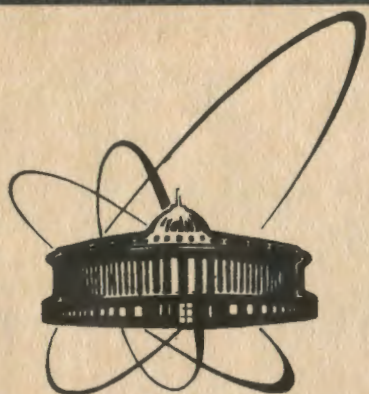


91-15



сообщения  
объединенного  
института  
ядерных  
исследований  
дубна

P17-91-15

В.К.Федянин

ТЕОРИЯ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ  
В ЛТФ ОИЯИ (1986 - 1990 гг.)

Доклад на НКС ОИЯИ по теоретической физике  
(17 апреля 1990 г.)

1991

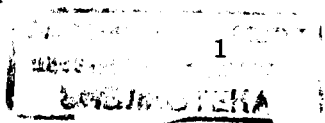
В отчете мы кратко обрисовем результаты исследований по теории конденсированного состояния в ЛТФ ОИЯИ, полученные в 1986-1990 г.г. в рамках темы ПТП ОИЯИ 3-113-0792-86/90, резюмирую также возможные будущие направления исследований и некоторые ожидаемые результаты. Будут даны также ссылки на некоторые основные работы.

## 1. НИЗКОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

### А. Квазиодномерные системы ( $d = 1$ )

Исследования здесь велись по линии построения моделей, описывающих биополимеры, полиацетилен, АВ-полимеры, молекулу ДНК. При этом, исходя из модельного гамильтониана на квазиодномерной решетке, в котором учитывались наиболее существенные внутримолекулярные взаимодействия, получалось дифференциальное нелинейное уравнение (или система уравнений), решения которого использовались для описания частицеподобных возбуждений в этих системах: рассчитывались их статистические и динамические характеристики. В ряде случаев на ЭВМ анализировалась законность перехода к континуальному приближению, влияние на эти характеристики внутримолекулярных взаимодействий "несущественного типа" вторых соседей, а также дисперсия фоннных степеней. Эта программа реализована для полиацетилена, полиенов, АВ-полимеров в цикле работ<sup>1/</sup>. Рассчитаны спин, заряд, энергия рождения, размеры области локализации, энергия связи солитонов, биполярнов, триполярнов, поляриэкситонов. Предсказан эффект солитонстрикции: изменение длины  $L$  цепочки при образовании топологического дефекта (солитона)<sup>1в/</sup>. Анализ на ЭВМ показал, что континуальное приближение вполне "работоспособно"<sup>1в-1д/</sup>: отличие характеристик, полученных с применением ЭВМ, от рассчитанных с использованием решений системы дифференциальных уравнений  $\sim 7 \div 10\%$ . Учет фоннной шубы<sup>1в/</sup> сокращает область локализации возбуждения<sup>1в/</sup>; а учет ангармонизма по  $\sigma$ -связи стабилизирует поляронное состояние<sup>1в/</sup>.

Конечно, очерченный выше круг задач интересен и сам по себе, но резко возросший в последнее десятилетие интерес к исследованию, в частности,  $(CH)_x$  (теоретический и экспериментальный) обусловлен,



конечно, тем, что при легировании имеет место фазовый переход диэлектрик — металл. Эксперимент свидетельствует в пользу фазового перехода 1-го рода. Достаточно простая модификация гамильтониана /16/ также приводит к этому выводу. Однако ясно, что наличие примесей должно кардинально менять модельный гамильтониан. В этой связи весьма актуальными представляются работы /2а/, где поля топологических дефектов (дислокаций и дисклинаций) выступают как калибровочные поля в нелинейной теории упругости.

Отметим в этой связи также обзор /2б/. Поля дефектов — хороший кандидат на роль "ловушки" допированных электронов (или дырок). (Работы /2/, естественно, шире квазиодномерной тематики).

Цикл исследований был выполнен по построению реалистической модели ДНК /3/. Параметры гамильтониана брались из биохимических и биофизических экспериментов, квантовохимических расчетов. Удалось в общем виде учесть взаимодействие водородных связей комплиментарных оснований и диссипацию энергии, поступающей в клетку. Начаты работы по модификации модели с учетом подкачки энергии к ДНК. Вся совокупность результатов дает возможность построить реалистическую модель ДНК как открытой системы.

## Б. Теория поверхностных явлений ( $d = 2$ )

Закончен цикл исследований по расчету вклада межэлектронных корреляций в адсорбате. Рассчитаны /4/ энергия связи, перенос заряда, расстояние адатома от поверхности, сдвиг уровня Ферми во всем интервале покрытий.

В основу были положены модельные гамильтонианы, полученные методом приближенного вторичного квантования Боголюбова /4а/. В них удалось детальнее, нежели в гамильтонианах типа Андерсона и Изинга, описать электронную и ионную подсистему, обсудить различные аппроксимации, делаемые при получении модельных гамильтонианов, и более эффективно использовать методику расчета равновесных характеристик хемисорбции Гримли — Ньенса — Брэнига — Шонхаммера /3б/.

Предполагается помимо расчета равновесных характеристик кислородного, хемисорбированных металлами, учесть корреляционные эффекты в полной подсистеме адсорбата и, пользуясь теорией абсолютных скоростей реакций, провести расчет вклада электронной и ионной подсистем в скорости адсорбции и десорбции. Актуальность данной тематики обуславливается в первую очередь тем, что хемисорбция — определяющая стадия катализа. Развитый подход вполне приспособлен для проведения расчетов хемисорбционных характеристик на металлических пленках

различной толщины ( $10 < d < 150 \text{ \AA}$ ). Этот круг задач также важен с прикладной точки зрения.

## II. МНОГОСЛОЙНЫЕ СТРУКТУРЫ РАЗЛИЧНОЙ ГЕОМЕТРИИ С ОПТИЧЕСКИ НЕЛИНЕЙНЫМ ЭЛЕМЕНТОМ

Исследования по данной проблематике в трехслойных структурах для плоскопараллельной геометрии /5а/ являются продолжением наших работ, начатых в 1982 г., в которых был предсказан новый тип оптической бистабильности. Новым является численный анализ стабильности распространения нелинейных волноводных мод. Планируются исследования поведения характеристик нелинейных мод на металлической и сверхпроводящих подложках.

В /5б/ проанализированы особенности теплопереноса — (рассматривались и режимы "с обострением") — в системе концентрических сфер и соосных цилиндров. Результаты могут быть использованы в астрофизике, а также для описания поведения капли в нелинейной среде в поле лазера.

В /5в/ удалось объяснить повышение  $T_c(N)$  во многослойных джозефсоновских контактах на основе достаточно простой модели. Здесь перспективным представляется учет потерь энергии на неоднородностях джозефсоновских контактов и более реалистический учет зависимости тока через контакты от разности фаз.

В целом очерченная выше проблематика данного раздела мне представляется весьма перспективной именно с прикладной точки зрения. Естественным "кандидатом" на роль параметра порядка при описании фазового перехода определенного типа антиферромагнетиков ("экситонных изоляторов") оказались тороидальные моменты /6/. В /6/ перечислены некоторые соединения такого типа; актуальной задачей является исследование особенностей взаимодействия тороидальных моментов.

## III. ПОЛЯРОН ПЕКАРА — ФРЕЛИХА

Исследования в области теории поляронов — традиционные направления в ЛТФ ОИЯИ. Отметим выполненные в 1987-1990 гг. работы /7а/ по расчету характеристик полярона с помощью оригинального варианта диаграммной техники (по константе связи), разложению по обратной размерности  $d^{-1}$  (многомерные поляроны), использованию аппроксимации Паде и, наконец, цепочки нелинейных интегродифференциальных уравнений, получаемые на основе обобщенного функционала Лу — Латин-

жера. Отметим работу /46/, в которой рассчитаны энергия и эффективная масса кластера из  $N$  поляронов и показано, что учет кулоновского отталкивания стабилизирует кластерные состояния.

Расчеты эффективной массы  $(\alpha, \beta)$  и энергии  $E(\alpha, \beta)$  полярона в широком интервале  $\beta \equiv (kT)^{-1}$  и параметра связи  $\alpha$  будут продолжены. Но стоит отметить, что возбужденные состояния полярона весьма существенны для интерпретации химических и биохимических реакций /7в/: сольватированный электрон, перенос заряда в биомолекулах /7в/. Весь этот круг задач в последнее время интенсивно решается и в связи с исследованиями по молекулярной электронике и биоэлектронике.

#### IV. ЖИДКОСТИ, СМЕСИ, КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ

Ранее нами был предложен новый вариант метода Монте-Карло: пространством выборки в нем являлось пространство коэффициентов потенциала взаимодействия молекул. С использованием этого метода исследован процесс кристаллизации /8а/: "заложив" в расчет требование плотнейшей упаковки, мы получили в аналитическом виде уравнение состояния, описывающее и процесс "кристаллизации".

Изучена термодинамика модели  $\gamma$ -меров на решетке, в которой учитывается неэквивалентность контактов (это модулирует, например, анизотропную жидкость). Результаты использованы для расчета термодинамических равновесных характеристик смеси углеводов.

В /8б/ предложен новый подход к описанию сильно взаимодействующих систем с сингулярными потенциалами. На ряде конкретных моделей продемонстрировано, что этот подход дает лучшую точность, нежели другие приближенные методы.

В /8д/ изложены основные особенности метода, развитого авторами для построения уравнения состояния существенно неоднородной среды. Удастся построить уравнение состояния вещества как в однофазной области, так и в области сосуществования фаз. При этом в качестве независимых переменных, через которые выражается локальный потенциал (давление), используются химический потенциал  $\mu$  и температура  $T$ . В основе такого подхода лежит предложенная еще Гиббсом и Дюгемом дифференциальная форма записи первого начала  $T/g$ , оперирующая с не претерпевающими разрыва в области фазового перехода переменными  $(\mu, T)$ . Как нам представляется, этот подход и должен быть использован при анализе поведения сильно флуктуирующих систем. В нашем конкретном случае давление  $p$  как функция  $(\mu, T)$  представляет собой всюду непрерывную, но не гладкую в области фазового перехода поверх-

ность. Она и может быть определена как "термодинамическая поверхность". Объемные плотности числа частиц ( $\rho$ ) и энтропии ( $\sigma$ ) являются сильно флуктуирующими переменными, они определяются как термодинамические производные в дифференциальной форме Гиббса — Дюгема.

#### V. НЕКОТОРЫЕ ОБЩИЕ ПОДХОДЫ В МОДЕЛЯХ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ И ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИХ ДЛЯ РАСЧЕТА РАВНОВЕСНЫХ И НЕРАВНОВЕСНЫХ ФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КОНКРЕТНЫХ ВЕЩЕСТВ

В рамках данной проблематики был закончен ряд циклов исследований, легший в основу докторских диссертаций /9/. Ссылки на работы содержатся в авторефератах.

В /9а/ был развит квазичастичный подход к описанию поведения в квантовых кристаллах, краудионам и солитонам в квазиодномерных структурах. Была создана последовательная нелинейная квантовая теория динамики деформируемого твердого тела с квазичастичными возбуждениями. Для его реализации автор построил микроскопическую теорию дефектов в квантовых кристаллах (дефектонов), квантовую теорию краудионов и солитонов, проанализировал влияние квантовых эффектов на их делокализацию и переход их в новый вид возбуждений — солитонные волны.

В /9б/ на основе строгих математических методов, опирающихся на построение модельных гамильтонианов, вариационных подходов к вычислению т/д-потенциалов, учет флуктуационных эффектов, были изучены т/д-свойства систем с электрон-дырочной и структурной неустойчивостью. В /9в/ развит новый подход к описанию систем, далеких от равновесия. Это потребовало существенно модифицировать теорию линейного отклика Кубо. Предложенный метод, использованный его создателем для интерпретации поведения высоковозбужденных полупроводников, оказался эффективным и для расчета отклика на внешнее воздействие (импульсное поле лазера) металлов, с естественным учетом (в определенном приближении) их зонной структуры.

В /9г/ детально изучено влияние эффектов конечных размеров на термодинамические и корреляционные функции систем многих частиц с дальним действием. Развита строгая теория конечноразмерного подобия для таких систем.

По данной теме сделано свыше 40 докладов на всесоюзных и международных конференциях. Стоит отметить участие в организации конференций:

1. "Солитоны и приложения" (Юрмала, 1986 г.; Пушино, 1987 г.; Дубна, 1989 г.).

2. "Различные аспекты теории полярона и ее приложения" (Пушино, 1989 г.).

3. NEED-s-(16-26. VIII, Дубна, 1990 г.).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. а. Fedyanin V.K., Osipov N.A., Stoyanova I.S. — *phys.stat.sol.(b)*, 1986, 137, p.547.
- б. Осипов В.А., Федянин В.К. — ТМФ, 1987, № /, с.73.
- в. Fedyanin V.K., Osipov N.A. — *phys. stat. sol. (b)*, 1988, 147, p.199;  
Fedyanin V.K., Osipov V.A., Malek J. — *J. Phys. Math.*, 1989, 1, p.2951.
- г. Osipov V.A. et al. — *phys. stat. sol. (b)*, 1989, 153, p.207.
- д. Osipov V.A., Bochnacka G., Fedyanon V.K. — *phys. stat. sol.*, 1989, 155, K29; 1990, 160, B29.
- е. Springborg M., Drechsler S.L., Malek J. — *Phys. Rev. B*, 1990, v.41, No. 17.
- ж. Peeters F.M., Smondyrev M.A. — *Phys. Rev. B*, 1990 (in press).
2. а. Osipov V.A. — *Phys.Lett. A*, 1990, v.146, B 1,2; *JINR*, E17-90-17, Dubna, 1990; *Physica* (in press).
- б. Виницкий С.И. и др. — УФН, 1990, т.160, в.6.
3. а. Gochev I., Lisy V., Fedyanin V.K. — *Studia Bioph.*, 1986, 116, p.59.
- б. Lisy V., Fedyanin V.K. — *Studia Bioph.*, 1986, 116, p.65; *Studia Bioph.*, 1987, 121, p.125; in "Solitons and Applications", World Scient. and International Publisher (ed. by V.G.Makhankov, V.K.Fedyanin, O.K.Pashaev), 1990; *JINR*, E17-90-77, Dubna, 1990; *Journ of Phys. A: Mathematical and General* (in press).
4. а. Гавриленко Г.М. — ДАН СССР, 1988, т.301, № 2; 1988, т.301, № 3; *Physica A*, 1988, 150, p.137.
- б. Гавриленко Г.М., Ли Бен Ир, Федянин В.К. — ОИЯИ, P17-86-59, Дубна, 1986; *Gavrilenko G.M., Cardenas R., Fedyanin V.K. — Phys. Lett. A*, 1988, v.131, No.6; *Surf. Sci.*, 1989, 217, p.468;  
*Gavrilenko G.M., Taranko R., Taranko R., Fedyanin V.K. — Surf. Sci.*, 1988, 203, p.212; *phys. stat. sol. (b)*, 1989, 155, p.326; *Surf. Sci.*, 1990, 230, p. 329, 334; *Surf. Sci.*, 1990, 231, p.113;  
*Taranko R., Cardenas R., Taranko E. — Surf. Sci.*, 1990.
5. а. Michalake D. et al. — *Sol. St. Comm.*, 1988, v.6, No.5;  
Михалаке Д., Назмитдинов Р., Федянин В.К. — ЭЧАЯ, 1989, т.20, в.1;  
*Michalake D., Nazmitdinov R., Fedyanin V.K. — in NEED-s, 90, Springer* (in press).
- б. Уварова Л.А., Федянин В.К. — Математическое моделирование, 1990, № 6, а также в NEED-s 90, Springer (in press) by V.E.Grishin, V.A.Cherenkov, V.K.Fedyanin; *JINR*, E17-90-53, Dubna, 1990.

6. Dubovik V.M., Tugushev V.V. — *Phys. Rep.*, 1990, 137, No. 4, p.145.

7. а. Смондырев М.А. — ТМФ, 1987, 68, с.29;

*Selyugin O.V., Smondyrev M.A. — Physica A*, 1987, 142, p.555; *phys. stat. sol. (b)*, 1989, 155, p.155;

Амирханов И.В. и др. — Препринт НИВЦ, Пушино, 1988.

б. Кочетов Е.А., Смондырев М.А. — ТМФ, 1990, т.85, № 1.

в. "Возбужденные поляронные состояния в конденсированных средах", Пушино, НИВЦ, 1990.

8. а. Зряков И.Н., Федянин В.К. — ЖФХ, 1985, т.59, № 2; 1986, т.60, № 2.

б. Зряков И.Н., Федянин В.К. — В сб.: Краткие сообщения ОИЯИ № 3 (29)-88, Дубна, 1988.

в. Баталин О.Ю., Федянин В.К. — *Zeit. f. Phys. Chemie*, 1987, 268, 2, p.1.

г. Yukalov V.I. — *Physica A*, 1990, 167, p.833; *Phys. Rev.*, 1990, A42, p.3324;

*Fedyanin V.K., Rogankov V.B. — In: Book X, Conf. on Chemical Thermodynamics, Prague, 1988, p.D23; In: Book XI IVPS Conf. on Chemical Thermodynamics, Como, Italy, 1990.*

9. а. Пушкаров Д.И. — ОИЯИ, 17-86-223, Дубна, 1986 (автореферат докторской диссертации).

б. Тончев Н.С. — ОИЯИ, 17-86-358, Дубна, 1986 (автореферат докторской диссертации).

в. Heiner E. — *phys. stat. sol. (b)*, 1988, 148, p.599; *Physica A*, 1990, 1966, p.633;

*Wenschuk V., Heiner E. — phys. stat. sol. (b)*, 1990, 160, p.225;

*Heiner E. — Untersuchungen zur Dynamik stark korrelierter quasi-eindimensionaler und hoch angeregter Elektronensysteme in Festkörpern. (Thesen zur Dissertation B zur Erlangung des akademischen Grades, Dr. sc. nat.).*

г. Бранков Й.Г. — ОИЯИ, 17-90-290, Дубна, 1990 (автореферат диссертации).

Рукопись поступила в издательский отдел  
15 января 1991 года.