Краткие сообщения ОИЯИ №4-84 JINR Rapid Communications №4-84
УДК 530.145

КОНТИНУАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ ПОЛИАЦЕТИЛЕНА И ДВУМЕРНЫЕ МОДЕЛИ РЕЛЯТИВИСТСКОЙ ТЕОРИИ ПОЛЯ

В.А.Осипов, В.К.Федянин

Исследована связь между континуальной моделью полиацетилена и двумерными моделями квантовой теории поля при конечной температуре и плотности фермионов. В приближении среднего поля показано, что эффекты, обусловленные конечной температурой T и плотностью фермионов n, приводят к восстановлению симметрии, нарушенной при $T = n = 0$. Получены аналитические выражения для критических значений T_c и n_c. Учет тепловых флуктуаций бозе-поля понижает критическую температуру. Подавление димеризационной щели при изменении плотности π-электронов позволяет объяснить переход диэлектрик - металл в цепочках транс-полиацетилена.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Continuum Polyacetylene Model and Two-Dimensional Quantum Field Theory Models

V.A.Osipov, V.K.Fedyanin

The connection between the continuum polyacetylene model and a two-dimensional quantum field theory models at finite temperature and fermion density is investigated. It is shown in the mean field approximation that the effects due to a finite temperature T and fermion density n may restore the symmetry broken at $T = n = 0$. The critical temperature and fermion density are evaluated. The quantum fluctuations of the Bose field decrease the critical temperature. The distortion of the dimerization gap at n_c may explain the semiconductor metal transition in the trans-polyacetylene chains.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Имеется [1,2] ряд общих свойств, присущих континуальному варианту модели транс-полиацетилена, $(CH)_x$ [3], и двумерным /1+1/ моделям релятивистской теории поля /РТП/: модели Гросса-Невье [4] и ϕ^4 с фермионами [5]. В приближении среднего поля статические уравнения моделей [3,4] после переопределения параметров гамильтонианов совпадают. Это позволило найденные в [4] локализованные решения /кинк, полярон/ переписать для $(CH)_x$ [2]. Динамические свойства моделей [3-5] существенно различны, поэтому указанной аналогией пользоваться нельзя. В [6] получены динамические уравнения для модели [3] и найдено решение в виде движущегося кинка, переходящее в статическом пределе в соответствующее решение [4].

Нарушение симметрии в [3-5] приводит к двукратному вырождению основного состояния, что обусловливает появление топологических солитонов. Это, в свою очередь, модифицирует фермионный энергетический спектр: возникает дискретный уровень в центре энергетической щели. Отметим, что вырождение основного состояния в $(CH)_x$ связано с пайерлсовской димеризацией в результате альтернирования химических связей, обусловленного электрон-фононным взаимодействием. При этом появляется диэлектрическая щель $2\Delta_0$ /Δ_0= 0,7--0,9 эВ/ в электронном спектре. В [4] имеет место динамическое нарушение киральной симметрии и возникает бозонное поле как составное двухфермионное состояние с отличным от нуля вакуумным средним. В [5,10] симметрия нарушена спонтанно. В [4,5] фермионы приобретают массу за счет взаимодействия с нарушающим симметрию бозе-полем.

В настоящей работе мы проанализируем некоторые следствия аналогии "димеризационная щель - масса". Нам представляется, что данная аналогия имеет глубокую физическую основу: как отмечено выше, статические версии моделей [3] и [4] идентичны, а нарушение симметрии в моделях [3-5] приводит к сходным модификациям электронного спектра в "поле" топологического солитона $(CH)_x$ /щели/, альтернативно, при возникновении массы в [4,5]. Показано, что эффекты, обусловленные конечной температурой T и плотностью фермионов n, приводят к восстановлению симметрии, нарушенной при $T = n = 0$, причем аналитические выражения для критических значений T_c и n_c, полученные в [3,4], совпадают. Учет тепловых флуктуаций бозе-поля в моделях [5,10] понижает критическую температуру до величины $T_c^* = T_c/4$. Подавление димеризационной щели при изменении плотности π -электронов позволяет объяснить переход диэлектрик - металл, экспериментально наблюдаемый при легировании цепочек $(CH)_x$.

1. В приближении среднего поля в случае однородной димеризации $\Delta \neq \Delta(x)$ свободная энергия /на один атом углерода/ электронов и решетки в модели [3] имеет вид

$$F(\Delta, T, \mu) = -\frac{2T}{N}\sum_{\ell=1,2}\sum_{q}\ln(1+e^{\frac{\mu-\epsilon_\ell}{T}}) + \frac{\Delta^2}{4\pi t_0 g^2}\,, \qquad /1/$$

где $\epsilon_{1,2} = \pm\sqrt{\Delta^2 + (2t_0\cos q a_0)^2}$, отсчет энергии производится от уровня Ферми в чистом $(CH)_x$, μ - химический потенциал, обусловленный наличием примесных электронов, N - число атомов в цепочке, $g^2 = \frac{2\alpha^2}{\pi\kappa t_0}$; α, κ, t - параметры гамильтониана [3], a_0 - постоянная решетки. Линеаризуя спектр вблизи поверхности Ферми и переходя к континуальному пределу $(N \to \infty)$, условие экстремума /1/ запишем в виде

$$\frac{\partial F}{\partial \Delta} = \Delta\Big(1 - 2g^2\int_0^{KV_F}\frac{dq}{\epsilon}\,\frac{\mathrm{sh}\frac{\epsilon}{T}}{\mathrm{ch}\frac{\epsilon}{T} + \mathrm{ch}\frac{\mu}{T}}\Big) = 0, \qquad /2/$$

где $\epsilon = \sqrt{q^2 + \Delta^2}$, $V_F = 2t_0 a_0$ и введен граничный импульс интегрирования K. Полная ширина зоны $W = 2\sqrt{K^2V_F^2 + \Delta^2} \approx 2KV_F$. В чистом $(CH)_x$ $\mu = 0$, и условие /2/ принимает вид

$$\int_0^{KV_F}\frac{dq}{\epsilon}\tanh\frac{\epsilon}{2T} = \frac{1}{2g^2}\,. \qquad /3/$$

Отметим, что при нулевой температуре уравнение /3/ имеет отличное от нуля решение $\Delta(T=0) = \Delta_0 = W\exp(-1/2g^2)$, минимизирующее свободную энергию $F(\Delta_0) < F(0)$, что согласуется с предположением о димеризованной структуре цепочек $(CH)_x$. Из /3/ несложно получить критическую температуру, при которой исчезает щель в электронном спектре $T_p = \frac{\gamma\Delta_0}{\pi}$, где $\ln\gamma = C$ - постоянная Эйлера. Приведенный результат хорошо известен [7], но для $(CH)_x$ является формальным, поскольку численная оценка имеет величину $T_p = 4600$ K.

Рассмотрим /2/ при конечном значении μ. Численный и аналитический расчеты приводят к критическому значению $\mu_c = \frac{\Delta_0}{\sqrt{2}}$. Причем при $\mu < \mu_c$ щель Δ в электронном спектре постоянна и равна $2\Delta_0$, а при $\mu \geq \mu_c$ $\Delta = 0$. Учитывая, что при $\mu \gg T$ плотность электронов связана с μ посредством $n = 2\mu/\pi V_F$, окончательно получаем

$$n_c = \sqrt{2}\Delta_0/\pi V_F. \qquad /4/$$

При $n > n_c$ исходная симметрия системы восстановлена, топологических солитонов нет.

2. Аналогом свободной энергии в РТП является эффективный потенциал при конечной температуре и плотности фермионов, для построения которого используем технику температурных функций Грина. В приближении среднего поля при $\sigma \neq \sigma(x)$ с учетом однопетлевого вклада эффективный потенциал в модели [4] имеет вид [8]

$$P_{\text{эфф}}(\sigma, T, \mu) = \frac{1}{2}\sigma^2 - 2NT \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int \frac{dk}{2\pi} \ln \frac{k^2 + \omega_n^2 + \frac{\lambda}{N}\sigma^2}{k^2 + \omega_n^2}, \qquad /5/$$

где σ - скалярное поле, $\omega_n = (2n + 1)\pi T - i\mu$, $\lambda = N g_{GN}^2$, N - число типов фермионов, g_{GN} - константа. Условие экстремума /5/ имеет вид

$$\frac{\partial P_{\text{эфф}}}{\partial \sigma} = \sigma\left(1 - \frac{\lambda}{\pi} \int \frac{dk}{\epsilon} \frac{\operatorname{sh}\frac{\epsilon}{T}}{\operatorname{ch}\frac{\epsilon}{T} + \operatorname{ch}\frac{\mu}{T}}\right) = 0. \qquad /6/$$

При $T = \mu = 0$ имеется нетривиальное решение уравнения /6/, определяющее массу фермиона $m_\psi = g_{GN}\sigma = 2\Lambda \exp(-\pi/\lambda)$, где введен импульс обрезания Λ. Очевидно, что при $N = 2$ и $g_{GN}^2 \to \pi g^2$ выражения для m_ψ и Δ_0 совпадают. При $\mu = 0$ и $T \gg m_\psi(T)$ критическая температура из /6/ $T_c = \gamma m_\psi/\pi$, что аналогично выражению для T_p в $(CH)_x$.

При конечном μ получим из /6/ выражение для критической плотности

$$n_c = N m_\psi/\sqrt{2}\pi, \qquad /7/$$

совпадающее с /4/ при $N = 2$. Отметим, что /7/ несколько отличается от аналогичного результата работы [8], что связано с более тщательным анализом минимума $P_{\text{эфф}}(\sigma, T, \mu)$.

3. В модели [5] при построении эффективного потенциала удается учесть дополнительный вклад, обусловленный тепловыми флуктуациями бозе-поля. Согласно [9], при $\mu = 0$ поправки от учета фермионных петель являются малыми, и критическая температура имеет значение $T_c^* = 0{,}385 E_k^\circ$, где E_k° - энергия покоящегося кинка. Если, используя отмеченную аналогию, перенести этот результат на полиацетилен, где, согласно [10], $E_k^\circ = 4\Delta_0/3\pi$, то $T_p^* = 0{,}16\,\Delta_0$ что приблизительно в четыре раза ниже $T_p = 0{,}57\Delta_0$. Таким образом, и предположение [7] о понижении критической температуры до величины $T_p^* = T_p/4$ при учете флуктуаций фононов в рамках статического приближения Гинзбурга-Ландау, с использованием вышеуказанной аналогии находит хорошее подтверждение. От-

метим, что в модели [5] это точный результат, полученный при помощи диаграммной техники с использованием температурных функций Грина.

4. Известно, что при концентрации примеси $y = n/n_0 \simeq 0{,}01$, где $n_0 = 1/a_0$ - плотность π-электронов в чистом $(CH)_x$, имеет место резкое возрастание проводимости цепочек $(CH)_x$, и насыщение достигается при $y \lesssim 0{,}07$ [11]. Предполагается, что носителями тока в $(CH)_x$ являются заряженные солитоны с нулевым спином, формирующие солитонную решетку.

Отметим, что, согласно /4/, $y_c = \frac{n_c}{n_0} = \frac{2\sqrt{2}\Delta_0}{\pi W}$. Для $(CH)_x$ при $0{,}7$ эВ $< \Delta_0 < 0{,}9$ эВ и $W = 10$ эВ, имеем следующую оценку: $0{,}063 < y_c < 0{,}09$.

Таким образом, если при малых y справедлив солитонный механизм проводимости, то при $y \to y_c$ /приблизительно 7% примеси/ происходит подавление димеризационной щели. При этом симметрия системы восстанавливается, солитонов нет. Наиболее вероятным является механизм перехода диэлектрик-металл, предложенный в [12] и связанный с тенденцией примесных атомов к формированию "металлических" кластеров. Результат /4/ справедлив для однородной примеси и может описывать физическую ситуацию внутри достаточно протяженного кластера. Согласно [12], переход диэлектрик - металл в $(CH)_x$ осуществляется при режиме, в котором "металлические" области собираются в континуум. Мы полагаем, что при этом π-связь "разорвана", и все π-электроны являются носителями тока. Таким образом, подвижность носителей в $(CH)_x$ при комнатной температуре имеет величину $\mu' = 0{,}4 \cdot 10^{-2}$ см^2/В·с, что на два порядка ниже, чем в [13], где в качестве свободных носителей рассматривались только примесные электроны /дырки/. Отметим, что, согласно /4/, металлическая проводимость в цепочках $(CH)_x$ может быть достигнута при изменении постоянной решетки на величину порядка 7%. Таким образом, экспериментальное исследование образцов транс - $(CH)_x$ под воздействием внешнего давления является важной экспериментальной задачей.

Литература

1. Jackiw R., Schrieffer J.R. Nucl.Phys., 1981, B190(FS3), p. 253.
2. Campbell D.K., Bishop A.R. Nucl.Phys., 1982, B200(FS4), p. 297.
3. Takayama H., Lin-Liu Y.R., Maki K. Phys.Rev., 1980, B21, p. 2388.
4. Gross D.J., Neveu A. Phys.Rev., 1974, D10, p. 3235.

5. Jackiw R., Rebbi C. Phys.Rev., 1976, D13, p. 3398.
6. Осипов В.А., Федянин В.К. ОИЯИ, Р17-84-138, Дубна, 1984.
7. Булаевский Л.Н. УФН, 1975, 115, с. 263.
8. Dashen R.F., Ma S., Rajaraman R. Phys.Rev., 1975, D11, p. 1499.
9. Осипов В.А., Федянин В.К. III Международный симпозиум по избранным проблемам статистической механики. Сборник аннотаций. ОИЯИ, Д17-84-407, Дубна, 1984, с. 95.
10. Rice M.J. Phys.Lett., 1979, A71, p. 152.
11. Ikehata S. et al. Phys.Rev.Lett., 1980, 45, p. 1123.
12. Tomkiewich Y. et al. Phys.Rev., 1981, B24, p. 4348.
13. Chiang C.K. et al. Phys.Rev.Lett., 1977, 39, p. 1098.

Рукопись поступила 30 ноября 1984 года.