

## О ХАРАКТЕРЕ ПРОВОДИМОСТИ КВАЗИОДНОМЕРНЫХ СИСТЕМ В ПАЙЕРЛСОВСКОЙ ФАЗЕ С УДВОЕНИЕМ ПЕРИОДА

*И.В.Криве, А.С.Рожавский*

В приближении среднего поля построена модель пайерлсовского диэлектрика с малой концентрацией свободных носителей в зоне проводимости на основе которой проанализирован механизм проводимости полиацетилена.

Последнее время в связи с обнаружением аномальных свойств полиацетилена  $(\text{CH})_x$  (см. [1] и цитируемые там работы, а также [2]) усилился интерес к изучению пайерлсовского перехода с удвоением периода в квазиодномерных цепочках [1, 3, 4]. Спецификой этого перехода является отсутствие волны зарядовой плотности (ВЗП) [5] ниже точки перехода. Вследствие этого поведение такой системы во внешних полях носит чисто полупроводниковый характер [2]. Однако уже слабое легирование полиацетилена резко меняет его свойства, что связывалось авторами работ [1, 3, 4] с появлением заряженных солитонов (доменных стенок) в пайерлсовской решетке. (Впервые возможность образования в пайерлсовской фазе подобных полярионных состояний была исследована в работе [6]). Для подробного анализа динамики указанных солитонных состояний представляет большой интерес построение простой модели пайерлсовского диэлектрика (ПД) с малой концентрацией свободных носителей в зоне проводимости.

Как известно, пайерлсовский переход в одномерных металлах с одним электроном проводимости на атом может происходить в одну из двух вырожденных по энергии фаз, отличающихся конфигурацией пайерлсовской решетки по отношению к исходной  $(u_n = \pm (-1)^n u_0)$ , где  $u_n$  — смещение  $n$ -го атома,  $u_0$  — макроскопическое смещение ионов решетки)<sup>1)</sup>.

Спектр электронов в этих конфигурациях определяется стандартным выражением (см., например, [7])

$$E(k) = \text{sgn } \epsilon(k) \sqrt{\Delta_0^2 + \epsilon^2(k)}, \quad \epsilon(k) = -W \cos ka, \quad (1)$$

где  $\Delta_0$  — энергетическая щель однородного ПД, связанная с  $u_0$  соотношением  $\Delta_0^2 = \pi g^2 W \kappa u_0^2$ . Здесь  $W$  — ширина зоны проводимости ПД,  $g$  — константа электрон-решеточной связи,  $\kappa$  — коэффициент упругости решетки,  $a$  — период исходной решетки. Согласно (1) "свободный" электрон в зоне проводимости ( $p = k - k_F \ll k_F$ ) без учета поляризации пайерлсовской решетки (ПР) имеет релятивистскую форму закона дисперсии  $E^2(p) = \Delta_0^2 + v_F^2 p^2$  ( $v_F$  — фермиевская скорость).

<sup>1)</sup> Отметим, что при концентрации электронов проводимости на атом  $\zeta$  близких к единице  $|1 - \zeta| \lesssim \Delta/W$ , энергетически выгодным остается удвоение решетки [7]. "Лишние" электроны этом попадут в зону проводимости.

Нашей задачей является феноменологическое описание динамики системы, состоящей из ПР и взаимодействующих с ней "свободных" носителей. В приближении среднего поля, считая величину смещения  $u$  слабо меняющейся (на расстоянии порядка  $a$ ) функцией координат, и учитывая вид закона дисперсии затравочных электронов (1), для плотности энергии исследуемой системы имеем

$$H = N^* \left\{ \frac{1}{2} c_0^2 \left( \frac{d\phi}{dx} \right)^2 + \frac{\Omega^2}{4} (\phi^2 - f^2)^2 \right\} + \bar{\Psi} \left\{ v_F \sigma_1 \frac{d}{dx} + g^* \phi \right\} \Psi. \quad (2)$$

Здесь  $\phi$  — безразмерное скалярное поле, связанное с  $\Delta$  соотношением  $\phi^2 = \Delta^2 / \pi g^2 W^2$ ;  $f = \phi(\Delta_0)$ ,  $\Omega^2 = \omega_A^2 / 2f^2$ ,  $\omega_A$  — частота активации малых колебаний амплитуды параметра порядка (оптические фононы [5]),  $c_0$  — их фазовая скорость;  $N^* = 8\epsilon_0 / \omega_A^2 f^2$ , где  $\epsilon_0$  — разность плотностей энергии системы в металлической и пайерлсовской фазе. Волновые функции  $\Psi$  ( $\bar{\Psi} = \Psi^* \sigma_3$ ) электронов проводимости нормированы на единицу;  $\sigma_i$  — матрицы Паули;  $g^* = \sqrt{\pi} g W^1$ . В феноменологическом подходе константы  $\Delta_0$ ,  $\omega_A$ ,  $c_0$ ,  $\epsilon_0$  — произвольны (определяются из эксперимента). Поэтому функционал энергии (2) можно использовать для описания электронных состояний любой квазиодномерной системы с вещественным скалярным параметром порядка. Имея это в виду, мы получим общие формулы при произвольных константах модели, а в конце обсудим результаты для ПД, используя значения параметров, получаемые в микроскопической теории (см., например, [7]).

Система уравнений движения, соответствующих (2), имеет два качественно различных вида точных решений (ср. с [8, 9]): 1) доменную стенку (кинк), связывающую две вырожденные фазы ПР, и локализованный на ней электрон.

$$\phi = f \operatorname{th} \left( \frac{\omega_A}{2c_0} x \right), \quad \Psi = \left( \frac{\omega_A}{c_0} \right)^{1/2} 2^{-(1+\alpha)/2} \left\{ \operatorname{sech} \left( \frac{\omega_A}{2c_0} x \right) \right\}^\alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

$\alpha = 2c_0 \Delta_0 / v_F \omega_A$ . Энергия состояния  $E_s = \alpha(16/3)\epsilon_0 c_0 / \omega_A$ . Аналогичное решение для антикинки получаем из (3) заменой  $f \rightarrow -f$  и  $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} i \\ -i \end{pmatrix}$ .

Волновая функция  $\Psi$  (3) описывает заполнение уровня в центре запрещенной зоны ( $E = 0$ ); 2) Связанное кинк-антикинковое состояние с локализованным электроном (аналог полярона большого радиуса, явное выражение для которого может быть получено при  $\alpha = 1$  [8] (в микроскопической теории ПД [7];  $\alpha = 2/\sqrt{3}$ ).

<sup>1)</sup> Небезынтересно отметить, что рассматриваемая модель исследовалась рядом авторов [8, 9] в связи с проблемой удержания кварков; микроскопическая теория электронных состояний в ПД [6, 10] оказалась аналогичной полевой модели Гросса — Невье [11].

$$\phi = f \left\{ 1 - \frac{k^2 v_F^2}{\Delta_0 E} \operatorname{sech} [k(x + x_0)] \operatorname{sech} [k(x - x_0)] \right\}, \quad (4)$$

$$\Psi = e^{-iEt} \sqrt{\frac{k}{8}} \begin{pmatrix} \operatorname{sech} [k(x - x_0)] + \operatorname{sech} [k(x + x_0)] \\ \operatorname{sech} [k(x - x_0)] - \operatorname{sech} [k(x + x_0)] \end{pmatrix}, \quad (5)$$

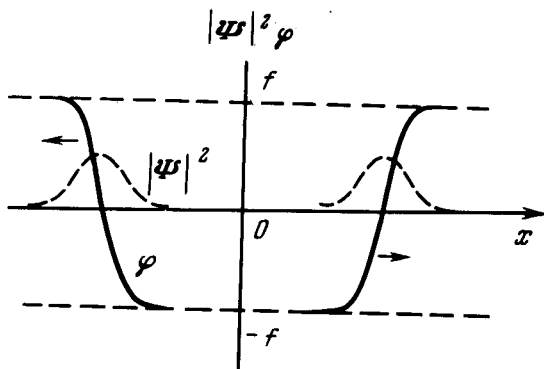
где

$$E^2 = \Delta_0^2 - k^2 v_F^2; \quad \operatorname{th} 2kx_0 = \frac{kv_F}{\Delta_0}; \quad k \sqrt{\Delta_0^2 - k^2 v_F^2} = \frac{\Delta_0^4}{16v_F^2 \epsilon_0}. \quad (6)$$

Энергия состояний (4), (5), отнесенная к энергии кинка (3), есть функция только параметра  $\gamma = \Delta_0 / 2E_s$

$$\frac{E_b}{E_s} = \left\{ \left( 1 + \frac{2}{3} \gamma \right)^{3/2} \left( 1 - \frac{2}{3} \gamma \right)^{3/2} \right\}. \quad (7)$$

Величина  $\gamma$  определяет отношение минимальной энергии "свободного" электрона в зоне проводимости ( $E = \Delta_0$ ) к энергии предельно сильно связанных электрон-решеточных состояний ( $E = 0$ ). Физически ясно, что при  $\gamma \ll 1$  электрон слабо поляризует решетку, незначительно меняя энергетическую щель. При  $\gamma \lesssim 1$  искажение щели порядка ее равновесного значения. Когда  $1 < \gamma < 3/2$  "поляронная" фаза (4), (5) — метастабильна и распадается туннельным путем на кинк-антикинк (рисунок). При  $\gamma > 3/2$  "поляронные" состояния вообще отсутствуют.



Используя макроскопические значения функционала энергии (2) имеем  $E_s = (8/3\sqrt{3}\pi)\Delta_0$ ,  $\gamma \gtrsim 1$ . Поэтому, отвлекаясь от рассмотрения метастабильных состояний, можно утверждать, что легирование ПД типа  $(\text{CH})_x$  обязательно сопровождается сильным искажением решетки и свободные заряды всегда оказываются связанными на кинках и антикинках.

До сих пор мы обсуждали состояния одного "лишнего" электрона в ПР. При достаточной концентрации легированных электронов возможно возникновение солитонной решетки в ПД, период которой можно

связать с концентрацией [4]. Действительно, при  $\gamma > 1$  кинк и антикинк всегда отталкиваются на расстояниях  $x_0 \gg v_F/\Delta_0$ , что является, в сущности, причиной метастабильности поляронных решений.

Простейшее точное периодическое решение для смещения ионов ПР и волновой функции электронов имеет вид

$$\phi = f \sqrt{\frac{2k^2}{1+k^2}} \operatorname{sn}(\gamma x; k); \quad \Psi = c(k) \{dn(\gamma x; k) + kcn(\gamma x; k)\}^{\alpha}, \quad (8)$$

где  $\operatorname{sn} u$ ,  $cn u$ ,  $dn u$  — эллиптические функции модуля  $k$ ,  $\gamma = x\omega_A/c_0 \sqrt{2(1+k^2)}$ ,  $c(k)$  — константа нормировки, определяемая из уравнения

$$\int_0^{D(k)} \Psi^* \Psi dx = 1; \quad D(k) = 4K(k) \sqrt{2(1+k^2)} \frac{c_0}{\omega_A} \quad (9)$$

( $K(k)$  — полный эллиптический интеграл первого рода). Периодическое решение  $\phi$  (8) использовалось в [4] для определения критической концентрации примесных атомов при которой происходит переход ПД в металлическую фазу. Заметим, что без учета фермионов это решение является неустойчивым [12] и стабилизируется согласно описанной выше картине динамики легированных зарядов в пайерлсовской решетке при  $\gamma > 1$ .

Авторы выражают благодарность С.А.Бразовскому, Л.Н.Булаевскому, И.О.Кулику и Д.И.Хомскому за интерес к работе и полезные обсуждения.

Харьковский государственный университет Поступила в редакцию  
им. А.М.Горького 4 апреля 1980 г.

Физико-технический институт  
низких температур  
Академии наук Украинской ССР

### Литература

- [1] W.P.Su, J.R.Schrieffer, A.J.Heeger. Phys. Rev. Lett., **42**, 1698, 1979.
- [2] C.R.Fincher et al. Phys. Rev., **B20**, 1589, 1979.
- [3] M.J.Rice. Phys. Lett., **71A**, 152, 1979.
- [4] M.J.Rice, J.Timonen. Phys. Lett., **73A**, 368, 1979.
- [5] P.A.Lee, T.N.Rice, P.W.Anderson. Solid State Comm., **14**, 703, 1974.
- [6] С.А.Бразовский. Письма в ЖЭТФ, **28**, 656, 1978.
- [7] Л.Н.Булаевский. УФН, **115**, 263, 1975.
- [8] W.A.Bardeen et al. Phys. Rev., **D11**, 1099, 1975.
- [9] D.K.Campbell. Phys. Lett., **64B**, 187, 1976; D.K.Campbell, Y.-T.Liao. Phys. Rev., **D14**, 2093, 1976.
- [10] С.А.Бразовский. ЖЭТФ, **78**, 677, 1980.

[11] D.Gross, A.Neveau. *Phys. Rev.*, Д10, 3235, 1974; R.F.Dashen, B.Hasselacher, A.Neveau. *Phys. Rev.*, Д12, 2443, 1975; R.F.Dashen, S.-K.Ma, R.Rajaraman. *Phys. Rev.*, Д11, 1499, 1975.

[12] И.В.Криве, Е.М.Чудновский. Письма в ЖЭТФ, 21, 271, 1975; V.J.Harrington. *Phys. Rev.*, Д18, 2982, 1978.

---