

СОЛИТОНЫ С ЛОКАЛИЗОВАННЫМ ЭЛЕКТРОННЫМ СОСТОЯНИЕМ В КВАЗИОДНОМЕРНЫХ ПРОВОДНИКАХ С ВОЛНОЙ ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ

С.Н.Артеменко¹⁾

*Институт радиотехники и электроники РАН
103907 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 29 ноября 1995 г.

Показано, что в квазиодномерных проводниках с волной зарядовой плотности могут существовать автолокализованные солитонные состояния, в которых положение электронного уровня внутри пайерлсовской щели 2Δ смещено от ее середины на величину порядка Δ . Энергия уровня определяется локальным положением химического потенциала и зависит от параметров кристалла и температуры.

PACS 71.45.Lg, 72.15.-v, 72.20.Pa, 75.30.Fv

Как известно, в квазиодномерных проводниках при понижении температуры происходит пайерлсовский переход в состояние с подвижной электронной сверхрешеткой – волной зарядовой или спиновой плотности [1]. При этом на поверхности Ферми образуется энергетическая щель и проводник переходит в полупроводниковое (в случае NbSe_3 , который мы не будем рассматривать – в полуметаллическое) состояние. В отличие от обычных полупроводников, появление локализованных состояний в запрещенной зоне проводников с волной зарядовой плотности (ВЗП) связано с пространственными изменениями параметра порядка ВЗП Δ и должно отыскиваться самосогласованным образом. Локализованные состояния в виде амплитудного солитона с уровнем в центре запрещенной зоны были предсказаны [2, 3] в одномерных цепочках с удвоением периода и наблюдались в полиацетиле. Имеются экспериментальные указания [4] на присутствие локализованных электронных состояний внутри пайерлсовской щели и в веществах с несоизмеримой ВЗП (или соизмеримой ВЗП с порядком соизмеримости больше 2 и малой энергией соизмеримости). Именно к этой группе веществ относятся практически все неорганические квазиодномерные материалы с ВЗП. Теоретически такие состояния также исследовались в [2]. Был сделан вывод о возможности существования возбуждений в виде амплитудных солитонов с локальным электронным уровнем в центре запрещенной зоны и в проводниках с несоизмеримой ВЗП. Обсуждались также решения, соответствующие квазиклассическим решениям в моделях взаимодействующих фермионов в теории поля, описывающие солитоны более общего вида, в которых параметр порядка изменяется в комплексной плоскости ($\text{Re } \Delta$, $\text{Im } \Delta$) вдоль хорды круга $|\Delta| = \Delta_0$, где Δ_0 – невозмущенная величина амплитуды ВЗП, а локальный уровень смещен от центра энергетической щели. Согласно работе [2], подобные хордовые солитоны существовать не могут, поскольку для них не выполняется условие самосогласования для фазы параметра порядка. Мы покажем, что изменения фазы ВЗП вдали от центра солитона, возникающие из-за выравнивания фаз на различных цепочках и сдвигающие локальное положение химического потенциала от середины

¹⁾e-mail: art@ire.cplire.ru

щели, приводят к тому, что условия самосогласования выполняются именно для хордовых солитонов, причем энергия локализованного уровня определяется параметрами вещества и температурой.

Мы будем решать задачу с помощью уравнений для функций Грина, проинтегрированных по компоненте импульса вдоль проводящих цепочек. Эти уравнения были выведены [5, 6] в непрерывном пределе по координатам, перпендикулярным цепочкам. Их нетрудно обобщить на случай больших разностей фаз ВЗП между цепочками, который нам понадобится для исследования локализованных состояний. Для этого надо перейти к узельному представлению Ванье по номерам цепочек, подобно тому, как это было сделано с похожими уравнениями для слоистого сверхпроводника в [7]. Затем, для простоты, мы воспользуемся приближением сильной связи электрона на цепочке, то есть ограничимся взаимодействием между ближайшими соседями, когда спектр в направлении, перпендикулярном цепочкам, имеет вид $\epsilon_{\perp} = 2t_{\perp} (\cos ap_y + \cos ap_x)$, $t_{\perp} \ll \Delta$. В равновесном случае достаточно найти запаздывающую и опережающую функции Грина g^R и g^A , являющиеся матрицами по индексу, относящемуся к двум листам поверхности Ферми квазиодномерного проводника при $+p_F$ и $-p_F$, и по номеру цепочки n . Каждая из этих функций удовлетворяет уравнению

$$i\hbar v \frac{dg_{nm}}{dx} + (\epsilon + \mu_n) \sigma_z g_{nm} - g_{nm} \sigma_z (\epsilon + \mu_m) + i(\sigma_y \Delta_n g_{nm} - g_{nm} \sigma_y \Delta_m) + t_{\perp} \sum_i (A_{n,n+i} g_{n+i,m} - g_{n,m+i} A_{m+i,m}) = 0, \quad (1)$$

где x - координата вдоль цепочек, $\mu_n = -e\Phi_n + \hbar v(d\varphi_n/dx)$ - отклонение химического потенциала от уровня Ферми $\epsilon = 0$, то есть от не зависящего от координат уровня электрохимического потенциала, Φ_n - матричный элемент электрического потенциала на функциях Ванье цепочки n , Δ_n и φ_n - амплитуда и фаза параметра порядка на n -той цепочке,

$$A_{nm} = \sigma_x \cos \frac{\varphi_n - \varphi_m}{2} + i \sin \frac{\varphi_n - \varphi_m}{2},$$

σ_k - матрицы Паули, а суммирование производится по ближайшим соседям. В (1) мы опустили интеграл столкновений, рассматривая чистый материал $\Delta\tau \gg 1$, где τ - время релаксации импульса. Отметим, что уравнения для g выписаны в представлении с выделенной фазой параметра порядка.

Параметр порядка удовлетворяет условиям самосогласования:

$$i\sigma_y \Delta_n = \lambda/8 \int_{-\infty}^{\infty} (g_{nn}^K - \sigma_x g_{nn}^K \sigma_x) d\epsilon, \quad (2)$$

где $g^K = (g^R - g^A) \text{th}(\epsilon/2T)$ Сумма недиагональных компонент матричного уравнения (2) дает уравнение для амплитуды, а разность - для фазы.

Плотность заряда на цепочке n может быть вычислена как

$$\rho_n = \frac{2e}{\pi\hbar v} \left(\frac{1}{8} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Sp}(\sigma_x g_{nn}^K) d\epsilon - \Phi \right). \quad (3)$$

Мы будем решать уравнения (1) по теории возмущений по параметру t_{\perp} , описывающему связь между цепочками, и по электрическому полю вдоль цепочек $-d\Phi/dx$. Решения уравнений (1) имеют два характерных масштаба длин вдоль цепочек: малый, порядка длины корреляции $\xi = \hbar v/\Delta$, и макроскопический, который определяется большими длинами спадаания возмущений фазы и потенциала Φ . Плавные решения, соответствующие последнему масштабу, можно найти в квазиклассическом приближении, как в [6]. В дискретном представлении по номеру цепочки основное отличие от [6] проявляется в функции $g_x = \text{Sp}(g\sigma_x)$, которая нужна для подстановки в условие самосогласования (2) и вывода уравнения для фазы,

$$g_{x,nn} = - \sum_i \frac{it_{\perp}^2 \Delta \sin(\varphi_n - \varphi_{n+i})}{\xi_n \xi_{n+i} (\xi_n + \xi_{n+i})} - \frac{i\hbar v \Delta}{2\xi_n^3} \frac{d\mu}{dx}, \quad (4)$$

в качестве ξ_n в g^R и в g^A следует подставить $\xi^{R(A)} = \pm \sqrt{(\epsilon + \mu_n \pm i0)^2 - \Delta^2}$, где верхний знак относится к R , нижний - к A , при $\epsilon > \Delta$ берется арифметический корень, а $i0$ описывает направление обхода особых точек.

Будем считать, что $T \ll \Delta$, это условие реализуется в проводниках с ВЗП практически при всех температурах ниже пайерлсовского перехода. Кроме того, мы ограничимся случаем, когда сдвиг потенциала μ не достигает края щели: $\Delta - |\mu| \ll T$. Тогда поправки, связанные с μ , в ξ_n можно опустить и подстановка (4) в (2) даст обычные уравнения для фазы (см. [8, 9]):

$$\frac{\hbar v}{2} \frac{d^2 \varphi_n}{dx^2} + \sum_i J \sin(\varphi_{n+i} - \varphi_n) = e \frac{d\Phi}{dx}, \quad (5)$$

где $J = t_{\perp}^2/\hbar v$. Для возмущений, локализованных, в основном, на одной цепочке, это уравнение совместно с уравнением Пуассона приводит к большим по сравнению с ξ длинам, например, при $T=0$ - к длинам порядка $\hbar v/t_{\perp} \sqrt{\zeta}$, где $\zeta = \hbar v/8e^2 \sim 10^{-2}$ [9, 10].

Рассмотрим теперь решения, описывающие хордовые солитоны. В таких решениях параметр порядка изменяется на малых длинах, изменением μ на которых можно пренебречь, можно опустить также слагаемое с t_{\perp} , описывающее взаимодействие между цепочками. Тогда решение (1) имеет вид

$$g_{nn} = \frac{\epsilon_n \sigma_x + i\sigma_y \Delta}{\xi_n} - \frac{\Delta_0^2 \sin^2 \theta [\sigma_x + i\sigma_y \cos \varphi - i\sigma_x \sin \varphi]}{2\xi_n (\epsilon_n - \epsilon_{\theta}) \text{ch}^2(x/\xi_{\theta})}, \quad (6)$$

$$\Delta = \Delta_0 \sqrt{\cos^2 \theta + \sin^2 \theta \text{th}^2(x/\xi_{\theta})}, \quad \varphi = kx - \text{arctg}[\text{tg} \theta \text{th}(x/\xi_{\theta})],$$

где 2θ - изменение фазы на хордовом солитоне, $\epsilon_n = \epsilon + \mu_n$, $\xi_{\theta} = \xi/\sin \theta$, $\epsilon_{\theta} = \Delta_0 \cos \theta$ - энергия локального электронного уровня в солитоне, а параметры θ , k и μ_n , которые в области хордового солитона можно считать постоянными, определяются из условий самосогласования для фазы и шивки с плавно меняющимся решением, на фоне которого возникает хордовый солитон. Решение (6) удовлетворяет условию самосогласования для амплитуды, а его подстановка в условие для фазы дает

$$n_F(\epsilon_{\theta}) = \theta/\pi. \quad (7)$$

Здесь n_F — функция распределения Ферми при энергии равной энергии локального уровня в солитоне. При $T \ll \Delta$ условие (7) означает, что локальный солитонный уровень ϵ_θ должен находиться вблизи уровня Ферми, а при $T = 0$ — на уровне Ферми. Если пренебрегать сдвигом μ от середины щели, то из (7) мы получим $\theta = \pi/2$ и солитон становится чисто амплитудным с уровнем в центре щели, что согласуется с [2]. Однако, вообще говоря, $\mu \neq 0$. Это видно из того, что изменение фазы на 2θ на солитоне означает, что цепочка, содержащая хордовый солитон, приобретает за пределами хордового солитона фазу, отличную от невозмущенного значения фазы на соседних цепочках. Это приводит к возмущениям фазы на больших расстояниях, на которых восстанавливается равновесие (разность фаз 0 или 2π) между цепочками. Появляющаяся производная фазы по координате вдоль цепочек означает ненулевую плотность заряда ВЗП и, следовательно, отличный от нуля электрический потенциал, который в равновесии должен компенсироваться сдвигом химического потенциала, чтобы отсутствовал градиент электрохимического потенциала. Как было показано в [9, 10], масштаб μ , соответствующий изменениям фазы на величину порядка 1, вполне может быть порядка Δ . Отметим, что в результате плавных возмущений фазы вне хордового солитона полное изменение параметра порядка на центральной цепочке, содержащей хордовый солитон, происходит в комплексной плоскости вдоль замкнутой кривой, состоящей из дуги $|\varphi| < \theta$ и хорды $\text{Re } \Delta = \Delta_0 \cos \theta$ окружности $|\Delta| = \Delta_0$.

Энергия хордового солитона, вычисленная с учетом условия (7), в соответствии с [2] равна

$$W_{ch} = \frac{2\Delta \sin \theta}{\pi}. \quad (8)$$

Полное возмущение параметра порядка, связанное с солитоном, может быть найдено с помощью сшивки на расстояниях $|x| \gg \xi_\theta$ фазы и химического потенциала, соответствующих хордовому солитону, с квазиклассическим решением. Решение квазиклассических уравнений с взаимодействием между ближайшими цепочками (аналитически в [9] для упрощенного модельного вида взаимодействия и численно в [10] для взаимодействия вида (5)) показывает, что хотя количественно решение и зависит от конкретного расположения цепочек, его качественный вид мало зависит от модели и может быть описан простейшей моделью с одной цепочкой. Такая модель, в которой взаимодействие с соседними цепочками описывается в приближении самосогласованного поля, была предложена в [11]. Воспользуемся этой моделью. Одно из уравнений мы получим заменой суммы в (5) числом ближайших соседей 4, а в качестве второго воспользуемся уравнением Пуассона в модельной форме (см. [9])

$$\hbar(v/2) \frac{d\varphi}{dx} = -4\zeta\mu - TN \sinh \frac{\mu}{T}, \quad (9)$$

где последний член описывает вклад одноэлектронных возбуждений в плотность заряда, $N = \sqrt{2\pi\Delta/T} \exp(-\Delta/T)$ (см. [6]).

Рассмотрим решение с полным изменением фазы ВЗП на цепочке на 2π , состоящее из хордового солитона в центре, и хвостов, спадание возмущения в которых описывается решением в виде фазовых солитонов, найденным в [9, 10]. Обратимся сначала к пределу $T \rightarrow 0$. Выразим с помощью (5), (9) химический потенциал μ как функцию фазы и приравняем его значению

$\mu = \Delta \cos \theta$ на солитоне, считая фазу непрерывной. Получим условие на параметр θ хордового солитона:

$$\cos \theta = -a \sin \frac{\theta}{2}, \quad a = \frac{t_{\perp}}{\Delta} \sqrt{\frac{2}{\zeta}},$$

имеющее решение при $a < 1$:

$$\theta = 2 \arcsin \frac{a + \sqrt{a^2 + 8}}{4}. \quad (10)$$

Неравенство $a < 1$ совпадает с полученным в [9] условием того, что сдвиг химического потенциала не достигает края щели. Так как величина a является произведением малого и большого множителей, это условие может выполняться или нет в зависимости от параметров материала, причем его выполнение вероятнее в материалах с более выраженной степенью одномерности электронного спектра, где отношение t_{\perp}/Δ имеет меньшую величину. Полная энергия такого комбинированного солитона складывается из энергии хордового солитона (8) и энергии области плавных возмущений фазы

$$W_s = \frac{2\Delta}{\pi} (\sin \theta + a \sin^2 \frac{\theta}{2}), \quad (11)$$

где θ задается формулой (10). Эта энергия не превышает величины Δ при всех $a < 1$, как функция a она достигает максимума $W_s = 0,87\Delta$ при $a = 0,80$. Характер зависимостей (10) и (11) сохраняется в более сложной модели с множеством цепочек, хотя количественно результаты и отличаются.

Как было установлено в [2], заряд, связанный с хордовым солитоном, делокализован. В этом можно убедиться, подставив функцию Грина (6) в (3) и выполнив интегрирование по ϵ . Оказывается, что при условии (7) вклад в плотность заряда от слагаемых, изменяющихся на расстоянии ξ_{θ} выпадает. Таким образом, полный заряд, локализованный в области солитона, определяется областью плавного спада фазы и равен $2e(1 - \theta/\pi)$.

С повышением температуры становится эффективным экранирование электрического поля квазичастицами, что приводит к уменьшению сдвига химического потенциала, в результате чего он оказывается меньше Δ и при $a > 1$, если температура достаточно высока, $T \gg t_{\perp}^{4/3}/\Delta^{1/3}$ [10]. В этом случае в уравнении Пуассона отбрасывается слагаемое с ζ и уравнение сводится к условию нейтральности. Выражая опять с помощью (5), (9) химический потенциал в области плавных изменений как функцию фазы и приравнивая его значению μ на солитоне при условии непрерывности фазы, получим уравнение, определяющее θ и положение химического потенциала при $T \gg t_{\perp}^{4/3}/\Delta^{1/3}$:

$$|\mu| = \Delta \cos \theta = -T A \operatorname{rsh} \frac{\sqrt{2t_{\perp}^3 (1 - \cos \theta) [\sqrt{2} T N + 2t_{\perp} (1 - \cos \theta)]}}{T^2 N}.$$

Это уравнение можно сильно упростить, учитывая, что температура пайерлсовского перехода по порядку величины равна энергии взаимодействия цепочек t_{\perp} [2], и поэтому при $\Delta \gg T$ легко выполняется условие $T N \ll t_{\perp}$. При этом $\mu > T$ и экранирование квазичастицами является нелинейным. В этом случае

вклад хордового солитона в энергию оценивается как

$$W_{ch} = \frac{2}{\pi} \sqrt{2\Delta T \ln \frac{\sqrt{2\pi\Delta T^3}}{8t_{\perp}^2}}.$$

Вклад плавной части возмущения в этом случае также мал по сравнению с Δ , так как он близок к энергии фазового солитона [9] $W_{ph} \approx (2T^2 + t_{\perp}^2)/T$. При еще более высоких температурах, когда $TN > t_{\perp}$, экранирование квазичастицами становится линейным и положение локального уровня приближается к середине щели: $\theta - \pi/2 \propto (t_{\perp}/\Delta) \sqrt{(t_{\perp}/TN)}$.

Таким образом, при достаточно высоких температурах, $T > (t_{\perp}^4/\Delta)^{1/3}$, солитоны с локальным уровнем могут существовать независимо от величины параметра a , определяющего наличие решения в виде солитона при низких температурах, и энергия таких солитонов меньше энергии возбуждения электронов через щель Δ .

До сих пор мы рассматривали возмущения, при которых фаза на цепочке, содержащей солитон, возрастала на 2π и локальный уровень находился ниже середины запрещенной зоны. Разумеется, существуют также аналогичные решения, в которых фаза уменьшается на 2π , а локальный уровень хордового солитона смещен выше середины щели. Отметим также, что поскольку параметр θ хордового солитона определяется положением химического потенциала, энергии локального уровня и солитона могут измениться при учете небольшого сдвига химического потенциала от середины щели в основном (однородном) состоянии, возникающего из-за неполной электрон-дырочной симметрии спектра, а также при наличии еще более плавных возмущений фазы, чем рассмотренные выше. Такие возмущения могут быть вызваны неоднородностями образца, контактами или вариациями фазы под действием центров пиннинга.

Таким образом, в квазиодномерных проводниках с ВЗП могут существовать нелинейные возбуждения ВЗП с возмущением амплитуды параметра порядка, содержащие локальный электронный уровень, положение которого смещено от центра пайерлсовской щели и зависит от температуры. Такие возбуждения могут возникать в квазиодномерном проводнике наряду с другими квазичастицами – одночастичными электронными возбуждениями и фазовыми солитонами [12, 8, 9]. Полученные результаты могут быть применены и к случаю волн спиновой плотности.

Автор благодарен В.А.Волкову и А.Г.Кобелькову за полезное обсуждение. Работа поддержана грантами 1010-СТ93-0051 INTAS, M1Q300 Международного научного фонда и 1-018 МНТП "Физика твердотельных наноструктур".

1. G.Grüner, *Density Waves in Solids*, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1994.
2. С.А.Бразовский, Письма в ЖЭТФ **28**, 677 (1978); ЖЭТФ **78**, 678 (1980).
3. W.P.Su, J.R.Schrieffer, and A.J.Heeger, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 1698 (1979).
4. М.Е.Иткис and Ф.Я.Над', *Synthetic Metals* **29**, F421 (1989).
5. С.Н.Артеменко, А.Ф.Волков, ЖЭТФ **81**, 1872 (1981).
6. S.N.Artemenko and A.F.Volkov, Chapter 9 in *Charge Density Waves in Solids*, Eds. by L. Gor'kov, G. Grüner, Elsevier Science, Amsterdam, 1989.
7. С.Н.Артеменко, ЖЭТФ, **79**, 162 (1980).
8. С.А.Бразовский, С.И.Матвеевко, ЖЭТФ **99**, 887 (1991).
9. С.Н.Артеменко, Ф.Гляйсберг, Письма в ЖЭТФ **61**, 762 (1995).
10. S.N.Artemenko and F.Gleisberg, *Phys. Rev. Lett.* **75** 497 (1995).
11. А.И.Ларкин, Письма в ЖЭТФ, **105**, 1793 (1994).
12. B.Horowitz, J.A.Krumhansl, and E.Domany, *Phys. Rev. Lett.* **38**, 778 (1977).