt{\Delta_{\text{sol}}^2 + s^2 p^2}, \quad (48)$$

где масса M_{sol} ($\Delta_{\text{sol}} = M_{\text{sol}} s^2$, p — импульс солитона), в квазиклассическом (ВКБ) приближении [18, 19]³ с использованием параметров нашей модели равна

$$M_{\text{sol}} = nm^* \frac{1}{Q^2} \frac{\delta \omega_T}{\gamma s} = \frac{4}{\pi} \frac{\omega_T}{s p_F} m^* \frac{1}{\gamma}, \quad (49)$$

где γ — перенормированная константа связи, равная в рассматриваемой модели

$$\gamma = \frac{M^2}{1 - \frac{M^2}{8\pi}}. \quad (50)$$

³ По-видимому, ВКБ значения масс, используемые здесь, являются точными [19].

В классической теории солитонов $\gamma = M^2$. Возможность солитонных возбуждений в ВЗП пайерлсовского типа в классическом приближении рассматривалась в недавней работе [20]. Вид солитонного решения как функции x (при $v = 0$) показан на рис. 1. В области с линейными размерами порядка

$$\xi_{sol} \approx \frac{s}{\omega_T} \quad (51)$$

(размеры солитона) эффективно отличен от нуля градиент фазы, т. е. в соответствии с (20) имеется избыточная плотность заряда

$$\delta\rho_{sol} = \frac{2}{M} \frac{e}{\pi} \frac{\omega_T}{s} \operatorname{ch}^{-1} \frac{\omega_T}{s} x; \quad (52)$$

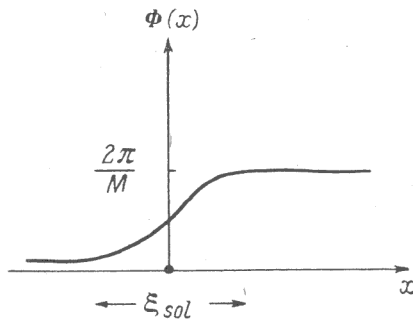


Рис. 1. Изменение фазы в области солитонного решения.

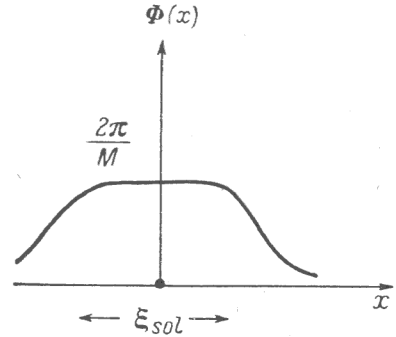


Рис. 2. Изменение фазы в области связанного состояния солитон—антисолитон.

отсюда ясно, что солитон переносит электрический заряд

$$Q_{sol} = \frac{4}{M} e. \quad (53)$$

Антисолитоны переносят заряд противоположного знака. С движением солитонов связана плотность тока (см. (3))

$$j_{sol}(xt) = -\frac{ne}{Q} \Phi_{sol}(xt) = \delta\rho_{sol}(x) v. \quad (54)$$

Солитоны и антисолитоны могут рождаться только парами и подчиняются статистике Ферми [21].

Легко видеть, что рассматриваемая модель эквивалентна простому обобщению одномерной дислокации по Френкелю—Конторовой [22, 23], где рассматривается движение цепочки «атомов» с массой m^* в периодическом поле «подложки», создаваемой эффектами соизмеримости. В этом смысле солитоны представляют собой «дислокации» в решетке ВЗП.

Кроме солитонов, в рассматриваемой модели возможны ветви спектра, соответствующие связанным состояниям солитон—антисолитон, не рассмотренные в [20]. Такое «дублетное» решение (45) в системе покоя ($v = 0$) имеет вид [18, 19]

$$\Phi_d(xt) = \frac{4}{M} \operatorname{arc} \operatorname{tg} \left\{ \varepsilon \frac{\sin\left(\frac{2\pi}{\tau} t\right)}{\operatorname{ch}\left(\varepsilon \frac{2\pi}{\tau} \frac{x}{s}\right)} \right\}, \quad (55)$$

где

$$\varepsilon = \left[\left(\frac{\tau\omega_T}{2\pi} \right)^2 - 1 \right]^{1/2}, \quad \tau = \frac{2\pi}{\omega_T \cos \frac{N\gamma}{16}}. \quad (56)$$

Здесь $N=1, 2, \dots, < 8\pi/\gamma$ [19] нумерует стабильные (в квантовой теории) ветви спектра дублетов. Их массы (щели в спектре) в ВКБ приближении [19]

$$M_N = nm^* \frac{1}{Q^2} \frac{16\omega_T}{\gamma_s} \sin\left(\frac{N\gamma}{16}\right) = \frac{8}{\pi} \frac{\omega_T}{sp_F} m^* \frac{1}{\gamma} \sin\left(\frac{N\gamma}{16}\right). \quad (57)$$

Учитывая вид γ (52) и то, что в рассматриваемой модели имеет смысл только $M \geq 3$ [9]⁴, убеждаемся, что $N=1$ для $M=3$, а для $M > 3$ дублетные решения нестабильны.

Графически дублетное решение представлено на рис. 2. Очевидно, что полный заряд, переносимый дублетом, равен нулю, т. е. их движение не дает вклада в постоянный ток. Однако дублет обладает осциллирующим с частотой $2\pi/\tau$ дипольным моментом, что в принципе могло бы проявиться в диэлектрической проницаемости.

Отметим, что в [24] была предпринята попытка построения решений уравнения типа (45), напоминающих дублеты. Однако найденные там приближенные образования не имеют ничего общего с точными решениями (55) и, по-видимому, нестабильны. Кроме того, в [24] ошибочно утверждается, что такие решения дают вклад в проводимость на постоянном токе.⁵

Перейдем к рассмотрению вопроса о том, в какой мере найденные чисто одномерные решения сохраняются при учете кулоновских эффектов в одной цепочке, а также эффектов взаимодействия цепочек.

Образование солитона не выгодно с точки зрения кулоновских эффектов, так как при этом проигрывается энергия $Q_{sol}^2/\xi_{sol}\varepsilon_b$. Недостаток этой энергии несуществен, если он меньше $M_{sol}s^2$, что приводит к условию $e^2m/\hbar p_F \ll (1/16)\varepsilon_b$, удовлетворить которому не составляет труда. Учет взаимодействия ВЗП соседних цепочек приводит к рассмотрению системы связанных нелинейных уравнений.

Проведем простой качественный анализ. Образование пары солитон—антисолитон на одной из цепочек приводит к проигрышу энергии взаимодействия цепочек ((см. 13))

$$U_{\perp} \sim nm^* \frac{\omega_c^2}{Q^2} \xi \left\{ \cos \pi \left(1 - \frac{2}{M} \right) + 1 \right\}, \quad (58)$$

где ξ — расстояние солитон—антисолитон. Влияние этого проигрыша на массу солитона несущественно, если $2M_{sol}s^2 \gg U_{\perp}$, то приводит к требованию

$$\xi \ll \frac{16}{M^2} \left(\frac{\omega_T}{\omega_c} \right)^2 \xi_{sol}, \quad (59)$$

т. е. солитон и антисолитон должны быть достаточно близки. В то же время необходимо, чтобы $\xi \gg \xi_{sol}$, так как только тогда можно говорить об «отдельных» солитонах. Ввиду малости ω_T (43) по параметру $(\Delta/E_F)^{M-2} \ll 1$, этому условию трудно удовлетворить для известных систем типа КСР или ТТФ—ТСНҚ. Вместе с тем ω_c экспоненциально спадает с расстоянием между цепочками (14) так, что ситуация благоприятнее в системе достаточно удаленных цепочек. Из-за (58) солитоны и антисолитоны притягиваются с силой $\sim nm (\omega_c^2/Q^2)$ и, строго говоря, всегда связаны. Оценим минимальные размеры связанного состояния солитон—антисолитон в потенциальной яме (58)

$$\frac{1}{M_{sol}\xi_b^2} \sim nm^* \frac{\omega_c^2}{Q^2} \xi_b,$$

⁴ При $M=2$ фазовые колебания ВЗП совпадают с амплитудными, которые здесь не рассматриваются.

⁵ В [24], а также фактически и в [20] рассматривается лагранжиан взаимодействия типа (42) с $M=1$. Нам неизвестны физические механизмы, приводящие к такому взаимодействию. Нелинейное межцепочечное взаимодействие, по-видимому, не приводит к образованию солитонных решений, так как оно не обеспечивает «пиннинг» ВЗП.

$$\frac{\xi_b}{\xi_{sol}} \sim M^{2/3} \left(\frac{\omega_T}{\omega_c} \right)^{2/3} \left(\frac{m}{m^*} \right)^{1/3}. \quad (60)$$

Здесь также необходимо потребовать $\xi_b > \xi_{sol}$, чему нелегко удовлетворить. Таким образом, решения солитонного типа невыгодны с точки зрения межцепочечного взаимодействия и вряд ли реализуются в известных системах.⁶ Кроме того, даже в условиях, когда можно говорить о существовании солитонов в отдельных цепочках, они связаны в пары солитон—антисолитон и не дают вклада в проводимость в слабых полях,⁷ вопреки утверждениям [21].

В заключение отметим, что проигрыш энергии типа (58) исчезает в ситуации, соответствующей образованию солитонов на всех цепочках в сечении образца, ортогональном цепочкам. Можно, однако, строго показать, что такие солитонные «плоскости» не выгодны с точки зрения кулоновских эффектов. За неимением места рассмотрение этого вопроса опускается.

В заключение автор выражает свою признательность Л. Н. Булаевскому за многочисленные обсуждения и критические замечания.

Л и т е р а т у р а

- [1] Л. Н. Булаевский. УФН, 115, 263, 1975.
- [2] R. Comes, N. Lambert, H. Launois, H. R. Zeller. Phys. Rev., B8, 571, 1973.
- [3] B. Renker, H. Rietschel, L. Pintschovius, W. Glaser, P. Bruesch, D. Kuse, M. J. Rice. Phys. Rev. Lett., 30, 1144, 1973.
- [4] B. Renker, L. Pintschovius, W. Glaser, H. Rietschel, R. Comes, L. Liebert, W. Drexel. Phys. Rev. Lett., 32, 836, 1974.
- [5] F. Denoyer, R. Comes, A. Garito, A. J. Heeger. Phys. Rev. Lett., 35, 445, 1975.
- [6] R. Comes, S. Shapiro, G. Shirane, A. F. Garito, A. J. Heeger. Phys. Rev. Lett., 35, 1518, 1975.
- [7] H. Frohlich. Proc. Roy. Soc., A223, 296, 1954.
- [8] D. Allender, J. Bray, J. Bardeen. Phys. Rev., B9, 119, 1974.
- [9] P. A. Lee, T. M. Rice, P. W. Anderson. Sol. State Comm., 14, 703, 1974.
- [10] С. А. Бразовский, И. Е. Дзялошинский. ЖЭТФ, 71, 2338, 1976.
- [11] D. Tanner, C. Jacobsen, A. Garito, A. J. Heeger. Phys. Rev., B13, 3381, 1976; P. Bruesch, S. Strassler, H. R. Zeller. Phys. Rev., B12, 219, 1975.
- [12] R. Comes, B. Renker, L. Pintschovius, R. Currat, W. Glaser, G. Schneider. Phys. Stat. Sol., (b) 71, 171, 1975.
- [13] M. J. Rice, S. Strassler, W. Schneider. One Dimensional Conductors. Ed. H. G. Schuster, p. 282, Springer Verlag, 1975.
- [14] T. M. Rice. Sol. State Comm., 17, 1055, 1975.
- [15] P. Bruesch, H. R. Zeller. Sol. State Comm., 14, 1037, 1974.
- [16] J. B. Sokoloff. Sol. State Comm., 16, 375, 1975.
- [17] Л. Н. Булаевский, М. В. Садовский. ФТТ, 16, 1159, 1974.
- [18] И. Е. Дзялошинский. Collective Properties of the Physical Systems (Nobel Symposium 24). Ed. B. Lundquist. S. Lundquist. p. 143. Acad. Press, N. Y., 1974.
- [19] R. Dashen, B. Hasslacher, A. Neveu. Phys. Rev., D11, 3424, 1975; R. Rajaraman. Phys. Rev., 21, 227, 1975.
- [20] M. J. Rice, A. Bishop, J. Krumhansl, S. Trullinger. Phys. Rev. Lett., 36, 432, 1976.
- [21] S. Mandelstam. Phys. Rev., D11, 3026, 1975.
- [22] Я. И. Френкель, Т. А. Конторова. ЖЭТФ, 8, 89, 1340, 1349, 1938.
- [23] Я. И. Френкель. Введение в теорию металлов. «Наука», М., 1973.
- [24] L. Pietronero, S. Strassler, G. Tombs. Phys. Rev., B12, 5213, 1975.

Институт физики металлов
УНЦ АН СССР
Свердловск

Поступило в Редакцию
5 июля 1976 г.
В окончательной редакции
28 октября 1976 г.

⁶ Отметим, однако, что энергия связи пары солитон—антисолитон экспоненциально падает с ростом расстояния между цепочками.

⁷ Достаточно сильное внешнее поле $E \sim 2/3 (M/\pi)(e/r_{\perp}^2)\omega_c^2/\lambda\omega_0^2$ разорвет пару солитон—антисолитон и их вклад в проводимость станет в принципе возможным. Величина этого поля также экспоненциально падает с ростом расстояния между цепочками.