



ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

17-96-377

На правах рукописи
УДК 538.915; 539.2

0-741

ОСИПОВ
Владимир Андреевич

ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА УПРУГОГО КОНТИНУУМА
С ТОПОЛОГИЧЕСКИМИ ДЕФЕКТАМИ

Специальность: 01.04.02 — теоретическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Дубна 1996

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований.

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,
профессор

А.М.Косевич

доктор физико-математических наук,
профессор

В.И.Альшиц

доктор физико-математических наук,
профессор

И.В.Пузынин

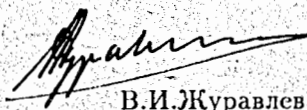
Ведущее научно-исследовательское учреждение:
Математический институт РАН им. В.А.Стеклова, Москва.

Защита диссертации состоится на заседании специализированного совета Д047.01.01 в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований "4" декабря 1996 г. по адресу г. Дубна, Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Объединенного института ядерных исследований.

Автореферат разослан "31" октября 1996 г.

Ученый секретарь совета
кандидат физико-математических наук


В.И.Журавлев

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Задача описания физических свойств упругих материалов с топологическими дефектами является актуальной для современной теории конденсированного состояния, поскольку позволяет глубже понять физику реальных кристаллов. Интерес к исследованию данной проблемы обусловлен появлением все новых экспериментальных данных, что связано как с развитием техники эксперимента, так и с изучением дефектов в новых материалах. Результаты экспериментов заставляют вносить коррективы в имеющиеся теоретические схемы.

Топологическими дефектами в упругих материалах являются дислокации и дисклинации, а в одномерном случае - топологические солитоны. Достоверно установлена важная роль дислокаций в процессах пластической деформации кристаллов в широком интервале температур. Дисклинации важны в сильно деформированных твердых телах. Концепция дисклинаций существенно используется при описании структуры так называемых новых материалов: стекол, аморфных тел, полимеров, поликристаллов, композиционных материалов, жидких кристаллов и т.п.. В последние годы резко возрос интерес к экспериментальному изучению структурных, оптических, электронных и магнитных свойств этих материалов ввиду их активного применения в современной микроэлектронике. Топологические солитоны активно исследуются в линейных полимерах с сопряженными связями, прежде всего в транс-полиацетилене и двухатомных полимерах.

Особый интерес представляет анализ электронных свойств дефектных материалов. Эта проблема является актуальной как с теоретической, так и с экспериментальной точки зрения. Хорошо известно, например, что, присутствуя даже в незначительных концентрациях, дефекты существенно изменяют механические, электрические, оптические и транспортные свойства полупроводников и металлов. В последнее время дефектные структуры активно исследуются в связи с проблемой высокотемпературной сверхпроводимости. Весьма примечательны электронные свойства линейных полимеров. В обычном состоянии они являются диэлектриками. Однако при допировании цепочек наблюдается их металлизация, причем проводимость становится близкой к проводимости нормальных металлов. К тому же имеет место необычное соотношение спина и заряда у носителей. А именно, наблюдается перенос спина без переноса заряда и перенос заряда без переноса спина. Теоретическое

Объединенный институт
ядерных исследований
Библиотека

объяснение этого необычного эффекта найдено с помощью привлечения гипотезы о наличии в цепочках топологических солитонов.

К настоящему времени объекты с нетривиальной топологией обнаружены и хорошо изучены в различных конденсированных средах. Так, например, накоплен обширный материал о свойствах вихрей в жидком гелии, солитонов в низкоразмерных системах (магнетиках, линейных полимерах, органических молекулах), исследованы свойства магнитных вихрей в сверхпроводниках и т.д..

Следует отметить, что интерес к анализу топологических объектов в конденсированных средах выходит за рамки обычных задач физики конденсированного состояния. Возникают интересные аналогии с эффектами, обусловленными топологическими объектами в других областях физики (теории поля, гравитации и т.п.). Так, в настоящее время известно несколько точных решений нелинейных моделей, играющих важную роль в современной теории поля. Это прежде всего решение т'Хофта-Полякова для монополя в неабелевой модели Хиггса, инстантоны в квантовой хромодинамике, солитоны в модели Скирма, магнитные вихри Нильсена-Ольсена в абелевой модели Хиггса и т.д.. Исследование физических систем, содержащих эти объекты, определило значительный прогресс в современной теории поля. Отметим, что возможность прямого экспериментального изучения топологических дефектов в конденсированных средах делает эти среды идеальным полигоном для проверки предсказаний теории поля, касающихся свойств топологических объектов.

Несмотря на достигнутые успехи, в теории топологических дефектов в упругих средах имеется ряд серьезных проблем, заставляющих искать принципиально новые подходы при описании материалов с дефектами. Дело в том, что обычно при теоретическом описании дислокаций и дисклинаций используют линейную теорию упругости. При этом приходится ограничить рассмотрение дефектами, вызывающими малые деформации среды. В случае дислокаций это означает малые значения вектора Бюргера, а в случае дисклинаций – малые значения индекса Франка (так называемые малоугловые дисклинации). Ясно также, что в рамках линейной теории упругости нельзя описать физически интересную область ядра дефекта. В случае, когда деформации становятся большими, необходимо использовать существенно нелинейную модель упругой среды, что чрезвычайно усложняет анализ.

Одним из современных направлений исследований является калибро-

вичная теория дислокаций и дисклинаций, которая позволяет самосогласованным способом описывать упругую среду с топологическими дефектами. Важным достоинством предложенной модели является тот факт, что она позволяет построить динамику дислокаций и дисклинаций. Несомненно, проблема создания единой модели для описания как упругих, так и электронных свойств материалов с топологическими дефектами является актуальной. Такая модель позволяет дальше продвинуться в самосогласованном описании физики реальных кристаллов.

Актуальной задачей физики линейных полимеров является изучение физических свойств топологических солитонов и поляронов и выяснение их роли в физике двухатомных полимеров, полиенов и других проводящих полимеров.

Цель диссертации состоит в построении единой калибровочной теории дислокаций и дисклинаций для описания физических свойств упругого континуума с топологическими дефектами, в поиске новых решений для топологических дефектов и исследовании их физических характеристик, в разработке методов вычислений в теории линейных полимеров.

Научная новизна и практическая ценность. В диссертации открыто новое направление в калибровочной теории дефектов – развит единый подход к описанию электронных свойств упругих материалов с топологическими дефектами, основанный на принципе калибровочной симметрии.

Впервые сформулирована самосогласованная калибровочная модель упругой среды с топологическими дефектами, включающая электронные поля в калибровочно-инвариантном виде. Электроны рассматриваются в приближении эффективной массы, взаимодействие с решеткой вводится в рамках теории деформационного потенциала. В основу описания взаимодействия электронов с полями дефектов положен принцип минимальной связи. Как результат, характер взаимодействия прямо связан с видом калибровочной группы.

Впервые удалось выйти за рамки линеаризованной схемы при описании топологических дефектов. А именно, найдены точные решения самосогласованных нелинейных уравнений модели для топологически стабильных дисклинационного монополя и вихря, что позволило описать напряжения и деформации в области ядра дефектов. Получено явное выражение для радиуса ядра дефекта.

Сформулирована модель для описания топологических дефектов в

двумерных упругих системах. При этом существенно использована калибровочная группа трансляций и вращений в двумерной плоскости $SO(2) \times T(2)$. Эта модель актуальна при описании топологических дефектов в пленках, мембранах и слоистых структурах, а также в случае линейных дефектов, когда напряжения, обусловленные дефектом, лежат в одной плоскости.

В рамках калибровочного подхода построена самосогласованная линейаризованная схема для описания топологических дефектов малой мощности. Показано, что в рамках данной схемы удается корректно описать поля напряжений и деформаций в приближении высших порядков. В рамках сформулированной схемы впервые получено точное решение для малоугловой клиновой дисклинации. Найден явный вид источника в уравнениях теории упругости, обусловленного дисклинацией. Показано, что он целиком определяется калибровочными полями дисклинаций.

В рамках калибровочного подхода представлен анализ спектра длинноволновых колебаний упругих материалов с дислокациями и дисклинациями. Получены динамические уравнения калибровочной теории дефектов для объемной и плоской задач в линейном по смещениям приближении. Исследован случай прямолинейных винтовой дислокации и малоугловой клиновой дисклинации. Впервые исследован характер упругих колебаний в присутствии топологически стабильных дисклинаций. В частности, получены асимптотические решения для радиальных колебаний и представлен качественный анализ характера колебаний в случае дисклинационного монополя и вихря.

В рамках сформулированной модели исследована задача о локализации электрона у краевой и винтовой дислокаций, у дисклинационного монополя и у малоугловой и полной клиновых дисклинаций. Отмечено, что в отличие от случая дислокаций и точечных примесей взаимодействие электрона с калибровочным полем, обусловленным дисклинациями, изменяет также и кинетический член, что приводит к существенно иной ситуации для локализации электрона. Получено, что в случае отрицательной малоугловой клиновой дисклинации возможно появление резонансных электронных состояний. Предсказано, что для топологически стабильных дефектов возможна сильная локализация электронных состояний вблизи линии дисклинации (фактически происходит захват электрона ядром дефекта).

Получено, что в случае дисклинаций топологическая природа дефекта затрагивает фазу волновой функции свободного электрона. Ис-

ходя из этого предсказан новый, топологический по природе, канал рассеяния электронов в материалах с дисклинациями. Рассчитана величина остаточного сопротивления, обусловленная присутствием дисклинаций. Показано, что учет взаимодействия электронов с полем деформации дефекта приводит к сложному характеру рассеяния, когда доминирующим может быть как топологическое рассеяние, так и деформационное. Изучен случай заряженных линейных дефектов. Полученные оценки могут быть использованы при исследовании проводимости в полупроводниковых материалах с дисклинациями, например в аморфных полупроводниках.

В рамках самосогласованного калибровочного подхода показана возможность образования состояния поляронного типа в материалах с линейными дислокациями. Отмечено, что этот результат получен без привлечения какой-либо дополнительной информации относительно конкретного вида дислокации.

В рамках конечнозонной схемы построена континуальная модель линейных двухатомных полимеров, в которой дополнительно учтено взаимодействие между вторыми соседями. Рассчитано основное состояние и фононный спектр. Построено точное решение в виде топологического солитона и исследован электронный энергетический спектр в присутствии солитона. В рамках сформулированной модели изучены физические характеристики солитонов с учетом эффектов конечной длины цепочек. Представлен самосогласованный дискретный анализ основного состояния и солитонной пары в протяженных цепочках двухатомных полимеров. Исследовано формирование поляронных состояний в моделях линейных полимеров. Вычислены основные физические характеристики поляронов. Рассмотрены биполяронное, триполяронное и полярэкситонное состояния в модели полиена. Представлено сравнение результатов, полученных в рамках конечнозонной и линейаризованной континуальных схем, с результатами дискретного расчета.

На защиту выдвигаются следующие результаты.

1. В рамках калибровочной теории дислокаций и дисклинаций получены точные статические решения для полных топологически стабильных дисклинаций: дисклинационного монополя (ежа) и дисклинационного вихря (прямолинейная клиповая дисклинация). Решения содержат четко выделенную характерную область, которая может быть трактована как область ядра дисклинации. Опреде-

- лены тензор напряжений и радиус ядра дефекта. Построена калибровочная модель для описания топологических дефектов в двумерных упругих системах (слоистые структуры, пленки и т.п.).
2. В рамках калибровочного подхода развит новый метод теории возмущений для анализа статических дислокаций, непрерывно распределенных в материале. Исследовано решение для прямолинейных винтовых дислокаций. В рамках линейного приближения получено точное решение для дробного дисклинационного вихря (аналог малоугловой клиновой дисклинации). Тем самым прямо подтверждено, что ротационные топологические дефекты по своей природе являются вихрями упругой среды. Вычислены поля напряжений и деформаций, обусловленные данной клиновой дисклинацией.
 3. В рамках калибровочного подхода разработан метод для описания упругих колебаний континуума с топологическими дефектами. Получены динамические уравнения для описания малых колебаний в среде с топологическими дефектами различного типа. В рамках разработанного метода изучены длинноволновые упругие колебания в изотропных материалах с прямолинейными клиновыми дисклинациями и дисклинационным монополюс. Показано, что в присутствии топологически устойчивых дефектов, характер колебаний существенно изменяется, особенно в области ядра дефекта.
 4. Калибровочная модель для описания топологических дефектов в упругом континууме расширена путем включения электронных степеней свободы в калибровочно инвариантном виде. В рамках самосогласованного подхода исследована проблема локализации электрона в упругих материалах с дисклинациями. Показано, что в случае топологически стабильной клиновой дисклинации и дисклинационного монополя возникают электронные состояния, сильно локализованные в области ядра дефекта. Обнаружено, что в случае топологически нестабильной отрицательной клиновой дисклинации процесс локализации существенно зависит от вида деформационного потенциала. Показана возможность образования резонансного электронного состояния в области ядра дефекта. Численно рассчитаны нижайшие дискретные уровни в одноэлектронном спектре и явный вид волновых функций.
 5. Показано, что топологическая природа дисклинации приводит к возникновению дополнительной (топологической, типа Ааронова-Бома) фазы у электронов проводимости. Результатом этого является появление нового канала рассеяния электронов. Рассчитан вклад в остаточную проводимость, обусловленный клиновой дисклинацией. Показана возможность резонансного усиления рассеяния электронов, что приводит к заметному росту сопротивления материалов с дисклинациями.
 6. Представлен качественный анализ спектра электронных состояний и специфики рассеяния электронов в случае заряженных дефектов. Показано, что учет кулоновского взаимодействия влияет на характер локализации электронов и дырок. В случае, когда основными носителями являются электроны, имеет место ослабление резонансного пика у электронов и усиление локализации дырок. Соответственно, изменяются условия резонансного рассеяния электронов.
 7. В рамках самосогласованного калибровочного подхода исследована проблема формирования поляронного состояния в присутствии дислокации. Рассчитана энергия связи дислокационного полярона и его физические характеристики для случая винтовой и краевой дислокации.
 8. Построена конечнозонная континуальная модель линейного двухатомного полимера. Рассчитана структура основного состояния и фоновый спектр. Показано, что в цепочке с фиксированными граничными атомами всегда рождается солитон-антисолитонная пара, причем каждый солитон имеет дробный фермионный заряд. Представлен самосогласованный дискретный анализ основного состояния и солитонной пары в протяженных цепочках двухатомных полимеров. Рассчитаны основные физические характеристики солитонов.
 9. В рамках конечнозонной континуальной схемы исследовано формирование поляронных состояний в моделях линейных полимеров. Вычислены основные физические характеристики поляронов: спин, заряд, энергия рождения, ширина, энергия связи. Рассмотрены биполярное, триполярное и полярэкситонное состояния в модели

полиена. Проведен численный самосогласованный расчет полярнов в дискретных цепочках. Дано сравнение результатов, полученных в рамках конечнозонной и линеаризованной континуальных схем, с результатами дискретного расчета.

Апробация работы. Результаты, представленные в диссертации, докладывались на семинарах Лаборатории теоретической физики ОИЯИ, были представлены на III Международном симпозиуме по избранным проблемам статистической механики (Дубна, 1984), на международных конференциях "Солитоны и приложения" (Дубна, 1989), "Возбужденные полярные состояния в конденсированных средах" (Пушино, 1990), "NEEDS-92" (Дубна, 1992), XIII европейской конференции по физике конденсированных сред (Прага, 1993), на Всесоюзном семинаре "Нелинейные волны" (Калининград, 1984), на Всесоюзной конференции "Современные проблемы статистической физики" (Львов, 1987), на I и II Всесоюзных рабочих совещаниях "Теория солитонов и приложения" (Дубна, 1985, Юрмала, 1986), на международном рабочем совещании "Автолокализованные состояния в упорядоченных и неупорядоченных системах" (Пушино, 1994). Цикл статей, включающий эти исследования, был удостоен второй премии ОИЯИ за 1995 год.

Публикации. По материалам диссертации опубликовано 26 работ.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 6 глав и заключения. Она содержит 167 страниц машинописного текста, 9 рисунков и 5 таблиц. Список литературы включает 200 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность проведенного в диссертации исследования. Представлен современный статус исследований и обзор литературы по тематике диссертации. Обсуждаются проблемы, существующие в описании топологических дефектов. Сформулирована цель работы и изложено ее краткое содержание.

В первой главе дана формулировка калибровочной теории дислокаций и дисклинаций и построены два точных решения модели.

(§1) Обсуждение начинается с формулировки основных положений калибровочной теории дислокаций и дисклинаций и построения лагранжиана. Привлекательность теории состоит в замкнутом виде самосогласованных уравнений движения, что, в принципе, позволяет изучать

динамику топологических дефектов. Однако явной трудностью теории является ее математическая сложность, что не позволило существенно продвинуться вперед в описании дефектов по сравнению с другими имеющимися моделями.

(§2) Важным развитием теории явилось построение калибровочной модели для плоских упругих систем с дислокациями и дисклинациями, что актуально для описания прямолинейных дислокаций и дисклинаций в случае, когда все напряжения, обусловленные дефектом, лежат в плоскости, а также для квазидвумерных упругих сред с дефектами. В двумерном случае калибровочная группа есть $G_2 = SO(2) \times T(2)$. Отметим, что группа пространственных вращений $SO(2)$ абелева, что существенно упрощает анализ в отличие от трехмерной задачи. В частности, компенсирующим полем, связанным с неоднородным действием группы $SO(2)$ является векторное поле W_a .

Построен лагранжиан и сформулированы уравнения Эйлера-Лагранжа динамики дефектов в виде:

$$\begin{aligned} \partial_3 p_i - \partial_A \sigma_i^A &= \epsilon_i^j (W_3 p_j - W_A \sigma_j^A + F_{ab}^j R_j^{ab}), \\ \partial_a R_j^{ab} - \epsilon_j^i W_a R_i^{ab} &= Z_j^b / 2, \\ \partial_a (G^{ab} + \epsilon_j^i R_i^{ac} \chi^j) &= \frac{1}{2} \epsilon_j^i (Z_i^b \chi^j + 2 R_i^{bc} \phi_c^j), \end{aligned} \quad (1)$$

где σ_i^A есть тензор упругих напряжений

$$\sigma_i^A = (1/2) \delta_B^A \delta_{ij} (\partial_C \chi^j + \epsilon_k^j W_C \chi^k + \phi_C^j) (\lambda \delta^{BC} \delta^{FD} E_{FD} + 2\mu \delta^{RB} \delta^{SC} E_{RS}),$$

p_i - импульс

$$p_i = \rho_0 \delta_{ij} (\partial_3 \chi^j + \epsilon_k^j W_3 \chi^k + \phi_3^j),$$

и тензор R_i^{ab} определяется следующим образом:

$$R_i^{ab} = -s_1 \delta_{ij} k^{ac} k^{bd} [\partial_c \phi_d^j - \partial_d \phi_c^j + \epsilon_k^j (W_c \phi_d^k - W_d \phi_c^k) + \epsilon_k^j F_{cd} \chi^k].$$

В (1) $\chi^i(X^a) = \chi^i(X, Y, T)$ есть вектор состояния, W_a - компенсирующие калибровочные поля, связанные с полями дисклинаций, в то время как ϕ_a^i связываются с полями дислокаций, $F_{ab} = \partial_a W_b - \partial_b W_a$, $G^{ab} = -s_2 F^{ab}$, $Z_i^A = -\sigma_i^A$, $Z_i^3 = p_i$, $g^{AB} = -\delta^{AB}$, $g^{33} = 1/\zeta$, $k^{AB} = -\delta^{AB}$, $k^{33} = 1/y$. Первое уравнение в (1) есть уравнение движения, тогда как два остальных возникают при вариации лагранжиана модели по полям дефектов. Построенная модель содержит четыре параметра: две константы связи (s_1 и s_2) и два "параметра распространения" (ζ и y). В

зависимости от выбора параметров можно получить модели различных упругих сред.

В (§3) рассмотрены статические уравнения калибровочной теории дефектов в случае, когда имеются только поля дисклинаций. Показано, что важное преимущество калибровочного подхода состоит в том, что полученные модели во многих чертах аналогичны известным моделям теории поля (прежде всего неабелевой и абелевой моделям Хиггса), где топологические объекты достаточно хорошо исследованы. Существенно используя отмеченную аналогию, найдено два точных статических решения для дисклинаций. В случае точечного дефекта в трехмерном континууме сферически симметричное решение имеет монополеподобный вид

$$\chi^i(X^A) = \delta_A^i F(r) \frac{X^A}{r}, \quad W_A^\alpha(X^B) = \delta^{\alpha\beta} \varepsilon_{\beta AB} \frac{X^B}{r^2}, \quad W_4^\alpha = 0, \quad (2)$$

где $r^2 = X^A X_A$. Решение (2) есть типичный "сж" с топологическим индексом $N = 1$ (он же индекс Франка). Такое точечное решение весьма экзотично для дисклинаций в обычных упругих средах. Тем не менее, решение такого типа хорошо известно в модели нематических жидких кристаллов. Характеристическая функция $F(r)$ в (2) определена через вспомогательную функцию $g(r) = \partial_r F(r)$, которая имеет вид

$$g(t) = \begin{cases} g_1(t) = N_0 \cosh\left[\frac{1}{3} \cosh^{-1} \frac{1}{t^2}\right], & t \leq 1 \\ g_2(t) = N_0 \cos\left[\frac{1}{3} \cos^{-1} \frac{1}{t^2} + \frac{2\pi t}{3}\right], & t \geq 1 \end{cases}$$

где $N_0 = 2\sqrt{(B/3A)}$, $A = \lambda/2 + \mu$, $B = 3\lambda/2 + \mu$, λ и μ - постоянные Ламе, и введен безразмерный параметр $t = r/r_0$, $r_0 = (27g_0^2 A/4B^3)^{1/4}$. Тем самым решение содержит характерный размерный параметр r_0 , который определяет радиус ядра дефекта. Отмечается, что, как и ожидалось, информацию о ядре удалось получить только в результате точного решения полностью нелинейной задачи теории упругости. Особый интерес вызывает тот факт, что получены напряжения в области ядра дефекта (область $t \leq 1$).

В случае линейных дефектов найдено точное решение, обладающее цилиндрической симметрией. В случае, когда поля дислокаций отсутствуют, статическое решение уравнений (1) имеет вид (в цилиндрических координатах (r, θ))

$$\begin{aligned} \chi^1(X^A) &= F(r) \cos \nu \theta, & \chi^2(X^A) &= F(r) \sin \nu \theta, \\ W_r(X^B) &= 0, & W_\theta(X^B) &= W(r) = \nu/r, \end{aligned} \quad (3)$$

Вектор Франка для такого решения нормален к плоскости $\vec{\omega} = (0, 0, \omega)$, и ν есть индекс Франка, принимающий здесь любые целочисленные значения. Функция $g(t)$ найдена в виде

$$g(t) = \begin{cases} g_1(t) = N_0 \cosh\left[\frac{1}{3} \cosh^{-1} \frac{1}{t}\right], & t \leq 1 \\ g_2(t) = N_0 \cos\left[\frac{1}{3} \cos^{-1} \frac{1}{t} + \frac{2\pi t}{3}\right], & t \geq 1 \end{cases}$$

где $N_0 = 2\sqrt{(B/3A)}$, $A = \lambda/2 + \mu$, $B = \lambda + \mu$, и $r_0 = \sqrt{(27g_0^2 A/4B^3)}$ определяет радиус ядра.

Во второй главе сформулирована линейризованная схема для исследования дефектов малой мощности в рамках калибровочной модели.

В (§1) построена самосогласованная процедура линейризации уравнений калибровочной теории дислокаций и дисклинаций, основанная на однородном скейлинге генераторов калибровочной группы. Приведены уравнения первого и второго порядка теории возмущений в случае дислокаций.

В качестве примера в (§2) рассмотрен случай прямолинейной винтовой дислокации. Показано, что в физически осмысленном пределе $\kappa \rightarrow \epsilon$, где $\kappa = \mu/2s_1$ есть параметр, характеризующий отношение упругой энергии к энергии дислокации, подход воспроизводит классические результаты теории дислокаций.

(§3) В качестве другого примера удалось точно решить линейризованную задачу для прямолинейных малоугловых клиновых дисклинаций. Показано, что в приближении первого порядка модель воспроизводит классическую линейную теорию упругости, тогда как поля дисклинаций входят в уравнения второго порядка. Уравнение равновесия в присутствии дисклинации получено в виде

$$\Delta \vec{u} + (L + 1) \nabla \text{div} \vec{u} = \vec{j}(\vec{r}), \quad (4)$$

где \vec{u} - поля смещений, $L = \lambda/\mu$ - параметр, характеризующий отношение упругих констант, и показано, что вид источника $\vec{j}(\vec{r})$ целиком определяется калибровочными полями W_A . Найдено самосогласованное решение в виде

$$W_A = -\nu \epsilon_C^A \frac{x^C}{r^2}, \quad u^i = x^i (C_1 \ln r + C_2), \quad (5)$$

где константы фиксированы как $C_1 = -\nu/(L + 2)$ и, с учетом конкретных граничных условий, $2C_2 = \nu + [\nu(1 - 2\sigma)/(1 - \sigma)] \ln R$. Показано,

что при этом воспроизводятся известные поля напряжений для клиновой дисклинации в цилиндре.

Третья глава посвящена анализу спектра длинноволновых колебаний упругих материалов с дислокациями и дисклинациями.

С этой целью в (§1) построена общая схема и получены динамические уравнения калибровочной теории дефектов для объемной и плоской задач в линейном по смещениям приближении.

(§2) Для дефектов малой мощности динамические уравнения найдены в виде

$$\rho_0 \partial_t^2 u^i - \mu \Delta u^i - (\lambda + \mu) \partial_i \partial_A u^A = J_i, \quad (6)$$

где $\Delta = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2$, и вид источника J_i определяется сложным образом через поля смещений и поля дефектов. Отмечено, что в отсутствие дефектов $J_i = 0$, и воспроизводятся классические уравнения движения для изотропной упругой среды. Исследован случай прямолинейных винтовой дислокации и малоугловой клиновой дисклинации.

В (§3) исследован характер упругих колебаний в присутствии топологически стабильных дисклинаций. Сформулированы динамические уравнения для акустических радиальных волн. Отмечено существенное отличие этих уравнений от случая малоугловых дисклинаций. Исследованы асимптотические решения для радиальных колебаний и представлен качественный анализ характера колебаний в случае дисклинационного монополя и вихря.

В четвертой главе калибровочная модель расширена для описания электронных свойств материалов с топологическими дефектами.

(§1) С этой целью построен эффективный лагранжиан, включающий электронные поля в калибровочно инвариантном виде. При этом существенно использовано приближение эффективной массы для электронов проводимости и взаимодействие электронов с упругой средой рассмотрено в рамках теории деформационного потенциала. Электронная часть лагранжиана имеет вид:

$$L_\Psi = \frac{1}{2} \left\{ i\hbar \left[\Psi^+ D_A \Psi - (D_A \Psi^+) \Psi \right] - \frac{\hbar^2}{m_{AB}^*} (D_A \Psi^+) D^B \Psi \right\}, \quad (7)$$

тогда как деформационный потенциал

$$U_{def}(\vec{r}) = -G_d Sp E_{AB}(\vec{r}) - G_u \sum_{A,B} \eta_{AB}(\vec{r}) (m_{AB}^*)^{-1} D_A D_B, \quad (8)$$

где в случае группы $SO(3)$ ковариантная производная для электронных полей определяется как $(D_a \Psi)_j = \partial_a \Psi_j - iT_{jk}^a W_a^\alpha \Psi_k$, тогда как в случае группы $SO(2)$ $D_a \Psi = (\partial_a - iW_a) \Psi$. Показано, что даже в отсутствие деформационного взаимодействия электронные поля взаимодействуют с полями дисклинаций. Сформулирована самосогласованная система уравнений модели в присутствии электронных полей. В качестве примера исследована задача о локализации электрона у краевой и винтовой дислокаций.

В (§2) исследована задача о локализации электронных состояний у дисклинационного монополя. Для радиальной волновой функции получено уравнение

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} + \frac{2m^*}{\hbar^2} (E - U_j(r)) \right] \Psi_E(r) = 0 \quad (9)$$

где эффективный потенциал имеет вид

$$U_j(r) = \begin{cases} (3/2)G - BG \cosh^2[\frac{1}{3} \cosh^{-1}(r_0/r)^2] + K(J)/r^2, & r \leq r_0 \\ (3/2)G - BG \cos^2[\frac{1}{3} \cos^{-1}(r_0/r)^2 + \frac{2}{3}\pi l] + K(J)/r^2, & r \geq r_0 \end{cases} \quad (10)$$

Здесь $G = G_d$, $B = 2(3\lambda + 2\mu)/3(\lambda + 2\mu)$, $K(J) = [J(J+1) - 1/4]\hbar^2/2m^*$, $J = 1/2$ при $j = 0$, $J = j \pm 1/2$ при $j = 1, 2, \dots$. Исследован вид потенциала (10) в зависимости от G_d и r_0 . Уравнение (9) с потенциалом (10) исследовано численно. Указано на возможность появления локализованных электронных состояний.

(§3) Проведено исследование электронных свойств малоугловой и полной клиновых дисклинаций. Стационарное уравнение Шредингера для радиальной волновой функции имеет вид:

$$\left(-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} r \frac{d}{dr} + \frac{(j - \nu)^2}{r^2} - \frac{2m^* G}{\hbar^2} Sp E_{AB} \right) u_E^j(r) = k^2 u_E^j(r). \quad (11)$$

$j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$; и $k^2 = 2m^* E/\hbar^2$. Указано, что наиболее важное отличие от случая дислокаций и точечных примесей состоит в том, что взаимодействие электрона с калибровочным полем, обусловленным дисклинациями, изменяет также и кинетический член, что приводит к существенно иной ситуации для локализации электрона. Приведены результаты численного решения уравнения Шредингера в случае деформационного взаимодействия, обусловленного присутствием этих типов дисклинаций.

Показано, что в случае отрицательной малоугловой клиновидной дисклинации возможно появление резонансных электронных состояний. Для топологически стабильной дисклинации эффективный потенциал имеет вид:

$$U_j(r) = \begin{cases} G_d - \tilde{D}G_d \cosh^2[\frac{1}{3} \cosh^{-1}(r_0/r)] + K(j)/r^2, & r \leq r_0 \\ G_d - \tilde{D}G_d \cos^2[\frac{1}{3} \cos^{-1}(r_0/r) + \frac{2}{3}\pi l] + K(j)/r^2, & r \geq r_0 \end{cases} \quad (12)$$

где $\tilde{D} = 4(\lambda + \mu)/3(\lambda + 2\mu)$, $K(j) = (j - \nu)^2 \hbar^2 / 2m^*$, и ν принимает любое целочисленное значение. Показано, что при $j = 1$ возможна сильная локализация электронных состояний вблизи линии дисклинации (фактически происходит захват электрона ядром дефекта).

Пятая глава посвящена исследованию кинетических свойств материалов с дислокациями и дисклинациями.

(§1) Показано, что в случае дисклинаций топологическая природа дефекта затрагивает фазу волновой функции свободного электрона, что приводит к дополнительному топологическому по природе рассеянию типа рассеяния Ааронова-Бома. В отсутствие деформационного взаимодействия уравнение Шредингера имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}(\partial_A - iW_A)^2\Psi = E\Psi. \quad (13)$$

Показано, что в случае вихревого решения для клиновидной дисклинации решение уравнения сводится к проблеме Ааронова-Бома с амплитудой рассеяния в виде

$$f(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi k}} e^{-i\{\nu\}\theta} e^{i(\nu+1/2)(\theta+\pi)} \frac{\sin \pi\nu}{\sin \theta/2}, \quad (14)$$

где $\nu = \nu - [\nu]$, и скобки $[]$ обозначают целую часть числа. Тем самым, предсказан новый канал рассеяния электронов в материалах с дисклинациями, чисто топологический по своей природе. Определено соответствующее время релаксации в виде

$$\frac{1}{\tau_{dis}} = \frac{2\hbar}{m^*} n_{dis} \sin^2 \pi\nu. \quad (15)$$

где n_{dis} обозначает плотность дисклинаций. Исследована роль деформационного взаимодействия. В частности показано, что учет взаимодействия электронов с полем деформации дефекта приводит к сложному

характеру рассеяния, когда доминирующим может быть как топологическое рассеяние, так и деформационное.

В (§2) в рамках самосогласованного калибровочного подхода исследован вопрос о возможности образования состояния поляронного типа в материалах с линейными дислокациями. Показывается, что общий выигрыш в энергии благодаря формированию состояния поляронного типа есть $E^0 - E_p = \frac{1}{3}\epsilon$. Отмечено, что этот результат получен без привлечения какой-либо информации относительно конкретного вида дислокации. Для иллюстрации метода рассмотрены случаи краевой и винтовой дислокаций.

В (§3) рассмотрены заряженные линейные дефекты. Отмечено, что потенциал деформации, обусловленный клиновидными дисклинациями, имеет логарифмическую зависимость от r , т.е. то же самое поведение как и кулоновский потенциал. Остаточное сопротивление, обусловленное дисклинациями имеет вид:

$$\rho_{dis} = \frac{m^*}{ne^2\tau_{dis}} = \frac{2\hbar}{ne^2} n_{dis} (\sin^2 \pi\nu + 2 \sin^2 \delta_0). \quad (16)$$

Отмечено, что величина фазового сдвига δ_0 существенно зависит от радиуса экранировки Рида.

В шестой главе изучаются топологические дефекты в одномерном континууме на примере солитонов в линейных полимерах.

(§1) В рамках конечнозонной схемы построена континуальная модель линейных двухатомных полимеров, в которой дополнительно учтено взаимодействие между вторыми соседями. Рассчитано основное состояние и фоновый спектр. Построено точное решение в виде топологического солитона

$$\Delta(x) = \pm \Delta \tanh k_0 x. \quad (17)$$

и исследован электронный энергетический спектр, который в присутствии солитона состоит из локализованного состояния с энергией $E = \pm \alpha$, лежащим в щели, и континуума состояний в зоне проводимости и в валентной зоне с энергиями $E_k = \pm \sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta_k^2 + \alpha^2}$.

(§2) В рамках сформулированной модели изучены физические характеристики солитонов с учетом эффектов конечной длины цепочек. Осуждается проблема заряда солитона в континуальной модели. Рассчитана энергия рождения солитона. В частности, для солитона А-типа

она имеет вид

$$E_A^* = \alpha\nu_{0+} + \frac{2\Delta}{\pi} \left\{ \frac{1}{m^2} [E(m) - (1 - m^2)K(m)] + \frac{y^2}{\sqrt{1+y^2}} \left[K(m) + \frac{\sqrt{1+y^2}}{zy} \left(\frac{\pi}{2} - \psi \right) \right] \right\} + \frac{2\nu t_0}{\pi a} \delta L \left[\sqrt{1+y^2} E(m) - \frac{\pi}{2} \right], \quad (18)$$

где $K(m)$ и $E(m)$ - полные эллиптические интегралы первого и второго рода, соответственно, $tg\psi = z\sqrt{1+y^2}/(y\sqrt{1-z^2})$, $m^2 = (1 - z^2)/(1 + y^2)$, $z = \Delta/2t_0$, $y = \alpha/2t_0$. Указано, что при фиксированной длине цепочки возможно рождение только солитон-антисолитонной пары. Рассчитана энергия рождения пары. Обсуждается возможность образования изолированного солитона в цепочках с избыточным электроном. Представлен самосогласованный дискретный анализ основного состояния и солитонной пары в протяженных цепочках двухатомных полимеров. Дано сравнение результатов численного расчета и конечнозонной версии континуальной теории двухатомных полимеров.

В (§3) в рамках конечнозонной континуальной схемы исследовано формирование поляронных состояний в моделях линейных полимеров. Вычислены основные физические характеристики поляронов: спин, заряд, энергия рождения, ширина, энергия связи. Рассмотрены биполаронное, триполаронное и полярэкситонное состояния в модели полиена. Проведен численный самосогласованный расчет поляронов в дискретных цепочках. Дано сравнение результатов, полученных в рамках конечнозонной и линеаризованной континуальных схем, с результатами дискретного расчета.

В заключении дана сводка основных результатов, полученных в диссертации.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. Osipov V.A. *Extension of the Kadic-Edelen gauge model: Electronic properties of defect systems*, Physica A **175**, 369 (1991).
2. Osipov V.A. *Gauge theory of dislocations and disclinations for planar elastic systems*, J.Phys.A:Math.,Gen. **26**, 1375 (1993).
3. Osipov V.A. *A monopole-like solution for static disclinations in continuum media*, Phys.Lett. A **146**, 67 (1990).

4. Osipov V.A. *Aharonov-Bohm effect in planar systems with disclination vortices*, Phys.Lett. A **164**, 327 (1992).
5. Osipov V.A. *Two Exact Solutions for Disclinations in Elastic Continuum Media*. In: "NEEDS-92", Ed. V. G. Makhankov et al., (World Scientific, Singapore, 1993), p.384.
6. Osipov V.A. *Non-linear elastic problems in dislocation theory: A gauge approach*, J.Phys. A:Math.,Gen., **24**, 3237 (1991).
7. Osipov V.A. *An exact solution for a fractional disclination vortex*, Phys. Lett. A **193**, 97 (1994).
8. Osipov V.A. *Vibrational properties of elastic continuum with dislocations and disclinations: a gauge approach*, J.Phys.:Cond.Mat., **7**, 89 (1995).
9. Osipov V.A. *Long-wave electron states localized at monopole-like disclinations*, Phys.Lett. A **159**, 343 (1991).
10. Красавин С.Е., Осипов В.А. *О локализации электрона на клиновой дисклинации*, ФТТ, **37**, вып.9, 2848 (1995).
11. Osipov V.A. and Krasavin S.E. *Localised electron states in elastic materials with disclinations*, J.Phys.:Cond.Mat., **7**, L95 (1995).
12. Osipov V.A., *On the Electron Scattering in Disclinated Crystals*, Phys. Lett. A **175**, 65 (1993).
13. Osipov V.A., *Polaron-type states in dislocated crystals: A gauge-theory approach*, Phys.Rev.B **51**, 8614 (1995).
14. Осипов В.А. *Электронные свойства материалов с клиновыми дисклинациями*, Известия РАН: сер.физич., **59**, вып.8, 160 (1995).
15. Osipov V.A., *Polaron-type electronic states in defect crystals*. In: "Polarons and Applications", Puschino, 1992, Ed. V.D. Lakhno, (Wiley, Chichester, 1994) p.497.
16. Осипов В.А., Федянин В.К. *Эффекты, обусловленные конечными значениями температуры и химического потенциала, в некоторых двумерных полевых моделях*, ТМФ, **73**, 393 (1987).

17. Osipov V.А., Fedyanin V.K. *On the theory of linear diatomic polymers*, phys.stat.sol.(b) **147**, 199 (1988).
18. Osipov V.A., Malek I., Fedyanin V.K. *Nonlinear excitations of a diatomic polymer*, J.Phys.:Cond.Mat., **1**, 2951 (1989).
19. Osipov V.A., Bochnacka G., Fedyanin V.K., Malek I. *Polarons in trans-polyacetylene and polyynes chains*, phys.stat.sol.(b) **153**, 207 (1989).
20. Osipov V.A., Bochnacka G., Fedyanin V.K. *Polarons in the finite-band continuum model of diatomic polymers*, phys.stat.sol.(b) **155**, K29 (1989).
21. Bochnacka G., Osipov V.A., Fedyanin V.K., *Polaron states of the linear diatomic polymer*, phys.stat.sol.(b) **160**, K29 (1990).
22. Osipov V.A., Fedyanin V.K. *Finite-band continuum scheme for solitons in linear polymers*. In: "Solitons and Applications", Eds. V.G. Makhankov et al., (World Scientific, Singapore, 1990) p.345.
23. Osipov V.A., Fedyanin V.K. *Polaron states in linear polymers*, In: "Excited Polaron States in Condensed Media", Ed. V.D. Lakhno, (Manchester Univ.Press, 1991) p.129.
24. Drechsler S., 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 Communic., **60**, 415 (1986).
25. Fedyanin V.K., Osipov V.A. *Fractional charges at finite temperature and chemical potential*, Solid State Communic., **59**, 629 (1986).
26. Осипов В.А., Федянин В.К. *Полиацетилен и двумерные модели квантовой теории поля*, Лекции для молодых ученых, ОИЯИ, P17-85-809 (Дубна, 1985).

Рукопись поступила в издательский отдел
14 октября 1996 года.