

## ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ МОДЕЛИ ПАЙЕРЛСА С ПРОИЗВОЛЬНЫМ ЧИСЛОМ ЭЛЕКТРОНОВ НА ЭЛЕМЕНТАРНУЮ ЯЧЕЙКУ

*С.А.Бразовский, С.А.Гордюнин, Н.Н.Кирова*

Для одномерной системы Пайерлса в континуальной модели в приближении самосогласованного поля точно определены спектр электронов и вид статических деформаций решетки в случае произвольного числа электронов на элементарную ячейку в металлической фазе.

1. Свойства диэлектрической фазы квазиодномерных систем существенно зависят от числа электронов  $\rho$ , приходившихся на элементарную ячейку в металлической фазе. Для веществ, где щель  $\Delta$  в электронном спектре вызвана статическими деформациями решетки (полиацетилен, семейство КСР) переход от состояния Пайерлса при  $\rho = 1$  к состоянию Пайерлса - Фрелиха  $|\rho - 1| \ll 1$  определяется уменьшением роли процессов переброса. Теоретически этот переход исследовался численными методами [1], в приближении линейного отклика [2] и на основе феноменологической модели [3]. Интерес к свойствам системы Пайерлса с  $|\rho - 1| \ll 1$  возрос недавно в связи с экспериментами по легированию полиацетилена.

В настоящей работе мы приведем точное решение задачи Пайерлса, ограниченное только условием  $|\rho - 1| \ll 1$  в связи с линеаризацией закона дисперсии электронов и континуальностью модели. Будет показано, что все свойства системы непрерывны по  $\rho$ , за исключением точки  $\rho = 1$ . Щель в спектре электронов остается конечной и ее зависимость от  $\rho$  отражает увеличение константы связи  $\lambda$  при переходе через область концентраций  $n = |\rho - 1| / a \sim \Delta / v_F$  ( $a$  - постоянная решетки,  $v_F$  - скорость Ферми) в связи с включением процессов переброса при  $\rho \approx 1$ . Имеются две симметричные запрещенные зоны, сливающиеся при  $\rho = 1$ . Средняя разрешенная зона шириной  $E_0(\rho) \rightarrow 0$  при  $\rho \rightarrow 1$  и  $E_0(\rho) \sim \epsilon_F$  при  $|\rho - 1| \sim 1$  либо целиком заполнена ( $\rho > 1$ ), либо пуста ( $\rho < 1$ ). Длинноволновая часть потенциала деформации решетки  $\phi(x) = \Delta(x) \sin(\pi/a)x$  при  $n \ll \Delta / v_F$  имеет вид доменной структуры, происхождение которой в связи с поляронным эффектом [5] и результатом [2] объяснено в заключении работы одного из авторов [6]. При  $n \gg \Delta / v_F$   $\Delta(x) = \Delta_0 \sin \times [(2\rho_F - \pi/a)(x - x_0)]$ , что соответствует пределу Фрелиха ( $x_0$  - произвольная постоянная). При  $\rho \rightarrow 1$  каждая доменная стенка несет одно-

электронный заряд в соответствии с результатами [6]. При  $|\rho - 1| \sim 1$  осцилляции плотности электронов  $\nu(x) \sim \Delta/\epsilon_F$ . Эти результаты согласуются качественно с данными расчетов [1], но модель [3] оказывается неадекватной системе Пайерлса. В работе найдены также зависимость энергии основного состояния  $W(\rho)$  и эффективные массы на краях зон.

2. Запишем волновые функции электронов  $\psi_\mu(x)$  в поле статических деформаций в виде

$$\psi_\mu(x) = U_\mu(x) \cos(\pi x/a) + iV_\mu(x) \sin(\pi x/a).$$

Случай  $\Delta(x) = \Delta_1 = \text{const}$  соответствует удвоению периода  $\rho = 1$ . Функционал энергии системы  $W\{\Delta, U_\mu, V_\mu\}$  имеет вид [6] (здесь и далее  $v_F = 1, f' = df/dx$ ):

$$W\{\Delta, U_\mu, V_\mu\} = \int dx \left\{ \frac{\Delta^2}{g^2} + \sum_{E_\mu < \zeta} \left[ -i(U_\mu^* V_\mu' + V_\mu^* U_\mu') + i\Delta(V_\mu^* U_\mu - U_\mu^* V_\mu) \right] \right\}, \quad (1)$$

где уровни энергии  $E_\mu$  и химический потенциал  $\zeta$  отсчитываются от центра зоны металлической фазы. Из (1) следуют уравнения типа Дирака для  $U$  и  $V$

$$U' - \Delta U = iEV; \quad V' + \Delta V = iEU \quad (2)$$

или

$$U'' + [E^2 - P(x)]U = 0; \quad V'' + [E^2 - Q(x)]V = 0; \quad P(x) = \Delta' + \Delta^2; \quad (3)$$

$$Q(x) = -\Delta' + \Delta^2$$

и условие самосогласования

$$\frac{\Delta}{g^2} = \frac{1}{2i} \sum_{E_\mu < \zeta} (U_\mu^* V_\mu - V_\mu^* U_\mu) = -\sum_{E_\mu < \zeta} \frac{1}{E_\mu} \left( \Delta + \frac{1}{2} \frac{d}{dx} \right) V_\mu^* V_\mu. \quad (4)$$

В отличие от [5 - 7] мы должны искать периодическое, а не единенное решение системы (1) - (4). Решение упрощается использованием метода Фатева и др. [8], согласно которому экстремаль (1), обладающая лишь трансляционным вырождением, удовлетворяет уравнениям

$$\Delta''' - 6\Delta^2 \Delta' + A\Delta' = 0; \quad P''' - 6PP' + AP' = 0; \quad Q''' - 6QQ' + AQ' = 0. \quad (5)$$

$A$  - произвольный параметр, определяющий тип решения. Выбрав  $A = \Delta_k^2 (1 + k^{-2})$ , получим

$$\Delta(x) = \Delta_k \text{sn}(\xi, k); \quad \xi = x \Delta_k / k; \quad k = k(\rho). \quad (6)$$

Запишем  $P(x) = \Delta_k^2 p(\xi)$ ;  $Q(x) = \Delta_k^2 q(\xi)$ . Функции  $\Delta(\xi)$ ,  $p(\xi)$  и  $q(\xi)$  имеют период  $4K(k)$ , где  $K(k)$  — полный эллиптический интеграл первого рода. Согласно [9] спектр (3) в силу (5) имеет только одну запрещенную зону  $E^2 = \Delta_k^2 \epsilon^2$ ;  $\epsilon_-^2 < \epsilon^2 < \epsilon_+^2$ . Решение уравнений (2) с потенциалом (6) сводится к функциям Ламе и может быть найдено в квадратурах. В обозначениях  $U(x) = (\Delta_k/2kL)^{1/2} u(\xi)$ ;  $V(x) = (\Delta_k/2kL)^{1/2} v(\xi)$  ( $L$  — длина системы) получим нормированное решение

$$u(\xi) = [(p(\xi) + b) / (\bar{p} + b)]^{1/2} \exp \left\{ ic \int_0^\xi \frac{d\eta}{p(\eta) + b} \right\} \quad (7)$$

с заменой  $p(\xi)$  на  $q(\xi)$  для  $v(\xi)$ . В решении (7)

$$b = b(\epsilon) = 2\epsilon^2 - 2^{-1}(1 + k^{-2}); \quad c = c(\epsilon) = \pm \epsilon [(\epsilon^2 - \epsilon_+^2)(\epsilon^2 - \epsilon_-^2)]^{1/2},$$

$\epsilon_\pm = 2^{-1}(k^{-1} \pm 1)$  — границы разрешенных зон,  $-\epsilon_- < \epsilon < \epsilon_+$  и  $|\epsilon| > \epsilon_+$  (рисунок),

$$\bar{p} = \overline{\delta^2}(k) = \frac{1}{4K} \int_0^{4K} \text{sn}^2(\xi) d\xi = k^{-2}(1 - E/K),$$

где  $E(k)$  — полный эллиптический интеграл второго рода.  $\overline{\delta^2}(1) = 1$ ,  $\overline{\delta^2}(0) = 1/2$ .

Волновые функции (7) характеризуются волновым вектором  $\kappa = \kappa(\epsilon)$ , определяющим в термодинамическом пределе подсчет числа состояний

$$\sum_\epsilon = L \frac{\Delta_k}{k} 2 \int \frac{d\kappa}{2\pi}. \quad (8)$$

Из вида (7) следует, что

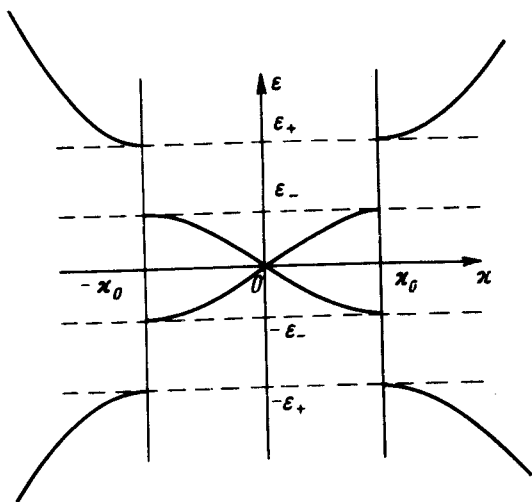
$$\kappa(\epsilon) = (1/2K\gamma^{1/2}) [K + (\gamma b - 1) \Pi(-\gamma, k)], \quad (9)$$

где  $\gamma = \gamma(\epsilon) = \epsilon^2 / (\epsilon^2 - \epsilon_+^2) (\epsilon^2 - \epsilon_-^2)$  и  $\Pi(-\gamma, k)$  — полный эллиптический интеграл Шрода. Зависимость  $\kappa(\epsilon)$  приведена на рисунке. Экстремумы зон достигаются при  $\kappa = \pm \kappa_0(k) = \pm (4k)^{-1} = \pm \frac{k}{\Delta_k} \left| \frac{\pi}{2a} - p_F \right|$ .

Согласно (8) две ветви центральной зоны содержат по  $N = L/l$ ,  $l = 4kK/\Delta_k$  состояний, где  $l$  — период структуры  $\Delta(x)$ . Таким образом, параметры диэлектрической фазы связаны с концентрацией дополнительных (или недостающих) к  $\rho = 1$  электронов  $n$  соотношением

$$n = |\rho - 1| / a = \Delta_k / 2kK. \quad (10)$$

При  $\rho < 1$  центральная зона должна быть пустой, а при  $\rho > 1$  — заполненной. Вследствие симметрии полная энергия центральной зоны равна нулю, т.е. параметры  $k$  и  $\Delta_k$  не зависят от знака  $\rho - 1$ . Поэтому в дальнейшем мы будем рассматривать случай  $\rho < 1$ .



3. Условие самосогласования (4) при подстановке (7) с учетом (5) удовлетворяется тождественно по  $x$ , если выполнено уравнение на параметры

$$\sum_{\epsilon_F k / \Delta_k < \epsilon < -\epsilon_+} \frac{-\epsilon}{b(\epsilon) + \delta^2} = \frac{1}{g^2} = \frac{1}{\pi} \int_1^{\epsilon_F / \Delta_1} \frac{d\kappa}{(\epsilon^2 - 1)^{1/2}}, \quad (11)$$

где  $2\Delta_1 = \epsilon_F \exp(-1/\lambda)$ ,  $\lambda = g^2 / \pi v_F$  — щель в состоянии Паирса с  $\rho = 1$ . ( $k = 1$ ). Из (11) следует, что с точностью  $\sim \Delta / \epsilon_F$  щель  $\Delta_k = \Delta_1 f(k)$  не зависит явно от параметра обрезания  $\epsilon_F$  и от  $\lambda$ .

Вместо вычисления (11) удобнее определить дополнительную энергию  $W(k, \Delta_k)$  по отношению к металлической фазе с тем же числом частиц и минимизировать ее при заданном  $n$  (10). Зависимость  $k(n)$  определяется из условия  $(\partial W / \partial k)_n = 0$ . Таким образом, получаем

$$\Delta_k = k^{1/2} \Delta_1 = \frac{1}{2K} \frac{\Delta_1}{n}; \quad k^{1/2} K = \Delta_1 / 2n; \quad k = k(n)$$

$$L^{-1} W(n) = -\frac{2n^2}{\pi} \left[ 2K(K - E) - \frac{1+k^2}{2} K^2 + \frac{\pi^2}{8} \right]; \quad L^{-1} \frac{dW}{dn} = -\frac{4n}{\pi} \times$$

$$\times \left[ \frac{1-k^2}{2} K^2 - EK + \frac{\pi^2}{8} \right],$$

В предельных случаях имеем

$$1) \quad n \ll \Delta_1, \quad k \approx 1, \quad \Delta \approx \Delta_1; \quad W(n) = -\frac{1}{2\pi} \Delta_1^2 L + \frac{2}{\pi} \Delta_1 n L.$$

В пределе малой концентрации энергия на одну частицу  $(2/\pi)\Delta_1$ , совпадает, как и следовало ожидать, с энергией солитона [6, 7].

$$2) n \gg \Delta_1, k \approx (\Delta_1 / 2\pi en)^2, \Delta(n) \approx \Delta_1^2 / 2\pi e^2 n \approx \epsilon_F^2 / n \exp(-2/\lambda).$$

Мы получили, что при переходе через область  $n \sim \Delta_1$  константа связи уменьшится вдвое и при  $n \gg \Delta_1$  имеется предэкспоненциальная зависимость  $\Delta(n) \sim n^{-1}$ .

Отметим, что как и в случае изолированного солитона [5, 6] плотность энергии  $w(x)$  строго однородна. При подстановке

$$w(x) = \frac{\Delta^2(x)}{g^2} + \sum_{E_\mu \leq -E_+} E_\mu (U_\mu^* U_\mu + V_\mu^* V_\mu) = \Delta^2(x) \left[ \frac{1}{g^2} + \sum_{\epsilon_\mu \leq -\epsilon_+} \frac{\epsilon}{b(\epsilon) + \delta^2} \right] + \frac{1}{L} \sum_{E_\mu \leq -E_+} E_\mu$$

первый член тождественно обращается в нуль вследствие (11) и  $w(x) = W/L$ . Плотность числа частиц  $\nu(x)$  осциллирует как

$$\nu(x) - \bar{\nu} = \frac{2}{\pi} \frac{\Delta_k}{k} \int_{\epsilon_+}^{\infty} \frac{\delta^2(x) - \delta^2}{b(\epsilon) + \delta^2} d\epsilon.$$

При  $n \ll \Delta_1$ , ( $k \rightarrow 1$ ),  $\nu(x) \approx (1/2)\Delta_1 [\text{sn}^2(\Delta_1 x / k) - 1]$ , что совпадает с распределением заряда в изолированных солитонах [6]. При  $n \gg \Delta_1$ , ( $k \rightarrow 0$ ),  $\nu(x) \approx (\Delta^2(n)/n) \cos \left[ \left( 4p_F - \frac{2\pi}{a} \right) x \right]$ , т.е. в пределе Фрелиха осцилляции имеют период порядка  $a$  и малы как  $(\Delta/\epsilon_F)^2$ .

Эффективные массы электронов  $M_\pm = m_\pm \Delta_k$  вблизи краев зон можно получить из (3)

$$\epsilon - \epsilon_\pm = \pm (|\kappa| - \kappa_0)^2 / 2k^2 m_\pm, \quad m_\pm = (1 \pm k \delta^2)^2 / 2(1 \pm k). \quad (12)$$

При  $n \rightarrow 0$  имеем  $k \rightarrow 1$ ,  $m_+ \rightarrow 1$ ,  $m_- \rightarrow 2n^2 / \Delta_1 E_0(n)$ , где  $E_0(n) = 8\Delta_1 \exp(-\Delta_1/n)$  — ширина центральной зоны. При  $n \gg \Delta_1$ ,  $k \rightarrow 0$ ,  $m_+ \rightarrow 1/2$  в соответствии с пределом Фрелиха.

Результаты (7) и (12) позволяют определить пороги оптического поглощения при переходах между краями различных зон  $\pm E_\pm$ .

В заключение отметим, что возбужденные состояния рассмотренной системы, содержат бесщелевую оптически активную моду трансляций  $\partial \Delta / \partial x_0$ . Подчеркнем, что оптическая щель в спектре конечна и непрерывна по  $\rho$  кроме точки  $\rho = 1$ , где она изменяется в два раза. Металлизация рассмотренной системы, в отличие от предположений [3] может происходить за счет проводимости Фрелиха.

Авторы выражают признательность Л.П.Горькову, И.Е.Дзялошинскому, Ю.Н.Дорохову, Э.И.Рашба и В.А.Фатееву за полезные обсуждения.

## Литература

- [1] A.Kotani. J. Phys. Soc. Japan, **42**, 416, 1977.
  - [2] С.А.Бразовский, И.Е.Дзялошинский, С.П.Обухов. ЖЭТФ, **72**, 1550, 1977.
  - [3] M.J.Rice, J.Timonen. Phys. Lett., **73 A**, 368, 1979.
  - [4] W.P.Su, J.R.Schrieffer, A.J.Heeger. Phys. Rev. Lett., **42**, 1698, 1979.
  - [5] С.А.Бразовский. Письма в ЖЭТФ, **28**, 656, 1978.
  - [6] С.А.Бразовский. ЖЭТФ, **78**, 678, 1980.
  - [7] H.Takayama, Y.R.Lin-Lin, K.Maki. Preprint, 1979.
  - [8] В.А.Фатеев, А.С.Шварц, Ю.С.Тюпкин. ФИАН, Препринт №155, 1976.
  - [9] С.П.Новиков. Функциональный анализ, **8**, 54, 1974.
-