

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

0-741

17-87-411

УДК 530.145

ОСИПОВ

Владимир Андреевич

ДИНАМИКА ЧАСТИЦЕПОДОБНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ  
В МОДЕЛИ ПОЛИАЦЕТИЛЕНА  
И ДВУМЕРНЫХ ПОЛЕВЫХ МОДЕЛЯХ

Специальность: 01.04.02 - теоретическая  
и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Дубна 1987

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований.

Научный руководитель:  
доктор физико-математических наук  
профессор

В.К.Федянин

Официальные оппоненты:  
доктор физико-математических наук  
профессор

В.Г.Маханьков

доктор физико-математических наук

Б.А.Иванов


Ведущее научно-исследовательское учреждение:  
Физико-технический институт низких температур, г.Харьков.

Автореферат разослан "25" августа 1987 г.

Защита диссертации состоится "30" сентября 1987 г.  
на заседании Специализированного совета К0.47.01.01/Лаборатории  
теоретической физики Объединенного института ядерных исследований,  
г.Дубна, Московская область.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Совета  
кандидат физико-математических наук

  
А.Е.Дорохов

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность темы

Развитие физики проводящих полимеров в последнее десятилетие в немалой степени связано с изучением полиацетилена. Этот простейший линейный полимер обладает целым рядом примечательных свойств. В нормальных условиях полиацетилен является хорошим диэлектриком. Однако при легировании имеет место резкое возрастание проводимости вплоть до полной металлизации. Это обуславливает перспективы практического использования полиацетилена в качестве легкого металла. Экспериментально установлено, что частицеподобные возбуждения в полиацетиле не имеют необычные соотношения заряда и спина, а именно: заряженные носители являются бесспиновыми, тогда как нейтральные имеют спин  $S = 1/2$ . С учетом квазиодномерного характера цепочек полиацетилена, этот и другие экспериментальные факты представляют богатый материал для теоретического изучения данного образца.

Теоретическое описание полиацетилена существенно опирается на две гипотезы:

- 1) диэлектрические свойства полиацетилена можно объяснить, считая его диэлектриком Пайерлса;
  - 2) основную совокупность экспериментальных данных можно описать на основе концепции наличия в нем топологических солитонов.
- Оба эти предположения нашли отражение в одномерной дискретной модели сильной связи Су, Шриффера, Хигера. В настоящее время основным объектом теоретического исследования является изучение физических следствий дискретной модели транс-полиацетилена и ее континуального варианта, а также анализ физических свойств солитонов и выяснение их роли в физике полиацетилена. В этой связи большой интерес вызывает исследование эффектов, выходящих за рамки простейшей модели сильной связи: учет межэлектронного взаимодействия, эффектов связи между цепочками, влияние примеси и т.п. В частности, важное значение имеет изучение эффектов, связанных с нарушением электрон-дырочной симметрии исходного гамильтониана. Другим важным направлением является исследование свойств солитонных возбуждений с учетом реальной динамики фононов.

Дополнительный интерес обусловлен аналогией между физическими следствиями континуальной модели транс-полиацетилена и двумерных  $(I + I)$  моделей квантовой теории поля. Взаимный интерес представляет изучение структуры основного состояния при конечных значениях температуры и химического потенциала, физических свойств солитонов и исследование такого важного эффекта, как дробление фермионного числа в поле солитона. В последние годы намечается тенденция к взаимопроникновению идей и методов физики конденсированного состояния и квантовой теории поля.

#### Цель работы

- Описание дискретной модели транс-полиацетилена в расширенной схеме сильной связи.

- Построение континуальных уравнений движения модели транс-полиацетилена с учетом динамики решетки и их решение.

- Вычисление физических характеристик солитонов с учетом эффекта движения солитона.

- Изучение структуры основного состояния двумерных  $(I + I)$  моделей квантовой теории поля с учетом конечных значений температуры и химического потенциала.

- Вычисление заряда солитона в модели двухатомных полимеров при конечной температуре и химическом потенциале.

#### Научная новизна и практическая ценность работы

Впервые исследованы динамические свойства континуальной модели транс-полиацетилена, получены соответствующие уравнения и найдены решения для движущихся солитонов.

Впервые в рамках самосогласованной схемы вычислены физические характеристики движущихся солитонов.

Впервые проведен анализ межзонных  $\pi-\pi^*$ -переходов в расширенной модели сильной связи транс-полиацетилена, учитывающей дополнительное влияние интегралов перекрытия ближайших соседей и на этой основе дано объяснение экспериментальных данных по неупругому рассеянию электронов.

Впервые изучена структура основного состояния  $N \rightarrow \infty$  модели Гросса-Неве при конечном значении химического потенциала и двумерной  $(I + I)$  модели  $\varphi^4$  с фермионами при конечных значениях температуры и химического потенциала. На этой основе исследовано поведение величины заряда, локализованного на солитоне.

#### Апробация диссертации

Результаты, полученные в диссертации, докладывались и обсуждались на семинарах Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований, были представлены на III Международном симпозиуме по избранным проблемам статистической механики (Дубна, 1984), на Всесоюзном семинаре "Нелинейные волны" (Калининград, 1984), на I и II Всесоюзных рабочих совещаниях "Теория солитонов и приложения" (Дубна, 1985; Юрмала, 1986), на Всесоюзной конференции "Современные проблемы статистической физики" (Львов, 1987).

#### Публикации

По результатам диссертации опубликовано десять работ.

#### Объем работы

Диссертация состоит из введения, трех глав и заключения. Содержит 85 страниц машинописного текста, 16 рисунков. Библиографический список литературы включает 89 ссылок и 94 наименования.

#### Содержание работы

Во введении представлены основные физические идеи, положенные в основу моделей, исследуемых в диссертации. Обсуждаются основные направления теоретического исследования модели транс-полиацетилена и результаты, полученные к настоящему времени. Кратко изложено содержание диссертации.

Глава I посвящена рассмотрению основных физических характеристик транс-полиацетилена и изучению свойств дискретной модели, предложенной для его описания.

В § 1 рассмотрены физико-химические свойства полиацетилена. Представлены основные экспериментальные данные по электрическим, магнитным, транспортным свойствам образцов транс-полиацетилена и дана их физическая интерпретация на основе солитонной картины.

В § 2 изложены некоторые результаты, полученные на базе гамильтониана модели транс-полиацетилена, предложенного Су, Шриффером, Хигером. В квазиклассическом по решеточным степеням свободы приближении получены дискретные уравнения движения и условие самосогласования. Исследована структура основного состояния и фоновый спектр модели. Обсуждаются солитонные решения и их свойства, а также роль солитонов в физике полиацетилена.

В § 3 исследована расширенная модель сильной связи транс-полиацетилена, учитывающая интегралы перекрытия ближайших соседей. Вычислен электронный энергетический спектр и построены волновые



функции основного состояния. Вычислена продольная диэлектрическая проницаемость, зависящая от волнового вектора и частоты и построена область поглощения, обусловленная межзонными  $\bar{N}-\bar{N}^*$ -переходами. Показано, что на основе разумной величины интеграла перекрытия вторых соседей можно объяснить экспериментальные данные по электронным потерям в транс-полиацетилене.

Глава II посвящена изучению динамических эффектов в континуальной модели транс-полиацетилена.

В § I построена континуальная модель транс-полиацетилена с учетом реальной динамики фононов. Получены динамические уравнения модели и в квазистатическом пределе найдены их решения в виде движущихся солитонов (кинк, полярон). Обсуждается изменение электронного спектра в присутствии солитонов.

В § 2 вычислены основные физические характеристики движущихся солитонов (заряд, масса, энергия рождения, электрические моменты). Показано, что эффект движения солитона приводит к существенной модификации его физических характеристик. Исследуется роль поляронов в физике полиацетилена.

В § 3 получено выражение для динамического структурного фактора солитона и интенсивности неупругого рассеяния света на газе солитонов в полиацетилене. Исследовано поведение параметров центрального пика, обусловленное солитонным вкладом.

Глава III посвящена исследованию свойств двумерных  $(I+I)$  моделей квантовой теории поля при конечных значениях температуры и химического потенциала.

В § I приведен лагранжиан модели Гросса-Неве. Показано, что при  $N=2$  модель Гросса-Неве эквивалентна квазистатическому пределу модели транс-полиацетилена. В однопетлевом приближении построен эффективный потенциал модели при конечных значениях температуры и химического потенциала фермионов. Исследована структура основного состояния модели Гросса-Неве при  $N \rightarrow \infty$ . Обсуждается возможность использования полученных результатов в физике полиацетилена.

В § 2 приведен лагранжиан двумерной модели  $\varphi^4$  с фермионами. В приближении слабой связи построен эффективный потенциал модели при конечных значениях температуры и химического потенциала. Исследована структура основного состояния моделей  $\varphi^4$  и  $\varphi^4$  с фермионами. Показана возможность приложения полученных результатов к описанию структурного фазового перехода в физике конденсированных сред.

В § 3 рассмотрен эффект дробления фермионного заряда в присутствии солитона, на примере модели двухатомных полимеров, обобщающей все рассмотренные в диссертации модели. Вычислена величина заряда, локализованного на солитоне, и изучено поведение заряда при конечных значениях температуры и химического потенциала. Дана физическая интерпретация полученных результатов.

В заключении сформулированы основные результаты, полученные в диссертации.

#### Основные результаты, полученные в диссертации:

1. Получены динамические уравнения модели транс-полиацетилена в континуальном приближении и найдены их солитонные решения.
2. Вычислены основные физические характеристики движущихся солитонов.
3. Вычислен динамический структурный фактор солитона в модели транс-полиацетилена и интенсивность рассеянного на газе солитонов света.
4. Рассмотрена расширенная модель сильной связи транс-полиацетилена. Получена область поглощения, обусловленная межзонными  $\bar{N}-\bar{N}^*$  переходами с учетом интегралов перекрытия вторых соседей.
5. Вычислено критическое значение химического потенциала в модели Гросса-Неве для  $N \rightarrow \infty$ , при котором происходит спонтанное нарушение симметрии. Показано, что по плотности свободных фермионов имеет место фазовый переход первого рода.
6. Исследован фазовый переход с восстановлением симметрии в двумерной  $(I+I)$  модели  $\varphi^4$  с фермионами и вычислены критические значения температуры и химического потенциала.
7. Изучено поведение заряда, локализованного на солитоне, при конечных значениях температуры и химического потенциала в модели двухатомных полимеров, а также в моделях Гросса-Неве и  $\varphi^4$  с фермионами.

#### Результаты диссертации опубликованы в работах:

1. Осипов В.А., Федянин В.К. Динамическая версия модели полиацетилена. Сообщение ОИЯИ, PI7-84-138, Дубна, 1984.
2. Осипов В.А., Федянин В.К. Рассеяние света на солитонах в полиацетилене. Сообщение ОИЯИ, PI7-84-567, Дубна, 1984.
3. Fedyanin V.K., Osipov V.A. The phase transition in the 1+1 dimensional  $\varphi^4$  model with fermions. In: 3-d Int. Symp. on Selected Problems in Stat. Mech. JINR, D17-84-850, p.276-280, Dubna, 1984.

4. Осипов В.А., Федянин В.К. Континуальная модель полиацетилена и двумерные модели релятивистской теории поля. Краткие сообщения ОИЯИ, № 4-84, стр. 33-38, Дубна, 1984.
5. Fedyanin V.K., Osipov V.A. The effects due to finite temperature and chemical potential in two-dimensional field theory models and polyacetylene. Preprint JINR, E17-85-629, Dubna, 1985.
6. Fedyanin V.K., Osipov V.A. Fractional charges at finite temperature and chemical potential. Solid State Communications, 1986, Vol.59, No9, p.629-631; JINR, P17-85-630, Dubna, 1985.
7. Осипов В.А., Федянин В.К. Полиацетилен и двумерные модели квантовой теории поля. Лекции для молодых ученых, вып. 33, ОИЯИ, P17-85-809, Дубна, 1985.
8. Fedyanin V.K., Osipov V.A., Stoyanova I.S. The dynamical effects in the Gross-Neveu and polyacetylene models. In: JINR Rapid Communications, No15-86, p.19-24, Dubna, 1986.
9. Fedyanin V.K., Osipov V.A., Stoyanova I.S. Dynamical corrections to the physical characteristics of solitons in polyacetylene. physica status solidi(b), 1986, Vol.137/2, p.547-554; JINR, P17-86-245, Dubna, 1986.
10. Drechsler S.L., Heiner E., Osipov V.A. Trans-polyacetylene within the extended tight-binding picture and evidence for next-nearest neighbour hopping from the dispersion of interband transition edges. Solid State Communications, 1986, Vol.60, No5, p.415-418; JINR, E17-86-390, Dubna, 1986.

Рукопись поступила в издательский отдел  
II июня 1987 года.