

ДЕФЕКТЫ ВОЛН ПЛОТНОСТИ И ЭКРАНИРОВАНИЕ В КВАЗИОДНОМЕРНЫХ ПРОВОДНИКАХ

С.Н.Артеменко, Ф.Гляйсберг*¹⁾

Институт радиотехники и электроники РАН
103907 Москва, Россия ²⁾

* *Abteilung Mathematische Physik, Universität Ulm,
D-89069 Ulm, Germany*

Поступила в редакцию 4 апреля 1995 г.

Показано, что нелинейное экранирование одноэлектронными возбуждениями при низких температурах определяет характерные длины и энергии возмущений фазы волн плотности (ВП) в квазиодномерных проводниках. Исследуются 2π фазовые солитоны и возмущения фазы ВП, вызванные примесями, обнаружена возможность образования металлических островков в центре солитона и вокруг примесей.

Как известно, в квазиодномерных проводниках при температуре пайерлсовского перехода T_P образуется электронный кристалл – волна зарядовой (ВЗП) или спиновой (ВСП) плотности [1], а движение волн плотности (ВП) приводит к появлению коллективного механизма проводимости. Свойства проводников с ВП в основном поняты при относительно высоких температурах. При низких же температурах многое неясно даже в полях ниже порогового для скольжения ВП. Например, уменьшается энергия активации проводимости вдоль цепочек, а энергия активации поперечной проводимости остается неизменной [2] и наблюдается резкое падение термо-э.д.с., причем в некоторых веществах, например, в TaS_3 [3] и $(NbSe_4)_{10/3}I$ [4], она даже меняет знак. При этом не происходит изменений постоянной Холла [5, 6], которые указывали бы на смену электронной проводимости на дырочную. Не вполне ясна и природа низкоэнергетических возбуждений при более низких температурах, при которых проявляются стекольные свойства ВП [7] и наблюдается прыжковая проводимость [8]. Известно, что одноэлектронные возбуждения важны при высоких температурах, когда они обеспечивают проводимость в слабых полях и определяют упругие постоянные [9, 10] и трение [11, 12] ВП. Считается, что при понижении температуры электроны вымораживаются и не играют никакой роли. Было предположено [2, 8, 13, 14], что проводимость вдоль цепочек при низких температурах определяется фазовыми солитонами, энергия которых значительно меньше пайерлсовской щели Δ . Мы покажем, что одноэлектронными возбуждениями нельзя пренебрегать и при низких температурах. Нелинейные эффекты в экранировании, которые обычно не учитываются, делают экранирование одноэлектронными возбуждениями эффективным вплоть до самых низких температур. В частности, дефекты электронного кристалла (2π -солитоны) и кристалла (примеси, центры пиннинга) приводят к сильному изгибу энергетических зон, так что уровень Ферми может попасть в область разрешенных одноэлектронных состояний. Электронные возбуждения в образовавшихся таким образом вокруг дефектов металлических островках могут

¹⁾ F. Gleisberg

²⁾ e-mail: lab185@ire.rc.ac.ru

сильно влиять на кинетические и термодинамические свойства проводников с ВП при низких температурах.

Рассмотрим плавные возмущения с характерными длинами, много больше длины корреляции $\xi = v/\Delta$ (v – фермиевская скорость). В этом случае система описывается уравнениями, связывающими фазы $\varphi_n(x)$ и электростатические потенциалы $\Phi_n(x)$ на цепочках n :

$$\frac{\hbar v}{2} \frac{d\varphi_n}{dx} + \sum_m J_{nm} \sin(\varphi_m - \varphi_n) = e \frac{d\Phi}{dx} \quad (1)$$

и уравнением Пуассона с плотностью заряда на n -ой цепочке

$$\rho_n = -\frac{\kappa^2}{4\pi} \left[\frac{\hbar v}{2} \frac{d\varphi_n}{dx} + f(\mu_n) \right] + \frac{\epsilon_\Delta}{4\pi} \frac{d^2}{dx^2} \left(\Phi_n - \frac{\hbar v}{2} \frac{d\varphi_n}{dx} \right). \quad (2)$$

Здесь $1/\kappa$ – радиус экранирования в металлическом состоянии, J_{nm} описывает взаимодействие между цепочками, ϵ_Δ – вклад в диэлектрическую постоянную, связанный с пайерлсовской щелью, $\mu_n(x)$ – локальный сдвиг химического потенциала, отсчитанный от середины пайерлсовской щели. В равновесии μ_n определяется из условия постоянства электрохимического потенциала:

$$\mu_n - \Phi_n + \frac{\hbar v}{2} \frac{d\varphi}{dx} = \mu_e, \quad (3)$$

$\mu_e \ll \Delta$ – сдвиг химического потенциала в основном состоянии, учитывающий, что в реальных проводниках с ВП обычно преобладает либо электронная ($\mu_e > 0$), либо дырочная ($\mu_e < 0$) проводимость, $f(\mu)$ описывает вклад одно-электронных возбуждений в плотность заряда, аналогичный вкладу электронов и дырок в обычных полупроводниках:

$$f(\mu) = \int_{\Delta}^{\infty} d\epsilon \frac{\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2}} [n_F(\epsilon - \mu) - n_F(\epsilon + \mu)], \quad (4)$$

n_F – функция распределения Ферми.

Уравнения (1)–(4) одинаковы для ВЗП и ВСП. Они выводятся из микроскопической теории [9,10] в квазиклассическом приближении. В линейном приближении по μ и непрерывном пределе по n их можно получить варьированием фазового гамильтониана [15]. Основное отличие (1)–(4) от уравнений работы [14], где детально исследовались фазовые солитоны, заключается в учете нелинейной зависимости от μ .

В общем случае решить эти уравнения весьма трудно, тем более, что решение зависит от конкретной кристаллической и электронной структуры вещества – расположения цепочек и вида J_{nm} . Мы решим задачу аналитически в рамках двух моделей: при $T=0$ в модели с взаимодействием между ближайшими цепочками, образующими квадратную решетку, заменяя синусы в (1) на пилообразную функцию, и в одноцепочечной модели [16], в которой взаимодействие цепочек описывается самосогласованным полем. Результаты, полученные в этих моделях, совпадают качественно и подтверждаются численными расчетами [17]. Мы используем также дискретный Лапласиан в уравнении Пуассона для направлений, перпендикулярных цепочкам. Можно показать, что это упрощение, как и замена синуса на пилообразную функцию приводит лишь к численным изменениям результатов.

Начнем с модели с взаимодействием между ближайшими соседями и введем обозначение $J_{n,n+1} = \alpha \hbar v / 2d^2$, где d^2 — площадь, приходящаяся на одну цепочку, а $\alpha \ll 1$ описывает анизотропию кристалла и может быть оценена по анизотропии проводимости. Введем безразмерные переменные, в которых координата x и энергия измеряются в единицах $\ell = d/\sqrt{\alpha}$ и $T_0 = \hbar v \sqrt{\alpha} / 2d$, соответственно ($k_B = 1$). Такие единицы были введены в [14], где они определяли длину и энергию солитона. Характерный масштаб $T_0 \sim T_P$, следовательно, $\delta = \Delta/T_0 \gg 1$ и $\ell \gg \xi$. Введем безразмерный параметр $\zeta = 1/(\kappa d)^2 \equiv \hbar v / 8e^2$, описывающий отношение энергии Ферми к кулоновской энергии. Для типичных значений $v = 2 \cdot 10^7$ см/с $\zeta \approx 10^{-2}$.

В безразмерных переменных уравнения имеют вид

$$\sum_i \sin(\varphi_{n+i} - \varphi_n) = \frac{d\mu_n}{dx}, \quad (5)$$

$$\frac{d\varphi_n}{dx} = -f(\mu_n) + \zeta \left[\sum_i (\Phi_{n+i} - \Phi_n) + \alpha \frac{d^2 \Phi_n}{dx^2} + \alpha \varepsilon_\Delta \frac{d^2 \mu_n}{dx^2} \right], \quad (6)$$

$$\mu_e = \mu_n - \Phi_n + d\varphi_n/dx, \quad (7)$$

где суммирование по i включает соседние цепочки. Замена синуса в (5) на пилообразную функцию $s(\varphi) = 2 \arctg(\operatorname{tg} \varphi)$ делает возможным точное решение уравнений с помощью дискретного преобразования Фурье с переходом от номеров цепочек n к k ($-\pi/2 < k_x, k_y < \pi/2$): $\Phi(k) = \sum_n \Phi_n \exp(-ikn)$. В результате единственная нелинейность в уравнениях остается в функции $f(\mu)$, описывающей вклад электронов и дырок в плотность заряда. При $T = 0$ этот вклад появляется лишь там, где μ достигает края щели. Это происходит только на центральной цепочке. Приведем решение в пренебрежении поправками порядка $\alpha \varepsilon_\Delta \zeta = 2/3\delta^2 \ll 1$. Характер решения определяется параметром $p = \sqrt{\zeta}(\delta \pm \mu_e)/\pi$. При $p > 1$ μ не достигает края щели и решение имеет вид

$$\mu(k, x) = \mu_e \delta(k) \mp \frac{\pi}{\sqrt{\zeta}} e^{-\sqrt{\zeta} \hat{k}^2 |x|}, \quad \varphi(k, x) = \pi [1 + (1 - e^{-\sqrt{\zeta} \hat{k}^2 |x|}) \operatorname{sign} x],$$

где $\hat{k}^2 = 4 - 2 \cos k_x - 2 \cos k_y$. Энергия солитона, вычисленная как сумма упругой энергии ВП и кулоновской энергии, созданной зарядом (2), в этом случае $W = \pi/\sqrt{\zeta}$, или в размерных единицах $W = \sqrt{\alpha} \omega_p$, где ω_p — плазменная частота. При $p > 1$ W меньше энергии одноэлектронного возбуждения, при $p = 1$ эти энергии сравниваются и $\mu_0(0)$ достигает края щели. Длина солитона $\sim 1/\sqrt{\zeta} \gg 1$, а спадание возмущения на расстояниях $x \gg 1/\sqrt{\zeta}$ совпадает с полученным в [14]: $\mu_n = \mp (1/4\zeta |x|) \exp[-n^2/4\zeta |x|]$.

Однако выполнение условия $p > 1$ маловероятно в типичных проводниках с ВП, так как $\zeta \simeq 0,01$, а δ вряд ли превышает 10 (обычная величина $\Delta/T_P \sim 3 \div 5$, а наибольшая, в $(\text{NbSe}_4)_{10/3}\text{I}$, равна 6,9 [1]). Таким образом, мы ожидаем типичных значений $p < 1$ и, значит, появления металлических островков в центре солитона. В этом случае решение находится с помощью сшивки в точке, где $|\mu| = \delta$. В результате получим, что фаза внутри островка изменяется на $2\pi(1-p)$, а его длина равна

$$l_m = 2(\pi p / 6\delta)^{1/3} \int_1^{1/p} dx (x^2 - 1)^{-1/3}. \quad (8)$$

При $p \ll 1$ $l_m = (1/3)(\pi/6\delta)^{1/3}$. В центре солитона $\mu_0(0) = \mp(\delta + (9\pi^4/2\delta)^{1/3}(1 - p^2)^{2/3})$. Проникновение μ в область разрешенных одноэлектронных состояний приводит к небольшому локальному подавлению щели $[\delta(0) - \delta(\infty)]/\delta \sim \delta^{-2/3}$. Отметим, что μ превышает локальное значение δ , но не достигает невозмущенной величины щели. Возмущение фазы и потенциала на цепочках $n \neq 0$ оказывается малым и так же, как в отсутствие металлического островка, медленно спадает, захватывая много цепочек.

Вклад в энергию солитона дают упругая энергия ВП и кулоновская энергия, связанные с возмущениями фазы, а также увеличение энергии из-за подавления щели в области металлического островка. Первый вклад вычислим с помощью стандартных формул (см., например, [14]), а второй, как легко показать, определяется при $|\mu| > \Delta$ плотностью энергии $W_\Delta = (|\mu|\sqrt{\mu^2 - \Delta^2} - \Delta^2)/\pi v$. В результате для вклада области вне металлического островка получим

$$W_\zeta = p(\delta \pm \mu_e). \quad (9)$$

Основной вклад металлического островка в энергию дает упругая энергия ВП (первое слагаемое) и уменьшение щели

$$W_M = (6\pi^2\delta)^{1/3} \int_1^{1/p} (x^2 - 1)^{1/3} dx + 2\delta(1 - p). \quad (10)$$

Как было отмечено, уравнения (1), (2) являются квазиклассическими, по этой причине они нуждаются в обосновании в точках, где $|\mu| \approx \Delta(x) < \Delta(\infty)$. Полное решение на основе микроскопической теории можно легко построить в пределе маленького островка $1 - p \ll 1$. В этом случае запаздывающая функция Грина находится сшивкой квазиклассического решения с решением, описывающим хордовый солитон [18], причем из условия самосогласования для фазы следует [19], что уровень химического потенциала должен проходить через локализованное состояние в центре солитона. В результате фаза на центральной цепочке медленно меняется вне центра солитона, а в центре, где μ достигает края щели, она изменяется на величину $2\theta = 2\pi(1 - p)$ на длине $\xi/\sin\theta$. Энергия солитона совпадает с (9), (10) в пределе $p \rightarrow 1$.

Таким образом, при $T=0$ энергия солитона меньше энергии одноэлектронных возбуждений, если $p > 1$, и больше при условии образования металлического островка $p < 1$.

Условие появления металлического островка при конечных температурах может быть получено непосредственно из (5), (6). Для этого перемножим левые и правые части этих уравнений, проинтегрируем по x от $-\infty$ до x и просуммируем по n . В результате получим соотношение между значениями потенциалов и фаз в точке x и на бесконечности.

$$\sum_{n,i} \left[\frac{\zeta}{2} [\mu_{n+i}(x) - \mu_n(x)]^2 + \int_0^{\mu_n(x)} f(\mu) d\mu - 2 \sin^2 \frac{\varphi_{n+i}(x) - \varphi_n(x)}{2} \right] = 0. \quad (11)$$

Применим это равенство к центру солитона. Пренебрегая $\mu_{n \neq 0} \ll \mu_0$ (и для краткости μ_e), получим, что μ достигает края щели при условии

$$A = \zeta\delta^2 + \pi^2\sqrt{2\delta}\tau^{3/2}/24 < 4. \quad (12)$$

Здесь $\tau = T/T_0$. При $\tau = 0$ (12) отличается от условия $p = 1$, полученного в модели с пилообразной силой, заменой π на 2. Как отмечено выше, из-за малости ζ при $\tau = 0$ следует ожидать выполнения условия (12), а при температурах $\tau > \tau_M \approx 2(9/\delta)^{1/3}(1 - \delta^2\zeta/4)^{2/3}$ становится достаточно эффективным экранирование электронами, термически возбужденными через щель, и сдвиг μ не достигает δ .

Обсудим теперь возмущение фазы, созданное примесями. Пусть при $n = 0$ и $x = 0$ находится точечный заряд, равный заряду электрона, описываемый добавлением к (6) слагаемого $\pi\delta(x)\delta_{n,0}$, где $\delta(x)$ — δ -функция Дирака. В этом случае решение уравнений имеет вид кусков солитона, присоединенных к примеси, а условие образования металлического островка вокруг примеси принимает вид $A < 2$.

Рассмотрим теперь нейтральный центр пиннинга, описываемый стандартным образом слагаемым $\propto \delta(x - x_i) \sin(\varphi_n - 2k_F x_i)$ в уравнении для фазы, и рассмотрим случай сильного пиннинга, когда значение $\varphi(x_i)$ задается примесью. Решение опять имеет вид либо целого солитона, локализованного на примеси, либо кусков солитона, присоединенных к примеси. Условие появления металлического островка в первом случае совпадает с (12), во втором с помощью (11) получим $A < 4 \sin^2(\varphi(x_i)/2)$. Так как $\varphi(x_i)$ — случайное число, это условие по порядку величины совпадает с (12). Отметим, однако, что использованная стандартная модель центра пиннинга слишком груба, так как не учитывает возмущение модуля параметра порядка вокруг примеси [20] и приводит к скачку производной фазы (а значит, и потенциала) на примеси.

Для изучения формы солитона при конечных температурах воспользуемся одноцепочечной моделью, примененной для случая дальнедействующего взаимодействия между цепочками в [16]. Так как согласно решению при $T = 0$ и численным расчетам [17] возмущения фазы и потенциала в солитоне малы на всех цепочках, кроме центральной, такая модель является хорошим приближением и при взаимодействии между ближайшими цепочками. Отбрасывая в (1), (2) малые члены и функции с индексом $n \neq 0$, получим

$$4 \sin \varphi = -\frac{d\mu}{dx}, \quad \frac{d\varphi}{dx} = -4\zeta\mu - f(\mu). \quad (13)$$

При $T = 0$ результаты, полученные с помощью (13), отличаются от (8)–(10) только численными множителями. При повышении температуры увеличивается плотность одноэлектронных возбуждений, они более эффективно экранируют заряд и это приводит к уменьшению сдвига химического потенциала, который при $\tau > \tau_M$ не может достичь δ . При достаточно низких температурах, когда $1 - N_s = \sqrt{2\pi\delta/\tau} \exp(-\delta/\tau) < 4\zeta$, вдали от центра, где $|\mu| < \mu_\zeta = \tau \ln[4\zeta/(1 - N_s)\tau^2]$, спадание возмущения определяется параметром ζ (μ_ζ вычислено с логарифмической точностью). Вклад этой области в энергию равен

$$W_\zeta = (\sqrt{\zeta}/\pi)(\mu_\zeta \mp \mu_e)^2. \quad (14)$$

Вблизи центра солитона, где $\mu^2 > \mu_\zeta^2$, много термически возбужденных электронов и выполняется условие квазинейтральности. Эта область расширяется при повышении температуры и при $1 - N_s > 4\zeta$ распространяется на все состояния, при этом форма солитона похожа на решение для солитонной стенки

в соизмеримой ВЗП (discommensuration) [19]

$$\varphi = 2 \operatorname{arctg} \left[\sqrt{1 + \frac{4}{\tau^2(1 - N_s)} \operatorname{sh}(4x\sqrt{1 - N_s})} \right] - \pi$$

При $\tau(1 - N_s) \ll 1$ энергия солитона может быть оценена как $W \approx 2(\tau^2 + 1)/\tau$, а при $\tau(1 - N_s) \gg 1$ $W \approx 8/\sqrt{1 - N_s}$.

Таким образом, при низких температурах экранирование заряда, созданного возмущением фазы ВП, приводит к большим сдвигам химического потенциала от середины щели. Величина сдвига связана с большими характерными длинами, поэтому металлические области могут быть созданы не только солитонами или примесями, но и другими неоднородностями, например контактами. Энергия солитона растет при понижении температуры и зависит от знака его заряда, причем согласно (9), (10), (14), меньше энергия у солитона, заряд которого противоположен знаку основных одноэлектронных носителей заряда. Значит, при смене механизма проводимости с одноэлектронного на солитонный (или, если проводимость начинает определяться крипом ВП, который можно описать движением солитонов между центрами пиннинга [16]) должна произойти смена знака основных носителей заряда, что может служить объяснением наблюдаемой смены знака термо-э.д.с. Образование металлических островков вокруг примесей при низких температурах может создать условия для прыжковой проводимости и объяснить появление возбуждений с малой энергией.

Мы благодарны К.Билякович, А.Ф.Волкову, В.Воннебергеру, Е.Е.Гольдман, С.В.Зайцеву-Зотову, П.Монсо, В.Я.Покровскому и А.Смонтара за полезное обсуждение. Исследование, выполненное в ИРЭ РАН, поддержано грантом МІQ000 Международного научного фонда и грантом 95-02-05392 Российского фонда фундаментальных исследований.

1. G.Grüner, *Density Waves in Solids*, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1994.
2. T.Takoshima, M.Ido, K.Tsutsumi et al., *Solid State Commun.* **35**, 911 (1980).
3. A.W.Higgs, In *Springer Lecture Notes in Physics*, Eds. by G. Hutirai and J. Solyom **217**, 422 (1985).
4. A.Smontara, K.Biljakovic, J.Mazuer et al., *J. Phys. Cond. Matt.* **4**, 3273 (1992).
5. Ю.И.Латышев, Я.С.Савицкая, В.В.Фролов, *Письма в ЖЭТФ* **38**, 446 (1983).
6. M.Petravić, L.Forro, J.R.Cooper, and F.Levy, *Phys. Rev. B* **40**, 2885 (1989).
7. J.C.Lasjaunias, K.Biljakovic', F.Nad'et al., *Phys. Rev. Lett.* **72**, 1283 (1994).
8. S.K.Zhilinskii, M.E.Itkis, and F.Ya.Nad', *Phys. Status Solidi A* **81**, 367 (1984).
9. С.Н.Артеменко, А.Ф.Волков, *ЖЭТФ* **81**, 1872 (1981).
10. S.N.Artemenko and A.F.Volkov, Chapter 9 In *Charge Density Waves in Solids*, Eds. by L.Gor'kov and G.Grüner, Elsevier Science, Amsterdam, 1989.
11. L.Sneddon, *Phys. Rev. B* **29**, 719 (1984).
12. P.V.Littlewood, *Phys. Rev. B* **36**, 480 (1987).
13. В.Горювиз, J.A.Krumhansl, and E.Domany, *Phys. Rev. Lett.* **38**, 778 (1977).
14. С.А.Бразовский, С.И.Матвеевко, *ЖЭТФ* **99**, 887 (1991).
15. S.Brazovskii, *J. Phys. I (Paris)* **3**, 2417 (1993).
16. А.И.Ларкин, *Письма в ЖЭТФ* **105**, 1793 (1994).
17. S.N.Artemenko and F.Gleisberg, to be published
18. С.А.Бразовский, *ЖЭТФ* **78**, 678 (1980).
19. С.Н.Артеменко, А.Ф.Волков, А.Н.Круглов, *ЖЭТФ* **91**, 1536 (1986).
20. I.Tüttö and A.Zavadovski, *Phys. Rev. B* **32**, 2449 (1985).