объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р17-86-245

В.А.Осипов, И.С.Стоянова, В.К.Федянин

ДИНАМИЧЕСКИЕ ПОПРАВКИ К ФИЗИЧЕСКИМ ХАРАКТЕРИСТИКАМ СОЛИТОНОВ В ПОЛИАЦЕТИЛЕНЕ

Направлено в журнал "physica status solidi (b)"

1986

I. Введение

Важную роль в описании физических свойств простейшего линейного полимера, транс-полиацетилена $(CH)_x$, играют локализованные возбуждения солитонного типа (см., например, [1]). В работе [2] предложена дискретная модель транс-$(CH)_x$, спектр одночастичных возбуждений которой содержит топологические солитоны – кинки. Гамильтониан модели имеет вид

$$H = -\sum_{n,s} t_{n,n+1}\left(C^+_{n+1,s}C_{n,s} + \text{э.с.}\right) + \frac{K}{2}\sum_n \left(y_{n+1} - y_n\right)^2 + \frac{M}{2}\sum_n \dot{y}_n^2 , \qquad (1)$$

где $C^+_{n,s}(C_{n,s})$ – оператор рождения (уничтожения) π – электрона со спином S на n-й (CH)-группе, y_n – смещение n-го атома из положения равновесия, K – упругая постоянная, M – масса группы CH. В приближении сильной связи $t_{n,n+1} = t_0 - \alpha(y_{n+1} - y_n)$, где t_0 – интеграл перекрывания для недимеризованной цепочки, α – электрон-фононная константа связи. Величины параметров приведены в [2]: $t_0 = 2{,}5$ эВ, $\alpha = 4{,}1$ эВ/Å, $K = 21$ эВ/Å^2, постоянная решетки $a_0 = 1{,}22$Å. Отметим, что кулоновское взаимодействие между π – электронами в (1) не учитывается. Как показано в [3,4], солитонные решения при учете слабого кулоновского взаимодействия на одной цепочке не изменяются, а имеет место перенормировка параметров модели. В [5,6] исследована континуальная модель транс-$(CH)_x$, и показано, что стационарными возбужденными состояниями такой системы являются амплитудные солитоны. В [2,5,6] вычислены такие физические характеристики статических кинков, как энергия рождения, заряд, масса, область локализации.

В работе [5] указано на необходимость исследования эффекта движения солитона в цепочках транс-$(CH)_x$. В [2,5,6] вычислена кинетическая энергия кинка, движущегося с малой скоростью, а в [5] на основании уравнений движения проведено исследование локального заряда автолокализованного возбуждения. Необходимо отметить, что проблема движения солитона в модели (1) к настоящему времени окончательно не решена. В [4,7] показано, что континуальная модель, следующая непосредственно из (1), является более сложной, чем модели, рассмотренные в [5,6]. Полная система уравнений движения не инвариантна относительно обычных групповых преобразований (Лоренца или Галилея), и движущееся солитонное решение не может быть связано с статическим решением простым образом. В [7] эта проблема частично решена путем учета акустической фононной моды. На этой основе построена "квазиреалистическая" модель транс-$(CH)_x$, допускающая движущиеся солитоны.

Более простая картина рассмотрена в [4], где использовано квазистатическое приближение для солитонов, справедливое при $v_c \ll V_F$, где v_c – скорость движения солитона, V_F – скорость Ферми. Отметим, что это приближение вполне обосновано, поскольку в реальной системе предельная скорость солитона определяется инерцией решетки и для кинка имеет величину [8] $v_{пр} \sim 2{,}7\, v_з \ll V_F$, где $v_з$ – скорость звука. Кроме того, в приближении малой концентрации солитонов градиентные члены в уравнениях движения отличаются от неградиентных членов на порядок $(a_0/\xi_c)^2 \sim \frac{1}{50}$ ($\xi_c \simeq 7a_0$ – ширина солитона) и могут быть опущены. В результате уравнения движения принимают простой вид [4]

$$\begin{aligned} i\,u_t(x,t) &= -i V_F\, u_x(x,t) + \Delta(x,t)\, v(x,t), \\ i\,v_t(x,t) &= i V_F\, v_x(x,t) + \Delta(x,t)\, u(x,t), \end{aligned} \qquad (2а)$$

и условие самосогласования дается выражением

$$\Delta(x,t) = -\frac{4\alpha^2 a_0}{K}\sum_{n,s}{}' \left(v_n^*(x,t)\, u_n(x,t) + u_n^*(x,t)\, v_n(x,t) \right). \qquad (2б)$$

Электронные волновые функции $u(x,t)$ и $v(x,t)$ в (2) нормированы условием $\int_{-\infty}^{\infty} dx \left(|u_n|^2 + |v_n|^2\right) = 1$. Суммирование в (2б) осуществляется по занятым состояниям до уровня Ферми, который выбран за нуль энергии. Параметр щели $\Delta(x,t)$ связан с параметрами дискретной модели посредством соотношений $\Delta = 4\alpha y$ и $V_F = 2t_0 a_0$ в системе единиц $\hbar = c = 1$.

В настоящей работе получены точные аналитические решения динамической системы (2). На основе явного вида волновых функций вычислены основные физические характеристики солитонов в транс-$(CH)_x$. Полученные результаты формально справедливы для произвольных скоростей солитонов $v_c < V_F$, что может иметь интерес для моделей, описываемых непосредственно уравнениями (2) (например, модель Гросса-Невье). Однако для транс-$(CH)_x$ с учетом вышеуказанных приближений мы оставляем в конечных результатах только члены порядка β^2.

II. Динамические решения: основное состояние, кинки и поляроны

Отметим, что система уравнений (2) инвариантна относительно преобразований Лоренца, в которых роль скорости света играет граничная скорость V_F [9]. Статические решения системы (2) хорошо известны (см., например, [9]), и решения динамической системы (2) мы будем получать, используя вышеуказанную инвариантность. Имеет место три класса решений.

I. В основном состоянии

$$\Delta = \Delta_0 = W \exp(-1/2\lambda), \tag{3а}$$

где W – полная ширина зоны Бриллюэна, $\lambda = \frac{4\alpha^2 a_0}{\pi V_F K}$. Это соответствует однородно димеризованной цепочке $(CH)_x$, причем $\Delta_0 \simeq 0{,}7$ эВ при $W = 10$ эВ и $\lambda \simeq 0{,}2$. Нормированные электронные волновые функции в валентной зоне с энергией $E_k = -\omega_k$, $\omega_k = \sqrt{k^2 V_F^2 + \Delta_0^2}$, имеют вид

$$\begin{aligned} u_k(x,t) &= \mathcal{N}_k^{(-)} e^{i(kx+\omega_k t)}, \\ v_k(x,t) &= -\mathcal{N}_k^{(+)} e^{i(kx+\omega_k t)} \end{aligned} \tag{3б}$$

и

$$\mathcal{N}_k^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{8\pi}}\left(\frac{\omega_k - \Delta_0}{\omega_k}\right)^{1/2} \frac{\omega_k + \Delta_0 \pm kV_F}{kV_F},$$

причем волновой вектор k лежит в области $-k_F \le k \le k_F$, $k_F = \frac{\pi}{2a_0}$ – импульс Ферми.

2. Второй класс решений – кинки

$$\Delta(\xi) = \Delta_0 \tanh \xi/\xi_c, \tag{4а}$$

где $\xi = x - v_c t + x_0$, v_c – скорость кинка. Ширина кинка $\xi_c = \xi_0\sqrt{1-\beta^2}$, $\beta = v_c/V_F$ и $\xi_0 = V_F/\Delta_0$. Электронный энергетический спектр в присутствии кинка модифицируется: возникает дискретный уровень в центре энергетической щели ($E = 0$). Нормированные электронные волновые функции для этого состояния имеют вид

$$\begin{aligned} u_0(\xi) &= \mathcal{N}_0 \operatorname{sech} \xi/\xi_c, \\ v_0(\xi) &= -\frac{i\mathcal{N}_0}{\nu} \operatorname{sech} \xi/\xi_c. \end{aligned} \tag{4б}$$

В валентной зоне $(E = -\omega_k)$ имеем

$$\begin{aligned} u_k(x,t) &= \mathcal{N}_k e^{i\theta_k(x,t)}\left(\tanh \xi/\xi_c + i\,\frac{\omega_k - kV_F}{\nu\Delta_0}\right), \\ v_k(x,t) &= -\frac{i\mathcal{N}_k}{\nu} e^{i\theta_k(x,t)}\left(\tanh \xi/\xi_c + i\nu\,\frac{\omega_k + kV_F}{\Delta_0}\right), \end{aligned} \tag{4в}$$

где

$$\theta_k(x,t) = kx + \omega_k t + \theta_0, \quad \mathcal{N}_0 = \sqrt{\frac{\nu\Delta_0}{4V_F}}, \quad \nu = \sqrt{\frac{1+\beta}{1-\beta}},$$

$$\mathcal{N}_k = \Delta_0\left[\frac{1+\beta}{8\pi\omega_k(\omega_k + kv_c)}\right]^{1/2}.$$

3. Третий класс решений – поляроны:

$$\Delta(x,t) = \Delta_0 - K_0 V_F(\tanh K_p\xi_+ + \tanh K_p\xi_-) \tag{5а}$$

с $\xi_\pm = x - v_p t \pm x_0$, v_p – скорость полярона, $K_p = \frac{K_0}{\sqrt{1-\beta^2}}$, где $K_0 V_F = \sqrt{\Delta_0^2 - \omega_c^2}$, $\beta = v_p/V_F$. Электронный спектр в присутствии поляронного возбуждения содержит два симметрично расположенных дискретных уровня с $E = \pm\omega_c$. При этом волновые функции имеют вид $(E = \omega_c)$:

$$\begin{aligned} u_0(x,t) &= \mathcal{N}_0 e^{i\theta(x,t)}\left[(1-i)\operatorname{sech} K_p\xi_+ + (1+i)\operatorname{sech} K_p\xi_-\right], \\ v_0(x,t) &= \frac{\mathcal{N}_0}{\nu} e^{i\theta(x,t)}\left[(1+i)\operatorname{sech} K_p\xi_+ + (1-i)\operatorname{sech} K_p\xi_-\right] \end{aligned} \tag{5б}$$

с $\mathcal{N}_0 = \frac{1}{4}\sqrt{\nu K_0}$, и для уровня $E = -\omega_0$: $u_{0-} = i v_0$, $v_{0-} = -i u_0$.

В валентной зоне $(E = -\omega_k)$

$$\begin{aligned} u_k(x,t) &= \mathcal{N}_k e^{i\theta_k(x,t)}\left[R_- - (A_+ + iA_-)\tanh K_p\xi_+ + (A_+ - iA_-)\tanh K_p\xi_-\right], \\ v_k(x,t) &= \frac{\mathcal{N}_k}{\nu} e^{i\theta_k(x,t)}\left[R_+ - (A_- - iA_+)\tanh K_p\xi_+ + (A_- + iA_+)\tanh K_p\xi_-\right], \end{aligned} \tag{5в}$$

где

$$R_\pm = \omega_k + \Delta_0 \pm kV_F, \quad A_\pm = \frac{K_0 V_F}{2}\left(1 \pm \frac{kV_F}{\omega_k - \Delta_0}\right),$$

$$\mathcal{N}_k = \frac{1}{\sqrt{8\pi}}\left[\frac{(\omega_k - \Delta_0)(1+\beta)}{(\omega_k - kv_p)(k^2V_F^2 + K_0^2V_F^2)}\right]^{1/2}.$$

В случае транс-$(CH)_x$ уровень $\omega_0 = \frac{\Delta_0}{\sqrt{2}}$.

III. Физические характеристики солитонов

В случае однородного основного состояния $\Delta \equiv \Delta_0$ локальная плотность в валентной зоне с учетом (3) равна $\rho_k^0 = 1/2\pi$. В присутствии неоднородной деформации изменение локальной электронной плотности можно записать в виде

$$\Delta\rho(\xi) = \sum_{i=1}^{r} n_{B_i}\rho_{B_i}^c(\xi) + \sum_{k,s}\left[\rho_k^c(\xi) - \rho_k^0(\xi)\right], \tag{6}$$

где первое слагаемое обусловлено наличием конечного числа мод, "захватываемых" солитоном, с числами заполнения n_{B_i}, а $\rho_k^c(\xi)$ есть электронная плотность в валентной зоне. Локальный электрический заряд солитона определяется посредством $q(\xi) = e\Delta\rho(\xi)$, e – заряд электрона, а "глобальный" заряд равен

$$Q = e\int d\xi\, \Delta\rho(\xi)\ . \tag{7}$$

Мы вычислили также электрические моменты

$$P_m = e\int \xi^m \Delta\rho(\xi) d\xi\ . \tag{8}$$

При m = I,2, ... имеем, соответственно, дипольный, квадрупольный и т.д. моменты. Энергия рождения солитона выражается через решения уравнений (2) следующим образом /6/:

$$E^c = \sum_i{}' (E_i^* - E_i) + (2\lambda\pi v_F)^{-1}\int d\xi\left[\Delta^2(\xi) - \Delta_o^2\right] + \frac{M}{32 d^2 a_o}\int d\xi\, \dot{\Delta}^2(\xi)\ . \tag{9}$$

Необходимо отметить, что особой аккуратности требует осуществление суммирования в первом слагаемом, поскольку рассеяние на солитоне приводит к асимптотическому сдвигу фазы электронной волновой функции (подробно см. /6,I0/). В "нерелятивистском" приближении имеем

$$E^c = E_o^c + \frac{1}{2}(M_c + \delta M_c)v_c^2\ , \tag{10}$$

где E_o^c есть энергия рождения статического солитона, M_c – эффективная масса солитонного возбуждения, обусловленная кинетическим членом в (9). Поправка к массе δM_c связана с учетом электронного и решеточного вклада в кинетическую энергию (первые два слагаемых в (9)).

А. Движущийся кинк

Дискретный уровень E = 0, возникающий в присутствии кинкового возбуждения, может быть заполнен n = 0,I,2 электронами. Локальная плотность в состоянии с E = 0 есть

$$\rho_o^c(\xi) = \frac{1}{2\xi_c}\,\mathrm{sech}^2\,\xi/\xi_c\ . \tag{11}$$

При этом электронная плотность в валентной зоне

$$\rho_k^c(\xi) = \rho_k^o - \frac{\Delta_o^2}{4\pi\omega_k(\omega_k + k v_c)}\,\mathrm{sech}^2\,\xi/\xi_c\ . \tag{12}$$

Интегрируя по импульсам электронов в валентной зоне от $-k_F$ до k_F, получаем изменение локальной плотности в присутствии кинка

$$\Delta\rho(\xi) = \left[n_o - \frac{2}{\pi}\,\mathrm{arctg}\,\frac{W\sqrt{1-\beta^2}}{2\Delta_o}\right]\frac{1}{2\xi_c}\,\mathrm{sech}^2\,\xi/\xi_c\ . \tag{13}$$

Электрический заряд кинка

$$Q = e\left(n_o - \frac{2}{\pi}\,\mathrm{arctg}\,\frac{W\sqrt{1-\beta^2}}{2\Delta_o}\right)\ . \tag{14}$$

В пределе $W \to \infty$ получаем $Q_o = e(n_o - 1)$. При n_o = I мы имеем нейтральный солитон со спином S = I/2, а при n = 0;2 (что соответствует добавочной дырке (электрону) в цепочке транс-$(CH)_x$) $Q_o = \pm|e|$ и $S = 0$. Если учесть конечность ширины зоны Бриллюэна с учетом малости $\epsilon = \frac{\Delta_o}{W} \ll 1$, то из (I4) получаем поправку к заряду солитона, обусловленную как конечностью зоны Бриллюэна, так и конечной скоростью кинка. В общем случае $Q = Q_o + \delta Q$, где

$$\delta Q = \delta Q_{cт}\left(1 + \frac{1}{2}\beta^2\right)\ , \quad \delta Q_{cт} = e\frac{4\epsilon}{\pi}\ . \tag{15}$$

Отметим, что для $(CH)_x$ $\epsilon \simeq 0{,}07$, и используемое приближение вполне применимо. Результат (I5) означает, что даже в случае нейтрального солитона возникает поправка к заряду порядка ϵ. Этот вывод находится в согласии с утверждением работы /5/, где было также показано, что свойство электронейтральности кинка восстанавливается при учете межцепочечной связи. Поправки от скорости порядка $\beta^2 \ll 1$ дополнительно подавлены малым фактором ϵ.

Поскольку изменение локальной плотности при наличии доменной стенки есть четная функция ξ (I3), то все нечетные электрические моменты отсутствуют $P_{2m+1} = 0$, а для четных моментов получаем

$$P_{2m} = e\left(n_o - \frac{2}{\pi}\,\mathrm{arctg}\,\frac{W\sqrt{1-\beta^2}}{2\Delta_o}\right)\frac{2^{2m-1}-1}{2^{2m-1}}\,B_m\left(\frac{W}{\Delta_o}\right)^{2m}(1-\beta^2)^m a_o^{2m}\ , \tag{16}$$

где B_m – числа Бернулли. В приближении $\epsilon \ll 1$, $\beta^2 \ll 1$ квадрупольный момент имеет вид

$$P_2 = \frac{e a_o^2}{12}\left(\frac{W}{\Delta_o}\right)^2\left[(n_o - 1)(1-\beta^2) + \frac{4}{\pi}\left(\frac{\Delta_o}{W}\right)\right]\ . \tag{17}$$

В $(CH)_x$ квадрупольный момент нейтрального солитона $P_2^o \simeq 2ea_o^2$, заряженного $P_2^{\pm} \simeq 16ea_o^2$. Отметим, что принципиальную возможность измерения квадрупольного момента дает метод ядерного квадрупольного резонанса.

Используя (9), вычислим энергию кинка

$$E^c = \frac{2\Delta_0}{\pi} + \left(\frac{\Delta_0}{\pi\lambda} + \frac{M\Delta_0^3}{6\lambda\pi K}\right)\beta^2, \tag{18}$$

где λ определено в (3а). Первое слагаемое соответствует энергии рождения статического кинка $E_0^c = 2\Delta_0/\pi$. Второй член в скобках есть хорошо известная масса кинка $M_c \simeq 6m_e$, а первый член в скобках определяет динамическую поправку к массе. Следует отметить, что $\delta M_c \simeq 0{,}09\,M_c$, т.е. в противоположность утверждению авторов работы /6/ поправка существенна.

В. Движущийся полярон

Локальная плотность, обусловленная дискретным поляронным уровнем $E = +\omega_0$ имеет вид

$$\rho_0^P(\xi) = \frac{K_P}{4}\left(\mathrm{sech}^2 K_P\xi_+ + \mathrm{sech}^2 K_P\xi_-\right), \tag{19}$$

а плотность в валентной зоне

$$\rho_k^P(\xi) = \rho_k^c - \frac{K_0^2\omega_k}{4\pi(\omega_k - kv_P)(k^2+K_0^2)}\left(\mathrm{sech}^2 K_P\xi_+ + \mathrm{sech}^2 K_P\xi_-\right). \tag{20}$$

Изменение локальной плотности в присутствии поляронной деформации

$$\Delta\rho(\xi) = \frac{K_P}{4}\left(\mathrm{sech}^2 K_P\xi_+ + \mathrm{sech}^2 K_P\xi_-\right)\Big\{(n_0 - 2) - \frac{4\sqrt{1-\beta^2}}{\pi}\,\mathrm{arctg}\frac{W}{2K_0V_F} +$$
$$+ \beta^2\frac{4}{\pi}\frac{K_0^2V_F^2}{[K_0^2V_F^2(1-\beta^2) - \Delta_0^2]}\left[\frac{\Delta_0}{K_0V_F}\,\mathrm{arctg}\frac{W\sqrt{1-\beta^2}}{2\Delta_0} - \sqrt{1-\beta^2}\,\mathrm{arctg}\frac{W}{2K_0V_F}\right]\Big\}, \tag{21}$$

где мы предположили, что уровень $E = -\omega_0$ имеет заполнение $n = 2$. Необходимо отметить, что в отличие от кинка в (21) имеются поправки порядка β^2 , не подавленные малостью параметра ϵ . Используя (7) и (21), можно непосредственно вычислить заряд полярона. Рассмотрим первоначально предел $W \to \infty$. В статическом случае $\Delta\rho^P(x) = n_0\frac{K_0}{4}[\mathrm{sech}^2 K_0(x+x_0) + \mathrm{sech}^2 K_0(x-x_0)]$ и $Q_0^P = en_0$. В $(CH)_x$ $n_0 = 1$ и $Q = e$, т.е. мы имеем возбуждение с зарядом e и неспаренным спином $S = 1/2$, соответствующее обычному полярону. В случае движущегося полярона при $\beta^2 \ll 1$ заряд изменится на величину

$$Q_\infty^P = Q_0^P + \delta Q_\infty^P, \tag{22}$$

где $\delta Q_\infty^P = e\beta^2\frac{\Delta_0 - K_0V_F}{\Delta_0 + K_0V_F}$. В пределе $\omega_c \to 0$ (т.е. поляронный уровень стремится к уровню кинка) $K_0V_F \to \Delta_0$ (см. (5а)) и $\delta Q_\infty^P \to 0$ в согласии с результатом для кинка, где нет поправок порядка β^2 . В противоположном пределе $\omega_0 \to \Delta_0$ (и, соответственно, $K_0V_F \to 0$) поправка к заряду максимальна $\delta Q_\infty^P = e\beta^2$. В случае $(CH)_x$ $\omega_0 = K_0V_F = \Delta_0/\sqrt{2}$, так что $\delta Q_\infty^P \simeq 0{,}17e\beta^2$. Рассмотрим поправки порядка ϵ . Из (7) и (21) получаем

$$Q^P = Q_0^P + \delta Q_{ст}^P + \delta Q_g^P, \tag{23}$$

где

$$\delta Q_{ст}^P = \frac{8K_0V_F}{\pi W}e, \quad \delta Q_g^P = \delta Q_\infty^P + \beta^2\delta Q_{ст}^P.$$

Если мы еще раз вернемся к аналогии с кинком и устремим в (23) $\omega_0 \to 0$, то $\delta Q_{ст}^P \to 2\delta Q_{ст}^c$, что и следовало ожидать, поскольку в этом пределе полярон "переходит" в широко разведенную кинк-антикинковую пару. В $(CH)_x$ $\delta Q_{ст}^P \simeq \sqrt{2}\,\delta Q_{ст}^c = 0{,}09e$.

Как и в случае кинка, все нечетные электрические моменты полярона равны нулю, а квадрупольный момент в $(CH)_x$

$$P_2^P = ea_0^2\left(\frac{W}{\Delta_0}\right)^2\Big\{\Big[n_0 + \frac{4\sqrt{2}}{\pi}\left(\frac{\Delta_0}{W}\right)\Big]\Big[\frac{1}{6} + \frac{4}{\pi^2}\,\mathrm{arth}^2\frac{1}{\sqrt{2}+1}\Big] +$$
$$+ \beta^2\Big[(3-2\sqrt{2})\Big(\frac{1}{6} + \frac{4}{\pi^2}\,\mathrm{arth}^2\frac{1}{\sqrt{2}+1}\Big) - \frac{1}{6}n_0\Big]\Big\} \tag{24}$$

Учитывая основной вклад, получаем $P_2^P \simeq 33ea_0^2$.

Вычислим энергию полярона. Первые два слагаемых в (9) дают вклад в энергию

$$E^P = \frac{4}{\pi}\left[K_0V_F + \omega_0\,\mathrm{arctg}\frac{\omega_0}{K_0V_F}\right] + (n_0 - 2)\omega_0 +$$
$$+ \beta^2\Big\{\frac{2K_0V_F}{\pi}\Big[1 - 3\Big(\frac{\omega_0}{K_0V_F}\Big)\mathrm{arctg}\Big(\frac{\omega_0}{K_0V_F}\Big)\Big] + \frac{2K_0V_F}{\pi\lambda}\Big\}, \tag{25}$$

где мы ограничились членами порядка β^2 .

Учитывая значение ω_0 в $(CH)_x$, окончательно приходим к выражению

$$E^P = \frac{2\sqrt{2}\Delta_0}{\pi} + \frac{\sqrt{2}\Delta_0}{\pi}\Big[\Big(1 - \frac{3\pi}{4}\Big) + \frac{1}{\lambda}\Big]\beta^2. \tag{26}$$

Таким образом, энергия рождения статического полярона в $(CH)_x$ $E_0^P = \frac{2\sqrt{2}\Delta_0}{\pi}$. Это хорошо известный результат (см., например, /9/). Слагаемые порядка β^2 в (26) определяют динамическую поправку к массе полярона. Отметим, что в отличие от кинка имеется поправка к кинетической энергии, обусловленная электронной подсистемой (первый член в квадратной скобке). Учет кинетического члена в (7) приводит к значению $E_k^p = \frac{1}{2} M_p v_p^2$, где масса полярона есть /II/

$$M_p = \frac{M\Delta_0^3}{16\alpha^2 a_0 V_F}\left\{\frac{8}{3}X^3 - 4(1-X^2)\left[\ln\left(\frac{1+X}{1-X}\right) - 2X\right]\right\}, \qquad (27)$$

где $X = \frac{K_0 V_F}{\Delta_0}$. В случае $(CH)_x$ $X = \sqrt{2}$ и $M_p \simeq 1{,}3\, m_e$. Таким образом, динамическая поправка к массе $\delta M_p = \frac{2\sqrt{2}\Delta_0}{\pi V_F^2}\left(1 - \frac{3\pi}{4} + \frac{1}{\lambda}\right) \simeq 0{,}37\, M_p$ весьма существенна. В заключение отметим, что эффект движения солитона приводит к существенной модификации его физических характеристик. Использование перенормированных величин, характеризующих солитоны в транс-$(CH)_x$ представляется весьма важным, поскольку модель полиацетилена (I) позволяет объяснить электрические, магнитные, оптические и транспортные свойства цепочек $(CH)_x$ на основе солитонного механизма. Вместе с тем, еще раз подчеркнем, что в случае $(CH)_x$ все результаты справедливы только для медленно движущихся солитонов $\beta^2 \ll 1$. Проблема изучения реальной динамики солитонов в модели (I) остается открытой.

Авторы выражают благодарность С.А. Бразовскому за стимулирующую беседу и полезное обсуждение результатов.

Литература

1. Streitwolf H.W. Phys. stat. sol.(b), 1985, 127, p. 11.
2. Su W. P., Schrieffer J.R., Heeger A.J. Phys. Rev. Lett., 1979, 42, p. 1698; Phys. Rev. B, 1980, 22, p. 2099.
3. Hara J., Fukuyama H. J. Phys. Soc. Jpn, 1983, 52, p. 2128.
4. Осипов В.А., Федянин В.К. ОИЯИ, Р17-84-138, Дубна, 1984.
5. Бразовский С.А. ЖЭТФ, 1980, 78, с. 677.
6. Takayama H., Lin-Liu Y.R., Maki K. Phys. Rev., B, 1980, 21, p. 2388.
7. Leblanc Y. et al., Phys. Rev. B, 1984, 30, p. 5958.
8. Bishop A.R. et al. Phys. Rev. Lett., 1984, 52, p. 671.
9. Campbell D. K., Bishop A.R. Nucl. Phys., B, 1982, 200, p. 297.
10. Dashen R.F., Hasslacher B., Neveu A. Phys. Rev. D, 1975, 12, p. 2443.
11. Campbell D.K., Bishop A.R., Fesser K., Phys. Rev., B, 1982, 26, p. 6862

Рукопись поступила в издательский отдел
17 апреля 1986 года.

Осипов В.А., Стоянова И.С., Федянин В.К. Р17-86-245

Динамические поправки к физическим характеристикам солитонов в полиацетилене

Получены солитонные решения континуальных уравнений движения модели транс-$(CH)_x$ в пределе медленно движущихся солитонов. Рассматриваются эффекты, обусловленные движением солитона. Вычислены основные физические характеристики движущихся солитонов /энергия рождения, масса, заряд, ширина, электрические моменты/. В случае кинка эффекты движения подавлены малым параметром ϵ = 0,07, тогда как для полярона динамические поправки весьма существенны.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1986

Перевод авторов

Fedyanin V.K., Osipov V.A., Stoyanova I.S. P17-86-245

Dynamical Corrections to the Physical Characteristics of Solitons in Polyacetylene

The soliton solutions to the continuum equations of motion of the trans-$(CH)_x$ model in the limit of the slowly moving solitons are obtained. The effects due to the soliton motion are considered. The main physical characteristics of moving solitons /the energy of creation, mass, charge, width, electrical moments/ are calculated. In the case of the kink excitation the effects of motion are reduced by the small parameter ϵ = 0.07 whereas for the polaron excitation the correction terms proportional to the polaron velocity are considerable.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1986