

С 326

0-741

к.102



**ЛЕКЦИИ
ДЛЯ МОЛОДЫХ
УЧЕНЫХ**

В.А.Осипов, В.К.Федянин

**Полиацетилен и двумерные модели
квантовой теории поля**

ДУБНА

В.А.Осипов, В.К.Федянин

P17-85-809

ПОЛИАЦЕТИЛЕН И ДВУМЕРНЫЕ МОДЕЛИ

КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ПОЛЯ

(Лекции для молодых ученых)

C 326
0-741

126134

Советский институт
энергетических исследований
БИБЛИОТЕКА

Дубна 1985

Выпуск 33

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ

Д. В. Ширков - председатель
А. Н. Сисакян - зам. председателя
А. Т. Филиппов - зам. председателя
Г. М. Гавриленко
В. Б. Беляев
В. П. Гердт
Е. П. Жидков
В. А. Загребнов
Г. В. Мицельмахер
В. А. Никитин
Л. М. Сороко
В. Р. Саранцева

ПРЕДИСЛОВИЕ

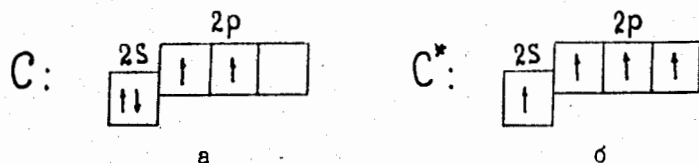
Бурное развитие физики проводящих полимеров в последнее десятилетие в немалой степени связано с изучением полиацетилена. Этот простейший линейно-сопряженный полимер обладает целым рядом примечательных свойств. В нормальных условиях полиацетилен является хорошим диэлектриком. Однако при легировании имеет место резкое возрастание проводимости вплоть до полной металлизации. Это обуславливает возможность широкого практического применения проводящих пластмасс, способных заменить обычные металлы, что, в свою очередь, позволяет значительно уменьшить вес конструкций. В этом направлении уже ведется большая работа. Необычные свойства носителей заряда, квазиодномерность цепочек полиацетилена и другие важные свойства представляют богатый материал для экспериментального и теоретического изучения полиацетилена.

Нет возможности в настоящее время сколько-нибудь полно отразить все экспериментальные и теоретические достижения в этой области. В данных лекциях поставлена цель изложить с максимальной простотой основные представления о физических свойствах полиацетилена. Экспериментальных результатов мы коснемся в малой степени, хотя постараемся дать подробную библиографию. Более подробно мы остановимся на отдельных теоретических идеях, важных не только для объяснения свойств полиацетилена, но и с точки зрения связи отдельных аспектов физики конденсированных сред и квантовой теории поля. Материал построен следующим образом. В первой главе на базе некоторых экспериментальных данных с использованием выводов из них обсуждены теоретические модели, привлекаемые для описания свойств полиацетилена и следующие из них предсказания. Вторая глава посвящена аналогии, имеющей место между двумерными моделями квантовой теории поля и моделью полиацетилена. В главе 3 рассмотрен ряд следствий этой аналогии. В четвертой главе широко обсуждается вопрос о заряде, локализованном на солитоне. Рассмотрен механизм возникновения дробных зарядов. В пятой главе рассмотрен ряд теоретических моделей, претендующих на описание перехода диэлектрик-металл в полиацетилене. Обсуждаются экспериментальные данные по исследованию этого перехода.

Глава I. ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛИАЦЕТИЛЕНА $(\text{CH})_x$ И ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ИХ ОПИСАНИЯ

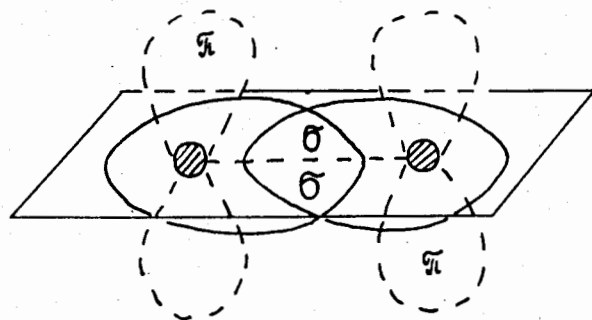
§ I. Химическое строение $(\text{CH})_x$

Химическая формула полиацетилена - $(\text{CH})_x$, где С - углерод, Н - водород. В нормальном состоянии внешний электронный слой атома углерода имеет структуру рис. 1а, и, следовательно, углерод может образовывать только две ковалентные связи. Таким образом, в молекуле ацетилена атомы углерода связаны одной σ -связью и двумя более слабыми



Р и с. I

химическими связями - π -связями. При возбуждении происходит изменение структуры электронного слоя (см. рис. I) и возможно образование уже четырех ковалентных связей. Именно этот случай реализуется при полимеризации. Причем единичные связи (С-С, С-Н) образуются путем sp^2 -гибридизации электронов s - и p -оболочек и являются σ -связями, ориентированными вдоль направления С-С (см. рис. 2). В двойных связях, помимо σ -связи, принимает участие более слабая



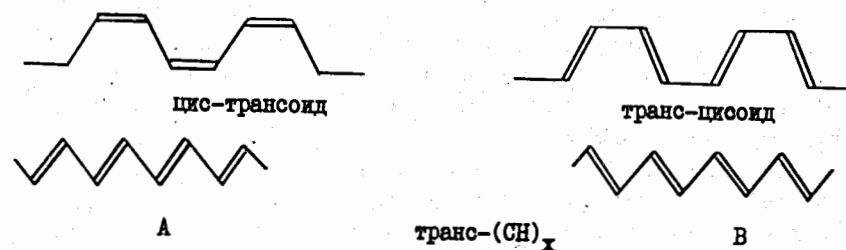
Р и с. 2

π -связь, образованная перекрыванием двух электронных облаков свободных (не участвующих в sp^2 -гибридизации) электронов с p -орбиталей. π -облака ориентированы перпендикулярно к плоскости, в которой расположены σ -связи. В результате полимеризации образуется цепочка атомов углерода, имеющая два типа конфигураций (см. рис.3).



Р и с. 3

В $\text{cis}-(\text{CH})_x$ можно выделить энергетически более стабильный cis -трансоед и trans -цисоед (рис. 4). В свою очередь, $\text{trans}-(\text{CH})_x$ имеет две зеркально-симметричные структуры (см. рис. 4).



Р и с. 4

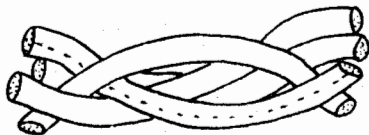
Отметим, что при полимеризации синтезируются цепочки $\text{cis}-(\text{CH})_x$. Конфигурации $\text{trans}-(\text{CH})_x$ можно получить из $\text{cis}-(\text{CH})_x$ путем термализации или внедрения примеси. В дальнейшем мы будем в основном рассматривать trans -полиацетилен.

§ 2. Физические свойства $(\text{CH})_x$

Прежде чем перейти к теоретическому описанию полиацетилена, необходимо сделать хотя бы краткий обзор основных экспериментальных данных.

Первоначально обсудим свойства беспримесного $\text{trans}-(\text{CH})_x$. Образцы полиацетилена изготавливаются по методике работы [1]. Исследова-

ния^{/1,2/} показали, что длина связи С-С в отдельной цепочке $(\text{CH})_x$ составляет приблизительно $1,4\text{Å}$, в то время как расстояние между атомами соседних цепочек порядка $3,6-4,4\text{Å}$. Таким образом, в первом приближении можно пренебречь межцепочечной связью. Это позволяет рассматривать полиацетилен как систему, состоящую из квазиодномерных нитей (см. также^{/3/}). В реальном образце имеет место переплетение волокон, состоящих из этих квазиодномерных полимерных цепочек (см.рис.5).



Р и с. 5

При комнатной температуре $T \approx 300\text{K}$ полиацетилен является полупроводником с достаточно широкой щелью $2\Delta_0 \approx 1,4-1,8\text{эВ}$ ^{/3-5/} (см. рис. 8). Значение диэлектрической константы вдоль цепочек $\epsilon_{||} \approx 10-12$ ^{/4,6/}. При изучении механизма возникновения щели было показано^{/7/}, что щель порядка $1,6-2\text{эВ}$ (и даже больше) можно получить в результате альтернирования (изменения длины) связей С-С и С=C. Наличие альтернирования, обусловленного спариванием π -электронов (образованием π -связи), приводит к изменению периода цепочки атомов и возникновению щели в электронном спектре. Таким образом, полиацетилен можно рассматривать как одномерный диэлектрик Пайерлса. Величина смещения атомов от "равновесного" положения измерена в^{/8,9/} и составляет $u_0 \approx 0,03\text{Å}$. Обсуждался и другой механизм образования щели в электронном спектре - наличие сильных корреляций π -электронов^{/10/}. Мы не будем рассматривать в этих лекциях эту возможность, хотя она и представляет определенный интерес (см.^{/11/}). Заметим лишь, что в^{/8/} утверждается, что электрон-электронное взаимодействие не определяет физику протяженных полимеров. На наш взгляд здесь необходимы новые эксперименты.

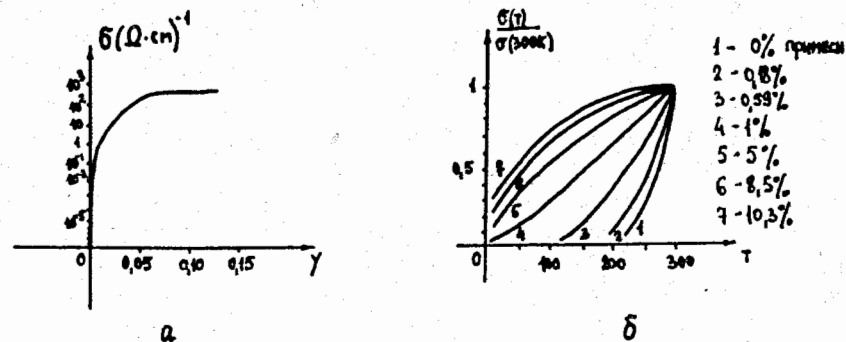
Следует отметить, что в чистом транс- $(\text{CH})_x$ имеются подвижные парамагнитные центры с концентрацией I спинов на 3000 атомов углерода^{/12,13/}. Предполагается, что эти центры, возможно, связаны с образованием дефектов, сопровождающих цис-транс-изомеризацию. Однако с экспериментальной точки зрения тип и детали образования этих дефектов нельзя считать окончательно выясненным^{/14/}.

Интерес представляют данные по фотогенерации локализованных

состояний в центре запрещенной зоны^{/15-18/}. К сожалению, мы не можем подробно остановиться на таких важных результатах, как "дисперсионный эффект" рамановских линий^{/19/}, наличие изотропного пика поглощения при энергии $8,6\text{эВ}$ ^{/20/} и некоторых других. Необходимые сведения можно найти в обзоре^{/21/}.

Наиболее интересными, как нам представляется, являются данные по электрическим и магнитным свойствам легированного полиацетилена. В качестве примеси используются как доноры (Na , K , NH_3), так и акцепторы (AsF_5 , I , FeCl_3). Прежде всего отметим те неопределенности при попытках описания изменений свойств $(\text{CH})_x$, связанных с введением примеси^{/22/}. Во-первых, примесь кода (I) может вносить неконтролируемое структурное искажение; во-вторых, при введении AsF_5 химическая природа результирующей примеси зависит, по-видимому, от техники введения примеси, что может приводить к разрывам химических связей в π -электронной системе. Наконец, природа и степень неоднородности примеси плохо известны, а эффекты, обусловленные неоднородностью, могут оказаться весьма важными.

Тем не менее, исследование легированного полиацетилена позволило сделать ряд примечательных заключений. На рис. 6а,б представлена качественная зависимость проводимости транс- $(\text{CH})_x$ с примесью AsF_5 от концентрации $\gamma = N_{np}/N$, где N - число атомов углерода в рассматриваемом образце, а также от температуры^{/23,24/}.

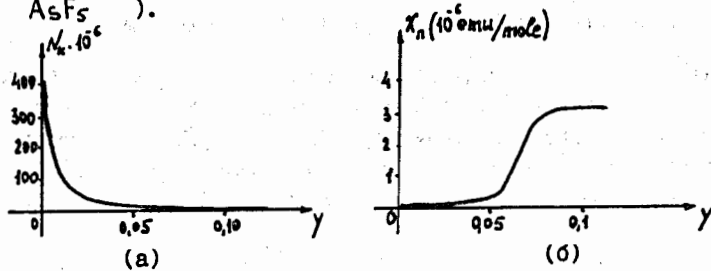


Р и с. 6

Из рис. 6а видно, что в "чистом" транс- $(\text{CH})_x$ имеется остаточная проводимость, обусловленная, по-видимому, наличием дефектов с небольшой концентрацией. С увеличением концентрации примеси имеет место резкое возрастание проводимости ($\sim 10^{11}$ раз). Насыщение достигается при $\gamma \approx 0,1$ (10% примеси); $\sigma_c \approx 220$ ($\Omega^{-1}\text{cm}^{-1}$).

В случае кода проводимость растет более слабо, достигая значения $\sigma_c(I) = 160 (\Omega \cdot \text{см})^{-1}$ при 20% примеси. Аналогичные измерения для $(\text{CH})_x$ приводят к значению $\sigma_c \approx 560 (\Omega \cdot \text{см})^{-1}$ при 14% примеси AsF_5 . Зависимость проводимости от температуры (рис. 6б) подтверждается измерениями работы^{/24/}, где использовалась примесь кода. По характеру температурной зависимости были выделены три области^{/24/}: а) $\gamma < 0,05$. При этом $\sigma = \sigma_0 \exp(-B/T)^{1/2}$, где $2 \cdot 10^3 < B < 10^4$ в области $0,022 < \gamma < 0,05$. Эта зависимость характерна для одномерной прыжковой проводимости. б) $0,06 < \gamma < 0,11$. $\sigma = \sigma_0 \exp(-A/T)^{1/4}$, где $10^4 < A < 5 \times 10^5$. Такая зависимость имеет место в трехмерных разупорядоченных сплавах. в) $\gamma > 0,15$. $\sigma = \sigma_0 T^\nu$ с $\nu \approx 0,7$, что характерно для "грязных" металлов.

Весьма примечательны магнитные свойства транс-полиацетилена. На рис. 7а,б представлены измерения^{/25/} концентрации парамагнитных центров N_k , а также восприимчивости Паули χ_n как функции γ (примесь AsF_5).



Р и с. 7

Таким образом, при $\gamma < 0,05$ $\chi_n \rightarrow 0$, тогда как сама проводимость растет на несколько порядков: т.е. "нет спинов", участвующих в проводимости. С другой стороны, с ростом γ падает концентрация парамагнитных центров. При $\gamma \approx 0,07$ χ_n резко возрастает, и имеет место металлическое поведение. Необходимо отметить, однако, что для примеси кода нет возрастания χ_n даже при высокой концентрации примеси^{/26/}. Отметим, что в^{/22,27/} сделана попытка объяснения отсутствия χ_n при низких концентрациях примеси недостаточной чувствительностью измерительных приборов. Предоставим окончательный ответ экспериментаторам, а пока будем придерживаться данных рис. 7.

В заключение этого краткого обзора физических свойств полиацетилена отметим, что в $(\text{CH})_x$ была обнаружена люминесценция и при этом отсутствие фототока^{/28,29/}. В транс- $(\text{CH})_x$ люминесценции нет,

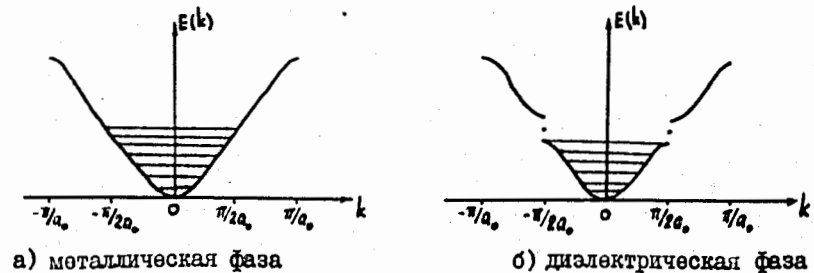
но появляется большая фотопроводимость. В обычных полупроводниках есть и люминесценция и фотопроводимость.

Мы ограничились рассмотрением наиболее важных, по нашему мнению, свойств полиацетилена. При дальнейшем изложении там, где это необходимо, мы коснемся соответствующих экспериментальных данных, что несколько дополнит этот краткий обзор. Пока сделаем следующие выводы. Физические свойства полиацетилена можно достаточно хорошо описать в рамках квазиодномерной модели, рассматривая изолированную цепочку атомов с альтернированием связей.

Даже в отсутствие примеси цепочка содержит парамагнитные центры. При внедрении примесных атомов число парамагнитных центров уменьшается, но возникают заряженные носители без спина.

§ 3. Дискретная модель полиацетилена

В предыдущем параграфе было отмечено, что диэлектрические свойства полиацетилена могут быть объяснены на основе механизма Пайерлса^{/30/}. Пайерлс показал, что одномерная система неустойчива в отношении спонтанного нарушения зеркальной симметрии цепочки атомов для любой ненулевой электрон-фононной связи. При этом возникает щель в одноэлектронном энергетическом спектре, отделяющая полностью заполненную и пустую зоны Бриллюэна. Поскольку в $(\text{CH})_x$ имеется ровно один "свободный" π -электрон на атом углерода, то наиболее предпочтительным является удвоение периода решетки (рис. 8).



Р и с. 8

Необходимо отметить, что аргументы Пайерлса справедливы, строго говоря, только в отсутствие кулоновского взаимодействия электронов и для строго одномерных систем. Использование одномерной модели может быть оправдано в том случае, когда кинетическая энергия движения

электрона между нитями E_1 много меньше энергии, характерной для рассматриваемого эффекта^{/31/}. В нашем случае $E_1 \ll 2\Delta_0$. Именно это приближение используется при построении модели полиацетилена.

Объяснение большого количества экспериментальных данных может быть получено на основе модели, использующей механизм "внутренних дефектов" в цепочках $(CH)_x$. Было предложено два подхода для описания дефектов.

В первом подходе предполагается^{/32/}, что примесный электрон или дырка будут приводить к нарушению в альтернировании связей полиацетиленовой цепочки. В частном случае дефект есть изменение на 180° фазы регулярного полиацетилена, причем нарушение имеет характер заряженной доменной стенки. Таким образом, добавочный электрон или дырка будут занимать локализованное солитон-подобное состояние, переворачивая фазу решеточной димеризации. Простейшая модель, включающая такой солитон, описывается лагранжианом Гинзбурга-Ландау^{/32,33/}

$$\mathcal{L}[u] = \frac{8\epsilon_c}{(u_0\omega_A)^2} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 - \frac{c_0^2}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 - (\omega_A u_0)^2 V(u) \right], \quad (1)$$

где u описывает смещение атомов решетки, $V(u) = \frac{1}{8} \left[1 - \left(\frac{u}{u_0} \right)^2 \right]^2$, u_0 - амплитуда пайерловской димеризации, ϵ_c - стабилизирующая энергия на атом углерода, ω_A - частота оптических фононов, c_0 - скорость, характеризующая решеточную дисперсию $\omega_A^2(q) = \omega_A^2 + c_0^2 q^2$ при $|q| \ll \pi/2a_0$, a_0 - постоянная решетки. Модель (1) имеет двукратно-вырожденное основное состояние и допускает решение в виде солитона

$$u(x) = \pm u_0 \tanh \frac{x}{\ell}, \quad (2)$$

где $\ell = \frac{2c_0}{\omega_A}$ характеризует ширину солитона. Энергия солитонного возбуждения $E_s = 4\Delta_0/3\pi \approx 0,4 \text{ эВ}$, масса солитона $M_s = 6m_e$, m_e - масса электрона, $\ell = 10a_0$. Солитонное нарушение (2) ведет к атомной структуре, симметричной относительно атома, расположенного в центре солитона. Таким образом, в центре пайерловской щели появляется локализованное электронное состояние, которое может быть занято избыточным электроном или дыркой. При этом солитон приобретает заряд $\pm(e)$. Модель (1) находится в хорошем согласии с экспериментом, но требует большой осторожности при анализе в области дефекта $x \rightarrow 0$, т.к. при этом она имеет сингулярность.

В другом подходе предполагается, что уже в процессе полимеризации возможно возникновение топологически стабильных дефектов, разделяющих вырожденные области (рис. 9).



Р и с. 9

В отсутствие примеси область дефекта остается нейтральной, но содержит неспаренный спин $1/2$.

Макроскопическая модель, включающая наряду с решеточными и электронными членами, предложена в^{/34,35/}. Одномерный решеточный гамильтониан имеет вид

$$H = - \sum_{n,s} t_{n,n+1} (C_{n+1,s}^+ C_{n,s} + \text{э.с.}) + \frac{K}{2} \sum_n (y_{n+1} - y_n)^2 + \frac{M}{2} \sum_n \dot{y}_n^2, \quad (3)$$

где $C_{n,s}^+$ ($C_{n,s}$) - оператор рождения (уничтожения) π -электрона со спином S на n -й (CH) -группе, y_n - конфигурационные координаты для каждой (CH) -группы, описывающие трансляцию вдоль линейного остова цепочки, M - масса группы (CH) , K - упругая постоянная. В приближении сильной связи интеграл перекрытия электронных облаков π -электронов $t_{n,n+1}$ может быть разложен до первого порядка относительно недимеризованного состояния $t_{n,n+1} = t_0 - \alpha(y_{n+1} - y_n)$, где t_0 - интеграл перекрытия для недимеризованной цепочки, α - константа электрон-фононной связи.

Отметим, что в (3) исключена межцепочечная связь и не учитывается кулоновское взаимодействие π -электронов. Значение параметров гамильтониана: $t_0 = 2,5 \text{ эВ}$ ^{/3,7/}, $K = 21 \text{ эВ/\AA}^2$ ^{/36,37/}, $\alpha = 4,1 \text{ эВ/\AA}$ ^{/34/}. Поскольку длина C-C связи составляет величину $\ell = 1,4 \text{ \AA}$, то постоянная решетки (рис. 4) есть $a_0 = 1,22\text{\AA}$; отсчет энергии производится от уровня Ферми.

При $\alpha = 0$ гамильтониан (3) обладает симметрией относительно зеркального отражения $y_n \rightarrow -y_n$, т.е. $H(-y_n|0) = H(y_n|0)$. При $\alpha \neq 0$ имеет место нарушение симметрии основного состояния:

$$H(y_n, \alpha) \neq H(-y_n | \alpha).$$

§ 4. Основное состояние (СН) и некоторые результаты, полученные на основе дискретной модели

Определим энергии основного состояния системы, описываемой гамильтонианом (3). При этом используем приближение Борна-Оппенгеймера: пренебрежем кинетической энергией фононов и представим статическое смещение "узла \mathcal{N} " в виде

$$y_n = (-1)^n y. \quad (4)$$

В решетке без смещения (нормальная фаза) электронный спектр имеет вид

$E = -2t_0 \cos qa_0$, где $qa_0 = \frac{2\pi n}{N}$ ($n=0, \pm 1, \dots, \pm \frac{N}{2}$), N - число атомов в решетке. В решетке со смещением (4)

$$E_{1,2}(q) = \pm \sqrt{(\Delta_0 \sin qa_0)^2 + (2t_0 \cos qa_0)^2}, \quad (5)$$

где $qa_0 = \frac{2\pi n}{N}$ с $n = 0, \pm 1, \dots, \pm N/4$, т.е. зона Бриллюэна уменьшилась в 2 раза ($|q_F| = \pi/2a_0$), и возникла щель в электронном спектре $\Delta_0 = 4\alpha y$. Отметим, что спектр (5) симметричен относительно энергии Ферми.

Свободная энергия электронов и решетки

$$F(y, T) = -T \sum_q \ln[1 + \exp(-E_i(q)/T)] + 2NKy^2, \quad (6)$$

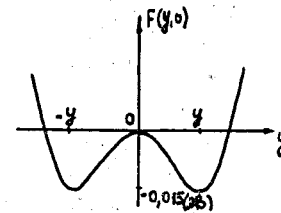
где T - температура. При $T = 0$ и $N \rightarrow \infty$ свободная энергия на один атом углерода имеет вид

$$F(y, 0) = -\frac{4t_0}{\pi} E(1-z^2) + \frac{Kt_0^2 z^2}{2d^2}, \quad (7)$$

$$z = 2dy/t_0, \quad E(1-z^2) = \int_0^{\pi/2} \sqrt{1 - (1-z^2)\sin^2 q} dq$$

При $\Delta_0 \ll t_0$ $E(1-z^2) \approx 1 + \frac{1}{2} (\ln \frac{4}{|z|} - \frac{1}{2}) z^2 + \dots$

Минимизируя $F(y, 0)$ (7) по z , получаем смещение $y = \Delta_0/4d$ с $\Delta_0 = (8t_0/e) \exp(-\pi Kt_0/4d^2)$. В точке $y = 0$ находится локальный максимум, в соответствии с теоремой Паулиса. Вид кривой $F(y, 0) \equiv E_0(y)$ изображен на рис. 10.



Р и с. 10

Таким образом, основное состояние при $T = 0$ является двукратно вырожденным. При $\Delta_0 = 0,7$ эВ и $\alpha = 4,1$ эВ/Å. Смещение $y = 0,04\text{Å}$ в согласии с [37].

Наличие вырождения обуславливает возникновение топологических солитонов, разделяющих А- и В-фазы (рис. 9). Численные расчеты, проведенные в рамках решеточной модели, показали существование решения в виде доменной стенки [35]. При этом вводился параметр порядка, связанный с переменными y_n : $\psi_n = (-1)^n y_n$.

Фазы А и В можно определить посредством

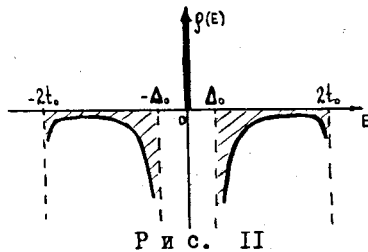
$$\psi_{0n} = \begin{cases} y_0, & \text{фаза А;} \\ -y_0, & \text{фаза В.} \end{cases}$$

Предположим, что в окрестности узла $\mathcal{N} = 0$ формируется доменная стенка, разделяющая А- и В-области. Для того чтобы устранить граничные эффекты, рассматривают рождение пары солитон-антисолитон, причем считают их широко разведенными, чтобы исключить взаимодействие (см. рис. 14). Было показано [35], что модель (3) допускает решение в виде

$$\psi_n = y_0 \tanh \frac{na_0}{\xi}. \quad (8)$$

Параметры солитона оказались следующие. Ширина солитона $\xi = 7a_0$, энергия рождения солитона $E_s = 0,42$ эВ, масса $M_s = 6 m_e$.

Для изучения электронного спектра в присутствии солитона необходимо вычислить изменение в плотности состояний, обусловленное солитоном. Вычисления дают следующую картину (рис. 11).



Отметим появление дополнительного состояния ϕ_0 в центре энергетической щели. Условие полноты электронных волновых функций ϕ_ν на каждом узле n подразумевает, что интеграл по энергии от локальной плотности $\rho_{nn}(E)$ для любого узла n равен единице

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho_{nn}(E) dE = 1, \quad (9)$$

где $\rho_{nn}(E) = \sum_{\nu} |\phi_{\nu}(n)|^2 \delta(E - E_{\nu})$. Поскольку гамильтониан (3) инвариантен относительно операции зарядового сопряжения, то

$\rho_{nn}(E) = \rho_{nn}(-E)$. Теперь можно разбить спектральный интеграл (9) и выделить дискретное состояние с нулевой энергией $\phi_0(n)$, возникающее в присутствии солитона.

$$2 \int_{-\infty}^0 \rho'_{nn}(E) dE + |\phi_0(n)|^2 = 2 \int_{-\infty}^0 \rho_{nn}(E) dE,$$

где $\rho'_{nn}(E)$ - локальная плотность электронов валентной зоны с учетом наличия топологического солитона. Таким образом, локальный дефицит валентной зоны составляет

$$\int_{-\infty}^0 dE [\rho'_{nn}(E) - \rho_{nn}(E)] = -\frac{1}{2} |\phi_0(n)|^2. \quad (10)$$

Суммируя по всем узлам и используя нормировку волновой функции $\phi_0(n)$, находим, что общий дефицит валентной зоны составляет точно $1/2$ состояния на спин. Если ввести в рассмотрение спин, то после суммирования в (10) приходим к выводу, что в присутствии солитона валентная зона "недосчитывается" точно одного электрона. В отсутствие примеси область дефекта остается нейтральной. Однако появляется "избыточный" электрон в состоянии ϕ_0 , локализуемый на углероде "сбоку" \tilde{u} -связи. (Этот сбой обуславливает "деформацию" распределения электронов в системе в области $\sim \ell$). Поскольку в валент-

ной зоне все спины спарены, то это состояние будет иметь неспаренный спин $1/2$. Таким образом, получаем нейтральный солитон со спином $1/2$. Если состояние ϕ_0 не занято или дважды занято благодаря, например, примеси, то спин солитона равен нулю, тогда как заряд равен $\pm e$.

Солитонная картина позволяет объяснить основные свойства полиацетилена. Учитывая, что энергия рождения солитона $E_s < \Delta_0$, можно предположить, что примесная проводимость в полиацетиле осуществляется преимущественно за счет солитонов. Поскольку заряженный солитон имеет нулевой спин, то не должно наблюдаться изменение магнитной восприимчивости, что и имеет место (см. рис. 7б). С другой стороны, нейтральный солитон имеет спин, что согласуется с картиной рис. 7а. Более того, энергия активации для электрической проводимости $E_a = 0,3 \text{ эВ}^{38/}$ хорошо согласуется с энергией связи солитона $E_s \approx 0,31 - 0,33 \text{ эВ}^{34/}$. В экспериментах по инфракрасному поглощению наблюдался пик в области $0,1 \text{ эВ}^{6,39/}$, что согласуется с колебательной модой солитона $\hbar\omega_s = 0,07-0,08 \text{ эВ}^{34/}$. Имеется целый ряд других подтверждений солитонного механизма в полиацетиле (см. обзор^{21/}).

Среди дальнейших исследований в рамках дискретной модели (3) выделим два направления. Во-первых, предпринимались попытки учета кулоновского взаимодействия между \tilde{u} -электронами^{10,40-42/}. При этом к (3) добавляется член

$$H_{e-e} = \frac{V}{2} \sum_n \rho_n \rho_{n+1} + \frac{1}{2} \sum_{n \neq n'} U_{nn'} \rho_n \rho_{n'}, \quad (11)$$

где электронная плотность $\rho_n = \sum_s C_{ns}^* C_{ns}$.

Численные исследования на конечных цепочках показали^{43,44/}, что при $U_{nn'} = 0$ димеризация цепочки возрастает с ростом V до значения $V/2 \approx 4t_0 \equiv W$, где W - ширина зоны Бриллюэна, а затем слегка уменьшается. Кроме того, изучено влияние взаимодействия между ближайшими соседями $U_{n,n+1}$ и вторыми соседями $U_{n,n+2}$ на димеризацию.

Показано, что при $U_{n,n+1} \leq V/4$ имеет место усиление димеризации, а при $U_{n,n+1} \geq V/4$ ее ослабление. С другой стороны, $U_{n,n+2}$ действует против влияния $U_{n,n+1}$ в обеих областях. Имеются указания^{45/}, что при учете всего гамильтониана (11) димеризация будет иметь место.

Второе направление посвящено учету квантовых флуктуационных эффектов фононного поля. Вычисления методом Монте-Карло при произвольной массе M группы (СН) и числе компонент электронного спина

$n = 1, 2$ показали^{/46/}, что при $n = 2$ всегда имеет место димеризованное основное состояние. Критическое значение электрон-фононной константы связи α_c , при котором димеризация исчезает, в зависимости от M и n представлено в таблице:

Масса	$n = 1$	$n = 2$
$M = \infty$	$\alpha_c = 0$	$\alpha_c = 0$
$0 < M < \infty$	$\alpha_c > 0$	$\alpha_c = 0$
$M = 0$	$\alpha_c = \sqrt{2Kt_0}$	$\alpha_c = 0$

Влияние фононных флуктуаций сводится к 15% понижению димеризации.

Другим важным направлением является исследование точно решаемых дискретных моделей Пайерлса^{/47,48/}. Это отдельное большое направление, на котором мы не имеем возможности остановиться детально.

§ 5. Континуальная модель $(CH)_x$. Статическая и динамическая версии

Существенное развитие идеи солитонных возмущений в одномерной системе с электрон-фононным взаимодействием было получено после построения континуальной модели, допускающей точное аналитическое решение. В^{/49,50/} на основе континуальной модели одномерного диэлектрика Пайерлса было показано, что стационарными возбужденными состояниями такой системы являются амплитудные солитоны. При этом используется квазиклассическое по решеточным степеням свободы приближение. В^{/51/} получили континуальную модель, исходя из гамильтониана (3). В^{/52/} сделано обобщение на случай соизмеримой системы. В континуальном пределе гамильтониан (3) имеет вид^{/52/}

$$H = \int dx \left\{ -i v_F \left(u_3^*(x) \frac{\partial}{\partial x} u_3(x) - u_3^*(x) \frac{\partial}{\partial x} u_3(x) \right) + [\Delta^*(x) + \eta \Delta(x)] u_3^*(x) u_3(x) + [\Delta^*(x) + \eta \Delta(x)] u_3^*(x) u_3(x) \right\} + (2\lambda \pi v_F)^{-1} \int dx [2\Delta^*(x)\Delta(x) + \eta \Delta^2(x) + \eta \Delta^2(x)], \quad (12)$$

где $\lambda = 4\alpha^2 a_0 / \pi v_F K$, $v_F = 2t_0 a_0$, ($\hbar = c = 1$); параметр η имеет два значения: $\eta = 1$ для соизмеримой системы с $q_F = \pi/2a_0$, и

$\eta = 0$ для несоизмеримой. Поля $u(x)$, $v(x)$ характеризуют электронные состояния вблизи импульса Ферми $\pm q_F$, а $\tilde{\Delta}(x)$ и $\Delta(x)$ связаны с решеточной деформацией, причем зависимость от времени исключена (используется адиабатическое приближение).

В^{/53/} получены динамические уравнения модели полиацетилена (3) в континуальном пределе с использованием подхода, основанного на расщеплении корреляторов^{/54/}. С точностью до членов порядка a_0^3 самосогласованная система уравнений имеет вид^{/53/}

$$\begin{aligned} i u_t &= -i v_F u_x + v \tilde{\Delta}^* + \frac{a_0^2}{2} \left(\tilde{\Delta}^* v_{xx} + v_x \tilde{\Delta}^* + \frac{1}{2} v \tilde{\Delta}^*_{xx} \right), \\ i v_t &= i v_F v_x + u \tilde{\Delta} + \frac{a_0^2}{2} \left(\tilde{\Delta} u_{xx} + u_x \tilde{\Delta} + \frac{1}{2} u \tilde{\Delta}_{xx} \right), \end{aligned} \quad (13)$$

126134

и

$$\begin{aligned} M \tilde{\Delta}_{tt} + K a_0^2 \tilde{\Delta}_{xx} &= -4K \tilde{\Delta} - 16 \alpha^2 a_0 (u^* v + v^* u) \eta \\ -4 \alpha^2 a_0^3 [u^* v_{xx} + v u_{xx}^* + \eta (u v_{xx}^* + v^* u_{xx})] &, \end{aligned}$$

где параметр щели $\tilde{\Delta}(x,t) = \Delta(x,t) + \eta \Delta^*(x,t)$, $u_x = \frac{\partial u(x,t)}{\partial x}$, $v_x = \frac{\partial v(x,t)}{\partial x}$.

Поскольку решить эту громоздкую систему не представляется возможным, сделаем ряд приближений. Прежде всего исключим в (13) члены порядка a_0^2 и выше. Кроме того, будем использовать квазистатическое приближение, пренебрегая членом $M \tilde{\Delta}_{tt}$. После этого система принимает вид

$$\begin{aligned} i u_t &= -i v_F u_x + v \tilde{\Delta}^*, \\ i v_t &= i v_F v_x + u \tilde{\Delta}, \\ \tilde{\Delta} &= - \frac{4 \alpha^2 a_0}{K} \sum_{k,s} (u_k^* v_k + \eta v_k^* u_k), \end{aligned} \quad (14)$$

где суммирование осуществляется по занятым состояниям в валентной

Объединенный институт
ядерных исследований
БИБЛИОТЕКА

зоне. Отметим, что уравнения для электронных волновых функций имеют структуру релятивистского уравнения Дирака частицы в поле. Нетрудно убедиться, что система уравнений (14) обладает инвариантностью относительно преобразований Лоренца, где вместо скорости света имеем скорость Ферми: $x \rightarrow x' = (x - vt) / \sqrt{1 - v^2/v_F^2}$, $t \rightarrow t' = (t - vx/v_F^2) / \sqrt{1 - v^2/v_F^2}$. Следовательно, можно ограничиться решением стационарных уравнений (14). Определяя $u(x,t) = e^{-i\omega t} u_n(x)$, $v(x,t) = e^{-i\omega t} v_n(x)$, имеем

$$\omega_n u_n(x) = -i v_F \frac{\partial u_n(x)}{\partial x} + v_n(x) \tilde{\Delta}(x), \quad (14'a)$$

$$\omega_n v_n(x) = i v_F \frac{\partial v_n(x)}{\partial x} + u_n(x) \tilde{\Delta}(x),$$

$$\tilde{\Delta}(x) = -\frac{4\alpha^2 a_0}{K} \sum_{n,s} (u_n^* v_n(x) + \eta v_n^*(x) u_n(x)). \quad (14'b)$$

Далее мы ограничимся анализом случая перехода в соизмеримую структуру ($\eta = 1$). Такие решения были найдены различными методами^{50,55,56/}. Имеется четыре класса решений.

В основном состоянии валентная зона полностью заполнена, возбуждений нет. При этом щель в электронном спектре постоянна, $\tilde{\Delta} = \Delta_0 = W \exp(-1/2\lambda)$. Электронные волновые функции в валентной зоне имеют вид

$$u_k(x,t) = N_k e^{i(kx - \omega t)}, \quad v_k(x,t) = -N_k' e^{i(kx - \omega t)},$$

$$\omega(k) = -\sqrt{\Delta_0^2 + k^2 v_F^2}, \quad N_k = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} \left(\frac{\omega - \Delta_0}{\omega} \right)^{1/2} \left(\frac{\omega + \Delta_0 - k v_F}{k v_F} \right),$$

$$N_k' = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} \left(\frac{\omega - \Delta_0}{\omega} \right)^{1/2} \left(\frac{\omega + \Delta_0 + k v_F}{k v_F} \right).$$

Другой класс решений системы (14) - кинки. Используя^{57,58/} и указанную выше инвариантность, нетрудно убедиться в справедливости решения

$$\Delta(x,t) = \Delta_0 \tanh \frac{x - v_F t + x_0}{\xi_c}, \quad (15)$$

которому соответствует электронный спектр с голдстоуновской модой. Волновые функции электронного состояния с $\omega = 0$

$$u_0(x,t) = N_0 \operatorname{sech} \frac{x - v_F t + x_0}{\xi_c}, \quad v_0(x,t) = -\frac{i N_0}{v} \operatorname{sech} \frac{x - v_F t + x_0}{\xi_c}, \quad N_0 = \sqrt{\frac{v \Delta_0}{4 v_F}}.$$

Ширина солитона $\xi_c = \frac{v_F}{\Delta_0} \sqrt{1 - \beta^2}$, $\beta = v/v_F$, $v = \sqrt{(1+\beta)/(1-\beta)}$; амплитуда N_0 стала, таким образом, и функцией скорости: $N_0 = N_0(v)$. В валентной зоне

$$u_k(x,t) = N_k e^{i\theta(x,t)} \left[\tanh \frac{\xi}{\xi_c} + i \frac{\omega - k v_F}{v \Delta_0} \right],$$

$$v_k(x,t) = -\frac{i N_k}{v} e^{i\theta(x,t)} \left[\tanh \frac{\xi}{\xi_c} - i v \frac{\omega + k v_F}{\Delta_0} \right], \quad (15')$$

$$\xi = x - v c t + x_0, \quad \theta(x,t) = kx + \omega t + \theta_0, \quad \omega = 2 t_0 \delta,$$

$$\delta = \sqrt{\delta_0^2 + k a_0^2}, \quad \delta_0 = \frac{\Delta_0}{2 t_0}, \quad N_k(v_c) = \delta_0 \left[\frac{1 + \beta}{8 \pi \delta (\delta - \beta k a_0)} \right]^{1/2}.$$

Очевидно, что при $v = 1$ ($v_c = 0$) имеет место статическое решение^{58/}. Ширина солитона слегка уменьшается при движении: $\xi_c(v_c) < \xi_c(0)$. Поскольку в полиацетилене $v_F \approx 10^6$ см/с, приближение $v_c \ll v_F$ отвечает "диффузии" доменной стенки и может быть вполне приемлемым. В то же время говорить о динамике солитона в полном смысле не приходится. Существуют, правда, попытки построить динамику солитонов на основе акустической моды в фононном спектре^{59/}.

Таким образом, в присутствии солитона появляется дополнительный уровень в середине энергетической щели электронного спектра, который может быть занят $n = 0, 1$ или 2 электронами.

Энергия рождения солитона $E_c = \frac{2 \Delta_0}{\lambda} \approx 0,44$ эВ: то есть наличие хорошее согласие с вычислениями в рамках дискретной модели (3). Отметим, что в континуальной модели это точный результат. Мы не будем останавливаться на деталях вычисления энергии солитона (см. по этому поводу^{50,51/}).

В рамках континуальной модели удалось получить еще один тип возбуждений - полярон.

Поскольку аналитическое выражение имеет достаточно сложный вид, мы не будем выписывать динамические решения, имея всегда в виду "рецепт" их получения за счет лоренцевского сдвига.

В статическом случае^{55,58/}

$$\Delta(x) = \Delta_0 - K_0 v_F \left\{ \tanh[K_0(x+x_0)] - \tanh[K_0(x-x_0)] \right\}. \quad (16)$$

В энергетическом спектре в присутствии такой деформации появляются два симметрично расположенных дискретных уровня $E = \pm \omega_0$. Электронные волновые функции при $E = +\omega_0$.

$$u_+(x) = N_0 \left\{ (1-i) \operatorname{sech}[K_0(x+x_0)] + (1+i) \operatorname{sech}[K_0(x-x_0)] \right\},$$

$$v_+(x) = N_0 \left\{ (1+i) \operatorname{sech}[K_0(x+x_0)] + (1-i) \operatorname{sech}[K_0(x-x_0)] \right\},$$

$$N_0 = \frac{1}{4} \sqrt{K_0}, \quad K_0 v_F = \sqrt{\Delta_0^2 - \omega_0^2}, \quad \tanh K_0 x_0 = \frac{\Delta_0 - \omega_0}{K_0 v_F}.$$

При $E = -\omega_0$ $u_- \equiv i v_0$ и $v_- \equiv -i u_0$. В валентной зоне

$$u_-(k, x) = N_k e^{ikx} [(\omega + \Delta_0 - k v_F) - \gamma(1+i)t_+ + \delta(1-i)t_-],$$

$$v_-(k, x) = -N_k e^{ikx} [(\omega + \Delta_0 + k v_F) - \gamma(1-i)t_+ + \delta(1+i)t_-],$$

$$t_{\pm} = \tanh[K_0(x \pm x_0)], \quad \omega = \sqrt{k^2 v_F^2 + \Delta_0^2},$$

$$\gamma = \frac{K_0 v_F}{2} \left[1 - \frac{ik v_F}{\omega - \Delta_0} \right], \quad \delta = \frac{K_0 v_F}{2} \left[1 + \frac{ik v_F}{\omega - \Delta_0} \right],$$

$$N_k = \frac{1}{2\sqrt{2}\pi} \left[\frac{\omega - \Delta_0}{\omega(k^2 v_F^2 + K_0^2 v_F^2)} \right]^{1/2}.$$

И наконец, отдельно следует отметить работу^{/71/}, где было получено решение четвертого типа в виде бiona:

$$\Delta(x, t) = \Delta_0 [1 + \delta(x, t)],$$

$$\delta(x, t) = \sqrt{\epsilon} \left[\operatorname{sech} \frac{\sqrt{2} \epsilon x}{\xi_0} \right] \left[\cos \left(1 - \frac{\epsilon^2}{2} \right) \omega_R t \right] + \frac{3}{2} \epsilon^2 \left[\operatorname{sech}^2 \frac{\sqrt{2} \epsilon x}{\xi_0} \right] x$$

$$\left\{ \frac{1}{3} \cos \left[2 \left(1 - \frac{\epsilon^2}{2} \right) \omega_R t \right] - 1 \right\} + O(\epsilon^4),$$

где ϵ - малый параметр, $\xi_0 = v_F / \Delta_0$, $\omega_R = \omega_0 \sqrt{2\lambda}$, ω_0 - частота фононов. Энергия покоящегося бiona $E_b = \Delta_0 \epsilon (2\sqrt{3}/\pi)$. Вклад бионов в физические процессы может $[1 - 5\epsilon^2/9 + O(\epsilon^4)]$.

быть существен^{/72/}, поэтому изучение бионов в полиацетилене является весьма важной задачей. К описанию физических процессов в $(\text{CH})_x$ пока бионное решение не привлекалось.

§ 6. Солитонные возмущения и физические свойства $(\text{CH})_x$

Коснемся кратко вклада солитонных возмущений в физические характеристики $(\text{CH})_x$.

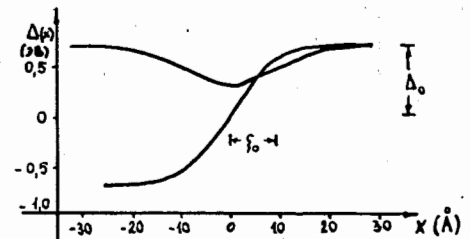
Характерная ширина полярона

$$2x_0 = \frac{2}{K_0} \tanh^{-1} [K_0 v_F / (\Delta_0 + \omega_0)], \quad \omega_0 = \Delta_0 / \sqrt{2}.$$

Таким образом, $2x_0 = \frac{w a_0}{\Delta_0 \sqrt{2}} \ln(1 + \sqrt{2}) \approx 10,8 \text{ \AA}$. Энергия поляронного возмущения

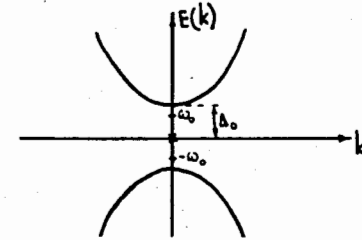
$$E_{\text{п}} = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} \Delta_0 \approx 0,9 \Delta_0. \quad (17)$$

Отметим, что при $x_0 \rightarrow \infty$ $\omega_0 \rightarrow 0$, и поляронное решение (16) переходит в широко разведенную пару солитон-антисолитон (подробнее смотри об этом ниже в главе II, §7). На рис. 12 представлена зависимость параметра щели $\Delta(x)$ для кинка и полярона,



Р и с. 12

а на рис. 13 изменение энергетического спектра в присутствии кинка и полярона.

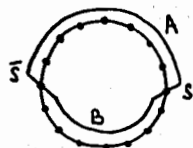


Р и с. 13

Очевидно, что поляроны должны играть существенную роль в физике полиацетилена. Поскольку $E_n < \Delta_0$ и $E_n < 2E_n$, то поляронный уровень является нижним энергетическим состоянием для дополнительного электрона. Поясним это более детально.

Согласно теореме Крамерса, спин системы с четным числом электронов должен быть целым, а с нечетным – полуцелым. При рождении солитона S^0 (нейтрального) общее число электронов системы сохраняется, но, как было показано ранее, возникает неспаренный спин, что противоречит теореме.

Ситуация может быть исправлена при условии, что одновременно с солитоном рождается антисолитон \bar{S}^0 на таком расстоянии, что их взаимодействием можно пренебречь (рис. 14, где для удобства рассмотрена замкнутая цепочка). Одновременного рождения $S\bar{S}$ -пар требует также условие топологической стабильности цепочки.



Р и с. 14

Именно поэтому поляронное состояние является более выгодным. Эксперименты по электрохимическому допированию полиацетилена показали^{/60/}, что заряженные носители занимают преимущественно поляронный уровень E_n . При этом спин носителя равен $1/2$, а заряд $\pm e$. Однако в рамках континуальной модели показано^{/61/}, что двухполяронное решение уже нестабильно и распадается на солитон-антисолитонные пары. Таким образом, с увеличением числа примесных электронов в цепочке растет число заряженных солитонов, что объясняет наличие заряженных носителей без спина (рис. 76).

В зависимости от заполнения локализованных уровней $\pm \omega_0$ возможно образование заряженных или нейтральных солитонных пар. Такие пары были обнаружены экспериментально^{/62/}, причем число фотогенерированных спинов оказалось на два порядка меньше числа заряженных носителей, т.е. при фотовозбуждении преимущественно рождаются заряженные солитон-антисолитонные пары. Это нашло подтверждение и в теоретических расчетах^{/63/}.

Следует отметить, что вклад, обусловленный солитонами и поляронами в различные физические процессы (транспортные, оптические, виб-

рационные и т.д.), изучался как теоретически, так и экспериментально. Имеются достаточно убедительные подтверждения, свидетельствующие в пользу солитонной картины в полиацетиле. С другой стороны, имеется ряд работ^{/22,27,64/}, где авторы выступают против солитонной концепции. Мы вернемся к их обсуждению в главе V.

В нашу задачу не входит детальный разбор работ, посвященных теоретическому исследованию различных проявлений солитонов и поляронов в упомянутых выше физических процессах. Необходимо отметить только, что в настоящее время ведутся исследования по многим направлениям, каждое из этих направлений заслуживает отдельного обзора. В главе V мы подробно остановимся на одном из них – интерпретации перехода диэлектрик – металл в транс-полиацетиле.

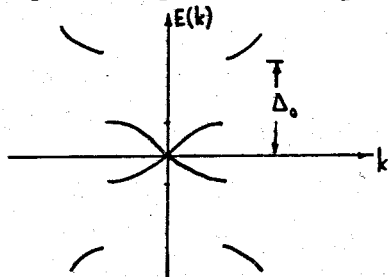
• А пока вернемся к дальнейшему обсуждению уточнений самой модели (12). Здесь следует выделить несколько направлений.

а) Учет кулоновского взаимодействия \bar{N} -электронов. Как уже отмечалось, для этого надо добавить в гамильтониан (12) слагаемое $N_e \cdot e$ (II). Оставляя в нем только взаимодействие на одном узле $U_{nn} = 0$ ^{/66/}, приходим к гамильтониану Хаббарда^{/65/}, который активно изучался в^{/66/}. При малых значениях V можно использовать метод^{/54/}, что приводит к значению щели Δ_0 в основном состоянии $\Delta_0 = W \exp[-\tau V_e / 2a_0 (\frac{4}{k} + V)]$, т.е. при малых V димеризация имеет место, но щель слегка возрастает. Интересно отметить, что с ростом V возможны конкуренция перехода Пайерлса и возникновения волн спиновой плотности, приводящего к антиферромагнитному основному состоянию. Таким образом, при сильной электрон-электронной корреляции можно говорить о диэлектрике Мотта-Пайерлса. Расчеты здесь в целом хорошо согласуются с^{/67/}. Применительно к полиацетиле пока не ясно, какую конкретную величину имеет V . Этот вопрос требует дальнейшего уточнения и анализа.

б) Влияние трехмерности электронного спектра на пайерлсовский структурный переход исследовано в^{/68/}. В предположении, что электронный спектр характеризуется двумя почти плоскими поверхностями Ферми около точек $\pm k_f$, показано, что соизмеряемая диэлектрическая фаза неустойчива. При $t > \Delta_0 / \sqrt{R}$, где t характеризует степень поперечного перекрытия электронных облаков, системе выгоднее находиться в металлическом состоянии. Однако металлическое состояние, в свою очередь, неустойчиво относительно перехода в несоизмеримое состояние.

в) В^{/69/} приведено точное решение модели Пайерлса с произвольным

числом электронов на элементарную ячейку. Исследование этого вопроса имеет важное значение для изучения легированного полиацетилена, где с ростом числа примесных электронов растет отклонение от случая строго полузаполненной зоны. Оптическая щель в электронном спектре оказывается непрерывной по параметру ρ , характеризующему степень заполнения зоны ($\rho = 1$ для полузаполненной зоны), и конечна. Изменение электронного спектра сводится к расширению солитонного уровня и образованию двух симметричных запрещенных зон (рис. 15).



Р и с. 15

Мы вернемся к обсуждению этого результата в гл. V при исследовании случая конечных температур.

г) В^{50/} рассмотрено влияние межцепочечной связи на локальные свойства солитона. Наличие связи между цепочками приводит к наиболее существенному взаимодействию между солитонами. Кроме того, оказалось, что солитон может приобрести заряд без изменения спина.

д) Наконец, в^{70/} изучено влияние дисперсии фононов на амплитудные солитоны. Обнаружено появление нецелого локального электрического заряда солитонов.

Кратко остановимся на модели, предложенной для описания цис-полиацетилена^{55/}.

В отличие от транс-(CH)_x, в цис-(CH)_x основное состояние является невырожденным. Следовательно, цепочка цис-(CH)_x не может содержать солитонных возбуждений. Однако поляроны в цис-полиацетиле не вполне можно ожидать. Простейший способ описания такой ситуации заключается в предположении, что наряду с пайерлсовской димеризацией

$\Delta_i(x)$ имеет место димеризация под влиянием скелета σ -связей Δ_e . Таким образом, в общем случае $\Delta(x) = \Delta_e + e^{i\phi} \Delta_i(x)$, причем величины $\phi = \text{const}$ и $\Delta_e \neq \Delta_e(x)$ определяются атомной структурой полимера. Гамильтониан имеет вид

$$H = \int dx \left\{ \frac{\omega_0^2}{g^2} \Delta_i^2(x) + \Psi^\dagger(x) \left[-i v_F \sigma_3 \frac{\partial}{\partial x} + (e^{i\phi} \Delta_i(x) + \Delta_e) \sigma_1 \right] \Psi(x) \right\}. \quad (18)$$

Отметим, что введение в (18) члена с Δ_e нарушает симметрию относительно замены $\Delta(x) \rightarrow -\Delta(x)$ и $(u, v) \rightarrow (u, -v)$. Модель (18) допускает наряду с поляронным решением, аналогичным (16), также биполярное решение, представляющее солитон-антисолитонную пару, в которой солитоны имеют одинаковый заряд.

При последующем изложении нам потребуется несколько другая форма записи гамильтониана (12)

$$H = \int dx \left\{ \frac{\omega_0^2}{g^2} \Delta^2(x) + \Psi^\dagger(x) \left[-i v_F \sigma_3 \frac{\partial}{\partial x} + \Delta(x) \sigma_1 \right] \Psi(x) \right\}, \quad (19)$$

где опущен кинетический член для фононного поля $\Delta(x)$, $\Psi(x) = \begin{pmatrix} u(x) \\ v(x) \end{pmatrix}$, $\omega_0^2/g^2 = \kappa/4d^2a_0$ - эффективная электрон-фононная константа связи, σ_i - матрицы Паули: $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. Спиновый индекс S в (19) опущен.

Уравнения (14) в стационарном случае имеют вид (14'), причем электронные волновые функции имеют нормировку

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \left\{ |u_n(x)|^2 + |v_n(x)|^2 \right\} = 1 \quad (20)$$

Уравнения (14') представляют собой самосогласованную систему уравнений Боголюбова - Де Жена.

На этом мы пока закончим краткий анализ свойств континуальной модели полиацетилена. В следующей главе будет показано, что эта модель имеет прямое отношение к ряду моделей релятивистской квантовой теории поля. Именно эта аналогия станет предметом дальнейшего изложения в данных лекциях. Поэтому мы с необходимостью отмечаем, что наш обзор является заведомо неполным. Имеется большое количество результатов, представляющих несомненный интерес для изучения физики полиацетилена, которых нам не удастся коснуться. Заинтересованных читателей отсылаем к трудам международных конференций, посвященных изучению полиацетилена, а также обзорным статьям.

□

ГЛАВА II. ДВУМЕРНЫЕ (1+1) МОДЕЛИ РЕЛЯТИВИСТСКОЙ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ПОЛЯ

В настоящей главе рассмотрим две полевые модели: модель Гросса - Невье ^{/73/} и модель ϕ^4 с фермионами ^{/74/}. Несмотря на то, что с точки зрения квантовой теории поля (КТП) изучение двумерных моделей является скорее формальным математическим исследованием, результаты такого исследования весьма примечательны и, как оказалось, имеют приложение в физике конденсированных сред.

§ 7. Модель Гросса - Невье

Лагранжиан модели имеет вид

$$\mathcal{L} = \sum_{p=1}^N [\bar{\Psi}^p(i\partial)\Psi^p] + \frac{1}{2} g_{CN}^2 \left[\sum_{p=1}^N \bar{\Psi}^p \Psi^p \right]^2, \quad (2.1)$$

где $\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ - 2-компонентный спинор, g_{CN} - безразмерная константа, $\partial = \gamma_\mu \partial^\mu$, $\mu = 0, 1$; $\gamma_0 = \sigma_3$, $\gamma_1 = i\sigma_1$, $\bar{\Psi} = \Psi^\dagger \gamma_0$. Эта модель описывает N типов безмассовых фермионов, взаимодействующих нелинейным образом.

Отметим, что модель (2.1) эквивалентна хорошо известной четырехмерной модели Намбу - Иона - Ласинио ^{/75/}. В свою очередь, в модели ^{/75/} реализуется динамическое нарушение киральной симметрии исходного лагранжиана. При этом фермионы приобретают массу, что аналогично образованию сверхпроводящей щели в теории БКШ. В последнее время ^{/75/} активно используется в теории сильных взаимодействий ^{/76/}.

В двух измерениях модель (2.1) имеет ряд особенностей. Во-первых, она становится перенормируемой. Во-вторых, обладает свойством асимптотической свободы. Наконец, модель (2.1) полностью интегрируема.

Можно построить производящий функционал

$$\begin{aligned} Z(\eta, \bar{\eta}) &= C \int d\Psi d\bar{\Psi} \exp \left\{ i \left[\bar{\Psi} \partial \Psi + \frac{1}{2} g_{CN}^2 (\bar{\Psi} \Psi)^2 + \bar{\eta} \Psi + \bar{\Psi} \eta \right] \right\} \\ &= C' \int d\Psi d\bar{\Psi} d\sigma \exp \left\{ i \left[\bar{\Psi} \partial \Psi - \frac{1}{2} \sigma^2 - g_{CN} \bar{\Psi} \Psi \sigma + \bar{\eta} \Psi + \bar{\Psi} \eta \right] \right\} \end{aligned}$$

и убедиться, что лагранжиан (2.1) формально эквивалентен лагранжиану

$$\mathcal{L} = \sum_{p=1}^N [i \bar{\Psi}^p \partial \Psi^p - g_{CN} \sigma \bar{\Psi}^p \Psi^p] - \frac{1}{2} \sigma^2, \quad (2.2)$$

где возникло скалярное поле σ . Отметим, что в (2.2) отсутствует слагаемое с производной по времени для σ . В отличие от ^{/75/}, где динамика поля σ получается за счет фермионов, в двух измерениях невозможно, учитывая радиационные поправки, получить слагаемое вида σ_μ^2 , и поле σ остается формальным объектом. Лагранжиан (2.1) обладал инвариантностью относительно "дискретного кирального γ_5 -преобразования": $\Psi \rightarrow \gamma_5 \Psi$, $\gamma_5 = \gamma_0 \gamma_1$. В случае $\sigma \neq 0$ инвариантность (2.2) относительно преобразования $\Psi \rightarrow \gamma_5 \Psi$ нарушается. В дальнейшем будет показано, что вакуум, обладающий дискретной γ_5 симметрией не является основным состоянием системы, и имеет место динамическое нарушение симметрии. Вследствие этого в спектре одночастичных состояний уравнения Дирака возникает массовая щель, являющаяся аналогом димеризационной щели в полиацетилене.

Уравнения движения для лагранжиана (2.2) имеют вид

$$(i\partial - g_{CN} \sigma(x)) \Psi^p(x) = 0, \quad (2.3a)$$

$$\sigma(x) = -g_{CN} \sum_{p=1}^N \bar{\Psi}^p(x) \Psi^p(x), \quad (2.3b)$$

где (2.3b) есть соотношение самосогласования. Для стационарных состояний уравнение (2.3a) принимает вид

$$\begin{aligned} \omega_n \Psi_{1n}^p(x) &= \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{2n}^p(x) + g_{CN} \sigma(x) \Psi_{1n}^p(x), \\ \omega_n \Psi_{2n}^p(x) &= -\frac{\partial}{\partial x} \Psi_{1n}^p(x) - g_{CN} \sigma(x) \Psi_{2n}^p(x). \end{aligned} \quad (2.4a)$$

Нетрудно убедиться, что уравнения (2.4a) эквивалентны уравнениям (I.14) с точностью до замены $\Psi_1 \rightarrow (u+v)/\sqrt{2}$, $\Psi_2 \rightarrow -i(u-v)/\sqrt{2}$, $g_{CN} \sigma(x) \rightarrow \Delta(x)$, а также с учетом масштабного преобразования $x \rightarrow v_x x$. Помимо этого необходимо установить соответствие между g_{CN} и параметрами уравнений (I.14).

Более подробно остановимся на идентификации уравнений (I.14) и (2.3b). Динамическое нарушение симметрии означает, что существует решение $\sigma(x) = \sigma_0$ ^{/56/}. Как показано в ^{/56/}, корректная интерпретация уравнения (2.3b) требует выполнения соотношения

$$Z(\Lambda) \sigma_0 = -g_{CN} \sum_{p,n} \bar{\Psi}^p(n,x) \Psi^p(n,x), \quad (2.4b)$$

где $Z(\Lambda)$ есть ультрафиолетовая перенормировка, Λ - импульс обрезаия. Сумма в (2.4b) осуществляется по всем состояниям с энергией, меньшей нуля. Сумма по p аналогична суммированию по спином в (I.14b). Согласно ^{/56/},

$$Z(\Lambda) = \frac{g_{ew}^2}{\pi} \int_0^\Lambda \frac{N dk}{\sqrt{k^2 + m_\psi^2}} = \frac{g_{ew}^2}{\pi} N \ln \frac{\Lambda + \sqrt{\Lambda^2 + m_\psi^2}}{m_\psi}, \quad (2.5)$$

причем $m_\psi = g_{ew} \sigma_0$. Отметим, что фактор $Z(\Lambda)$ в случае конденсированной среды аналога не имеет. При выборе

$$m_\psi = g_{ew} \sigma_0 = 2\Lambda \exp(-\pi/N g_{ew}^2) \quad (2.6)$$

получаем $Z(\Lambda) = 1$, что соответствует ситуации в модели полиацетилена. Согласно (2.6), при фиксированном m_ψ и $\Lambda \rightarrow \infty$ константа взаимодействия g_{ew} стремится к нулю как $1/\ln \Lambda$, т.е. модель (2.1) обладает свойством асимптотической свободы.

Окончательная аналогия статических полуклассических уравнений модели (2.1) и уравнений (I.14) устанавливается при выборе $N = 2$ и $g_{ew}^2 = g^2/2\omega_0^2$. В [56] с помощью метода обратной задачи рассеяния решена спектральная задача (2.4 а, б).

В зависимости от постановки граничных условий получены решения в виде кинков и "поляронов". Опишем кратко некоторые решения (2.4а).

Основному состоянию системы соответствует полностью заполненное море ферми. При $\sigma(x) = \sigma_0$ нормированные решения (2.4а) с отрицательной энергией имеют вид плоских волн

$$\Psi_n(x) \equiv \Psi_k(x) = N_k e^{ikx} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{ik}{\omega - m_\psi} \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

где $\omega = \sqrt{k^2 + m_\psi^2}$, $N_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{\omega - m_\psi}{2\omega} \right)^{1/2}$. Нетрудно убедиться, что $\bar{\Psi}_k(x) \Psi_k(x) = -\frac{m_\psi}{2\pi\omega}$,

$$\sum_{\substack{p, n \\ \omega_p < 0}} \bar{\Psi}_n^p(x) \Psi_n^p(x) = -\frac{N}{2\pi} \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \frac{m_\psi dk}{\sqrt{k^2 + m_\psi^2}}, \quad (2.8)$$

так что условие самосогласования (2.4б) выполнено.

Второй класс решений - кинки, получается при выборе граничных условий в виде $\sigma(+\infty) = -\sigma(-\infty) = \pm \sigma_0$. Для поля σ получено выражение

$$\sigma = \sigma_0 \tanh(m_\psi x + \delta_0), \quad (2.9)$$

где $\tanh \delta_0 = (m_\psi - c_0)/(m_\psi + c_0)$. Полагая $c_0 = m_\psi$, приходим к выражению для параметра щели в модели полиацетилена (I.15). Фермионный спектр содержит связанное состояние с $\omega_0 = 0$, которому соответствуют волновые функции

$$\Psi_0(x) = \sqrt{\frac{m_\psi}{4}} \operatorname{sech}(m_\psi x + \delta_0) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

а также имеется непрерывный спектр с $\omega = \sqrt{k^2 + m_\psi^2}$ и волновыми функциями в море Ферми

$$\Psi_{\pm}(k, x) = N_k e^{ikx} \begin{pmatrix} \tanh(m_\psi x + \delta_0) - \left(\frac{\omega + ik}{m_\psi} \right) \\ \tanh(m_\psi x + \delta_0) + \left(\frac{\omega - ik}{m_\psi} \right) \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

$$N_k = im_\psi / 2\omega \sqrt{2\pi}.$$

Третий класс решений, "мешки" ("bags"), получается при граничных условиях $\sigma(x) \rightarrow \sigma_0$ при $|x| \rightarrow \infty$ и дается формулой

$$\sigma(x) = \sigma_0 - \frac{k_0^2}{\omega_0 g_{ew}} \operatorname{sech} K_0 [(x+x_0) + \delta_1] \operatorname{sech} K_0 [(x-x_0) + \delta_1], \quad (2.12)$$

$$\tanh K_0 x_0 = (m_\psi - \omega_0)/K_0, \quad \tanh \delta_1 = [K_0(m_\psi - \omega_0) - c_0 \omega_0] /$$

$$[K_0(m_\psi - \omega_0) + c_0 \omega_0] \quad \text{и} \quad \omega_0^2 = m_\psi^2 - K_0^2.$$

Выбирая $\delta_1 = 0$, приходим к соответствующему решению (I.16) в (СН)_x. В фермионном спектре возникает связанное состояние с энергией $\pm \omega_0$.

$$\Psi_0(x) = \sqrt{\frac{K_0}{8}} \begin{pmatrix} \operatorname{sech}[K_0(x+x_0) + \delta_1] + \operatorname{sech}[K_0(x-x_0) + \delta_1] \\ -\operatorname{sech}[K_0(x+x_0) + \delta_1] + \operatorname{sech}[K_0(x-x_0) + \delta_1] \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

Состояния с отрицательной энергией имеют вид

$$\Psi_{\pm}(k, x) = N'_k \alpha e^{ikx} \begin{pmatrix} -ik + t_\pm \gamma + t_\pm \delta \\ \omega + m_\psi - t_\pm \gamma + t_\pm \delta \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

где

$$N'_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{\omega - m_\psi}{2\omega(K_0^2 + k^2)} \right)^{1/2}, \quad \gamma = \frac{K_0}{2} \left(1 - \frac{ik}{\omega - m_\psi} \right),$$

$$\delta = \frac{K_0}{2} \left(1 + \frac{ik}{\omega - m_\psi} \right), \quad \alpha = \frac{K_0 + ik}{K_0^2 + k^2}.$$

Эти выражения аналогичны (I.15) для u_{\pm} и v_{\pm} в (СН)_x.

Отметим, что, согласно /56/, величина ω_0 определяется посредством $\omega_0(n_0) = m_\psi \cos \theta(n_0)$, где $1 \leq n_0 \leq N-1$ - количество фермионов, занимающих связанное состояние $+\omega_0$. Вообще говоря, может возникнуть ситуация с неполным заполнением состояния $-\omega_0$ (дырочные возбуждения). Но мы будем рассматривать только случай, когда состояние $-\omega_0$ полностью занято. Условие квантования имеет вид /56/

$$\left(\frac{2}{\pi}\theta - \frac{n_0}{N}\right) \sin \theta = 0. \quad (2.15)$$

Таким образом,

$$\theta(n_0) = \frac{\pi(n_0)}{2(N)}, \quad (2.16)$$

и энергия "мешочно"-подобного возбуждения /56/

$$E(n_0) = \frac{2}{\pi} N m_\psi \sin \theta(n_0). \quad (2.17)$$

При $n_0/N \ll 1$ (2.17) приводится к виду

$$E(n_0) \approx n_0 m_\psi - \frac{n_0^3 m_\psi \pi^2}{24 N^2} + \dots, \quad (2.18)$$

т.е. в этом пределе возбуждение можно рассматривать как слабо связанное состояние n_0 фермионов с массой m_ψ . При заполнении уровня ω_0 , близком к N , $\theta(n_0 \rightarrow N) \rightarrow \pi/2$. Таким образом,

$$E(n_0) \leq \frac{2}{\pi} N m_\psi, \quad (2.19)$$

и $\omega_0(n_0 \rightarrow N) \rightarrow 0$. Возвращаясь к (2.12), нетрудно убедиться, что в этом пределе $\sigma(x)$ ведет себя как разведенная на бесконечность ($x_0 \rightarrow \infty$) кинк-антикинк-пара. Напомним, что энергия кинка в модели (2.1)

$$E_k = \frac{N}{\pi} m_\psi. \quad (2.20)$$

Существенным отличием "мешочно"-подобного возбуждения от кинка является зависимость ω_0 от числа заполнения n_0 : $\omega_0(n_0)$. При $n_0 = 0$ $\omega_0 = m_\psi$, т.е. возбуждение отсутствует, тогда как для возбуждения в виде кинка несущественно, занято состояние $\omega_0 = 0$ или нет. При сравнении с моделью $(CH)_x$ необходимо ограничиться случаем $N = 2$. Состояние с $n_0 = 1$ можно интерпретировать как присутствие добавочного неспаренного электрона в цепочке $(CH)_x$ с зарядом $(-e)$ и спином $1/2$. Поскольку имеется

связь с фоновым полем, естественно рассматривать это возбуждение как "полярон". При $n_0 = 2$ имеется бесконечно разведенная кинк-антикинк-пара.

При исследовании решений, зависящих от времени, удалось получить точное решение, подобное бйону в модели Синус - Гордон. Накладываются периодические граничные условия $\sigma(x, t+T) = \sigma(x, t)$. Если положить $g_{en} = 1$, то в единицах σ_0 решение имеет вид /56/

$$\sigma(x, t) = 1 + \xi f_2 + \eta f_4, \quad (2.21)$$

где $f_2 = D^{-1} \cos \Omega t$, $f_4 = D^{-1} = (\cosh kx + a \cos \Omega t + b)^{-1}$, t и x выражены в единицах $(g_{en} \sigma_0)^{-1}$. $k, \Omega, \xi, \eta, a, b$ - константы. Не будем подробно останавливаться на этом решении и его свойствах, поскольку, как отмечалось выше, только в статическом случае имеется полная аналогия модели (2.1) и континуальной модели $(CH)_x$. Динамические свойства моделей, по-видимому, совершенно различны.

Дело в том, что в модели $(CH)_x$ фоновое поле соответствует реальным колебаниям решетки, и, естественно, имеет свою динамику. В модели (2.2) поле σ является вспомогательным, нефизическим, вся динамика поля σ обусловлена динамикой фермионов. Математически, как упоминалось выше, это отражено отсутствием слагаемого σ_t^2 в лагранжиане модели (2.1). Этот факт не позволяет полностью идентифицировать модели и, соответственно, использовать ряд важных результатов, полученных в модели (2.1) (особенно в квантовом случае) для модели $(CH)_x$. Тем не менее, как будет видно из дальнейшего изложения, имеется ряд общих черт, свойственных обеим моделям, которые позволили перебросить "мост" между моделями РКП и получить новые количественные результаты.

§ 8. Модель ϕ^4 с фермионами

Данная модель описывается лагранжианом

$$\mathcal{L} = \sum_{p=1}^N \bar{\Psi}^p (i \not{\partial} - g \phi) \Psi^p + \frac{1}{2} (\partial_\mu \phi)^2 + \frac{1}{2} \mu^2 \phi^2 - \frac{\lambda}{4} \phi^4. \quad (2.22)$$

Константы g и λ имеют размерность $[эВ]$ и $[эВ^2]$ соответственно. Отметим, что в слагаемых для поля имеется член с производной по времени: $\frac{1}{2} \phi_t^2$. Лагранжиан (2.22) инвариантен относительно дискретного преобразования $\phi \rightarrow -\phi$, $\Psi \rightarrow \gamma_5 \Psi$. Как будет показано ниже, в основном состоянии симметрия спонтанно нарушена.

В /77/ приведен анализ связанных состояний в модели (2.22). Мы не имеем возможности остановиться на деталях полуклассического функ-

ционального метода /78/, используемого при нахождении спектра задачи (этот же метод использовался и при отыскании решений в модели (2.1) /56/). В общем случае при решении спектральной задачи необходим учет квантовых поправок, обусловленных как фермионами, так и бозонами (в модели (2.1) - только фермионами). Этот круг вопросов будет обсужден ниже подробно при анализе восстановления симметрии при T_c и N_c . В "квазиклассическом" приближении, когда $\phi(x,t)$ рассматривается как классическое поле, принимаются во внимание только поправки от фермионных занятых состояний. При этом рассматривают два случая /77/.

Первоначально можно исключить из рассмотрения эффекты "моря Ферми" и учесть дискретный уровень в электронном спектре ω_0 . В этом случае стационарные уравнения для $\phi(x)$ и $\psi_0(x)$, получаемые из (2.22), имеют вид

$$[\omega_0 \gamma_0 + i \gamma_1 \frac{d}{dx} - g \phi(x)] \psi_0(x) = 0, \quad (2.23a)$$

$$- \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + \lambda \phi(x) - \mu_0^2 \phi(x) = -g n_0 \bar{\psi}_0(x) \psi_0(x), \quad (2.23b)$$

где n_0 характеризует заполнение уровня ω_0 , причем предполагается, что $\int \bar{\psi}_0(x) \psi_0(x) dx = 1$. Индекс p , нумерующий число типов фермионов, в (2.23) опущен.

Решения системы (2.23) известны: кинки, "мелкие мешки" и "двойные мешки" - возбуждения "поляронного" типа.

а) Состояние с $\omega_0 = 0$, волновые функции которого даются формулами

$$\phi(x) = \frac{\mu_0}{\lambda} \tanh \frac{\mu_0 x}{\sqrt{2}}, \quad (2.24)$$

$$\psi_0(x) = A \left(\cosh \frac{\mu_0 x}{\sqrt{2}} \right)^{-\frac{g\sqrt{2}}{\lambda}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad (2.25)$$

A - нормировочный множитель. Очевидно, что $\phi(x)$ совпадает с кинком /56/.

Энергия кинка не зависит от n_0 и в квазиклассическом приближении имеет вид

$$E_k = \frac{2\sqrt{2}}{3} \frac{\mu_0^3}{\lambda}. \quad (2.26)$$

Зависимость $\phi(x)$ и $\rho_0(x) = \bar{\psi}_0(x) \psi_0(x)$ изображена на рис. 16.

б) Решения "поляронного" типа

$$\phi(x) = f - \frac{k_0^2}{g\omega_0} \operatorname{sech}[k_0(x+x_0)] \operatorname{sech}[k_0(x-x_0)], \quad (2.27a)$$

$$\psi_0(x,t) = \sqrt{\frac{k_0}{8}} e^{-i\omega_0 t} \begin{pmatrix} \operatorname{sech}[k_0(x+x_0)] + \operatorname{sech}[k_0(x-x_0)] \\ -\operatorname{sech}[k_0(x+x_0)] + \operatorname{sech}[k_0(x-x_0)] \end{pmatrix}, \quad (2.27b)$$

$$\omega_0 k_0 = n_0 g^2 / 8, \quad \omega_0^2 = g^2 f^2 - k_0^2, \quad \tanh k_0 x_0 = (g f - \omega_0) / k_0$$

и введен $f = \mu_0 / \sqrt{\lambda}$.

Определяя $\omega_0 = g f \cos \varphi$ и $k_0 = g f \sin \varphi$, приходим к связи

$$\sin 2\varphi(n_0) = n_0 / 4f^2 \quad (2.28)$$

Энергия связанного состояния, соответствующая решению $\psi_0(n_0)$, определяется посредством

$$E(\varphi(n_0)) = \frac{8}{3} g f^3 \left[\sin \varphi(n_0) + \frac{n_0}{4f^2} \cos \varphi(n_0) \right] \quad (2.29)$$

В случае $n_0 / 4f^2 > 1$ уравнение (2.28) не имеет решений. Интерес представляют два предела. При $n_0 / 4f^2 \ll 1$ имеется два решения

$$(k_0(n_0))_+ \approx g f - \frac{g n_0^2}{128 f^3} \quad \text{и} \quad (k_0(n_0))_- \approx \frac{g n_0}{8 f}$$

Рассматривая поведение $\phi(x)$, определяемое выражением (2.27a), естественно назвать решение, соответствующее $(k_0(n_0))_-$ - "мелкий мешок", а $(k_0(n_0))_+$ - "двойной мешок" (см. рис. 16, где изображена зависимость амплитуды $\phi(x)$ (сплошная линия, левая шкала) и электронной плотности $\bar{\psi}(x) \psi(x)$ (пунктирная линия, правая шкала) от X (в единицах $1/g$) при $f = 2$: а) кинк (при $\lambda = 2g^2$), б) "двойной мешок" ($n_0 = 1$).

Причем при $\varphi(n_0) < \pi/4$ имеет место стабильное решение "мелкий мешок", а при $\varphi(n_0) > \pi/4$ - нестабильное "двойной мешок". При

$n_0 / 4f^2 \rightarrow 1$ оба решения становятся эквивалентными. Таким образом, при фиксированном f существует максимальное значение n_0 , при котором существует решение (2.28), а при фиксированном n_0 - минимальное f . Необходимым условием стабильности состояния является $d^2 E / d\varphi^2 |_{\varphi(n_0)} > 0$. Из (2.29) нетрудно получить с учетом (2.28)

$$\frac{d^2 E}{d\varphi^2} |_{\varphi(n_0)} = 8 g f^3 \sin \varphi(n_0) \cos 2\varphi(n_0) \quad (2.30)$$

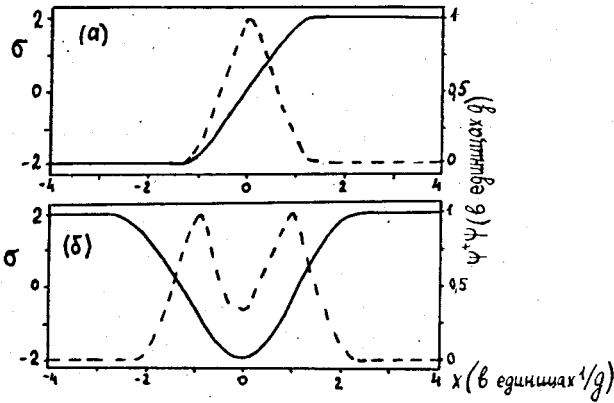


Рис. 16

Таким образом, стабильным может быть только решение с $0 \leq \varphi(n_0) < \pi/4$, и, следовательно, все "двойные мешки" нестабильны. При $n_0/4f^2 \ll 1$ энергия "двойного мешка"

$$E_{\text{дм}}(n_0) = \frac{8}{3}gf^3 + \frac{2n_0^2}{16f} + \dots$$

Учитывая, что энергия кинка $E_k = \frac{4}{3}gf^3$ (2.26), видим, что "двойной мешок" нестабилен относительно распада на солитон-антисолитонную пару. Вопрос о стабильности "мелкого мешка" более сложен. Анализ показал [77], что энергия "мелкого мешка" $E_{\text{мм}}(n_0) \approx n_0gf - \frac{gn_0^3}{384f^3} + \dots$ при $n_0/4f^2 \ll 1$ соответствует энергии n_0 невзаимодействующих фермионов и является минимальной. Однако в области $0,7 \leq n_0/4f^2 \leq 1$ $E_{\text{мм}}(n_0) > 2E_k$, так что становится возможным распад на кинк-антикиновую пару. Отметим, что при анализе решений модели (2.22) был сделан ряд упрощающих предположений: использовался предел слабой связи $\mu_0^2 \gg \lambda$, и постулировано равенство $\lambda = 2g^2$. При учете эффектов "моря Ферми" условие квантования (2.28) принимает вид

$$\frac{4f^2}{N} \sin 2\varphi(n_0) = \frac{n_0}{N} - \frac{2\varphi(n_0)}{\pi}, \quad (2.31)$$

а энергия связанного состояния

$$E(\varphi(n_0)) = \left(8gf^3 + \frac{2gfN}{\pi}\right) \sin \varphi(n_0) - \frac{16gf^3}{3} \sin^3 \varphi(n_0). \quad (2.32)$$

Отметим, что при $n_0 < N$ имеется только одно решение уравнения (2.31), соответствующее состоянию "мелкий мешок". Более сложная ситуация возникает при $n_0 = N$. Если $\alpha = 4f^2/N > 1/\pi$, то

имеют место оба решения. При $\alpha \rightarrow 1/\pi$ решение, описывающее "мелкий мешок" с $\varphi(n_0=N) = \varphi_1 < \pi/2$, подходит к решению "двойного мешка" с $\varphi(n_0=N) = \varphi_2 = \pi/2$. При $\alpha < 1/\pi$ остается только решение $\varphi(n_0=N) = \varphi_2$. Поскольку при этом $\omega_0 = 0$, то из (2.31) и (2.32)

$$E_{\text{дм}}(n_0=N) = \frac{8}{3}gf^3 + \frac{2Ngf}{\pi}, \quad (2.33)$$

что составляет точно удвоенную энергию кинка при учете эффектов моря Ферми [77]. В пределе $\omega_0 \rightarrow 0$ имеем $\chi_0 \rightarrow \infty$, и конфигурация "двойной мешок" точно соответствует состоянию невзаимодействующей кинк-антикиновой пары, т.е. не является новым связанным состоянием в теории. С другой стороны, состояние "мелкий мешок" и при учете эффектов "моря Ферми" остается стабильным относительно распада на кинк-антикиновую пару. В заключение отметим, что в пределе $\alpha \rightarrow 0$ условие квантования (2.31) и энергия связанных состояний (2.32) совпадают с соответствующими выражениями (2.28), (2.29) модели Гросса - Невье. При $0 < \alpha \leq 1/\pi$ аналогия остается, а при $\alpha > 1/\pi$ модель (2.22) содержит дополнительное состояние - $n_0 = N$ "мелкий мешок". В некотором смысле модель ϕ^4 с фермионами можно рассматривать как низэнергетическую эффективную теорию поля "более фундаментальной" модели Гросса - Невье.

§ 9. Заключительные замечания о моделях РКП и модели (СН)_x

Обсудим кратко качественные параллели между тремя моделями, рассмотренными в первой и второй главах. Прежде всего необходимо отметить, что статическая версия модели полиацетилена является аналогом модели Гросса - Невье. Эта аналогия установлена как на уровне статических уравнений, так и включая полный спектр решения задачи. Естественно, что все свойства солитонов, присущие модели (СН)_x, переносятся и на вариант модели (2.1) при $N = 2$. (В случае $N=1$ имеет место дробление заряда, локализованного на солитоне, об этом смотри ниже). Рассмотренная выше модель ϕ_F^4 по крайней мере на качественном уровне имеет аналогичные свойства. Этого можно было ожидать, поскольку в пределе $N \rightarrow \infty$ модели (2.1) и (2.22) формально эквивалентны [77]. Отметим ряд важных общих свойств, присущих трем моделям.

I. Спонтанное нарушение симметрии основного состояния. Изучению следствий этого обстоятельства будет посвящена вся следующая часть материала. Отметим лишь, что в модели ϕ_F^4 сам вид затравочного потенциала $P_0(\phi) = -\mu^2/2 \phi^2 + \frac{\lambda}{4} \phi^4$ приводит (при $g = 0$) к спонтанному нарушению симметрии. В моделях (СН)_x и ГН необходимо учесть динамические эффекты, обусловленные фермионами,

что приводит к эффективному потенциалу с членом $V(\sigma) \sim \sigma^2 \ln \sigma^2$. Таким образом, имеет место динамическое нарушение симметрии основного состояния. В результате спонтанного нарушения симметрии имеет место вырождение основного состояния (в нашем случае — двукратное вырождение).

2. Как следствие вырождения, все модели содержат возбуждения в виде топологических солитонов-кинков, связывающих вырожденные вакуумы. В присутствии топологических солитонов меняется электронный энергетический спектр — появляется дискретный уровень с нулевой энергией ("голдстоуновская мода"). Как следствие нетривиальной топологии, солитоны имеют необычные спин-зарядовые соотношения.

3. Наконец, все три модели содержат поляронное решение. Причем модель ϕ_F^+ допускает поляронное решение и без учета эффектов, обусловленных наличием валентных электронов (моря Ферми).

Таким образом, потенциал ϕ^4 как бы имитирует эффекты электронов валентной зоны. Другой важный момент — наличие градиентного члена $(\partial\phi/\partial x)^2$ в модели ϕ_F^+ , отсутствующего в моделях $(\text{CH})_x$ и GH . Этот член учитывает нелокальность /58/, которая в моделях $(\text{CH})_x$ и GH вносилась при учете фермионных петель.

Как видим, имеется ряд общих свойств; чрезвычайно интересных с точки зрения всех трех моделей. Ниже мы остановимся детально на двух из них. В третьей главе мы попытаемся максимально подробно исследовать следствия спонтанного нарушения симметрии в этих моделях при конечной температуре системы и при наличии асимметрии числа частиц и античастиц (электронов-дырок). В главе четвертой будет подробно рассмотрен вопрос дробления заряда, локализованного на солитоне.

□

ГЛАВА III

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МОДЕЛЯХ РКТП И $(\text{CH})_x$ ПРИ КОНЕЧНЫХ ПЛОТНОСТЯХ ФЕРМИОНОВ И ТЕМПЕРАТУРАХ

Исследование систем, у которых основное состояние обладает симметрией, отличной от симметрии гамильтониана, посвящено большое число работ. Системы с нарушенной симметрией реализуются как в физике конденсированного состояния (ФКС), так и в релятивистской квантовой теории поля (РКТП). Необходимо отметить, что в основе исследования спонтанного нарушения симметрии лежит ряд фундаментальных концепций, введенных в теорию многих взаимодействующих частиц Боголюбовым. Так, в работах /79а/ впервые была предложена и исследована модель с выделенным конденсатом $\sigma_0 \neq 0$. Причем наличие конденсата из парных квазимолекул с необходимостью приводит к вырождению состояния статистического равновесия /79б/. Фундаментальная концепция Боголюбова о "квазисредних", сформулированная в классической работе /79в/, имеет огромное значение в статистической механике при изучении сверхпроводимости /79г/, сверхтекучести, ферромагнетизма и т.д. Эти идеи позволили обобщить для задач статистической механики и РКТП при конечных температурах диаграммное представление теории возмущений, широко используемое в настоящей работе.

Общая схема исследования фазового перехода состоит в построении эффективного потенциала системы (т.е. потенциальной энергии с учетом всех квантовых поправок) при конечной температуре и фермионной плотности $P_{\text{эфф}}(\sigma, T, n)$. Анализ минимума $P_{\text{эфф}}$ позволит получить критические значения T_c , n_c , при которых симметрия восстанавливается. При построении $P_{\text{эфф}}(\sigma, T, n)$ необходимо просуммировать диаграммы Фейнмана с учетом замены: нулевая компонента импульса $k_0 \rightarrow i\omega_n$, соответственно, $\int \frac{dk_0}{2\pi} \rightarrow iT \sum_{n=-\infty}^{\infty}$, где $\omega_n = (2n+1)\pi T - i\delta$ ($\omega_n = 2n\pi T$) — так называемые мацубаровские частоты в случае фермионов (бозонов).

Необходимо сразу же уточнить, что мы понимаем под химическим потенциалом α . Происхождение α связано с наличием абсолютно сохраняющейся величины, например, барионного числа /80,86,87/. Пусть $\hat{N} = \int dx: \bar{\Psi} \gamma_0 \Psi :$, т.е. представляет собой разность общего числа фермионов минус общее число антифермионов в системе и является сохраняющейся величиной. Тогда учет этого факта приведет к дополни-

тельному члену в гамильтониане $-\alpha \hat{N}$. Математически это и сводится к появлению α в ω_n (см. выше).

§ 10. Модель Гросса - Невье (ГН)

а) При построении эффективного потенциала модели (2.1) ограничимся учетом однопетлевых диаграмм и будем использовать приближение среднего поля $\bar{\sigma} \neq \bar{\sigma}(x)$, т.е. предполагается трансляционная инвариантность вакуума. Осуществляя суммирование диаграмм (рис.17),

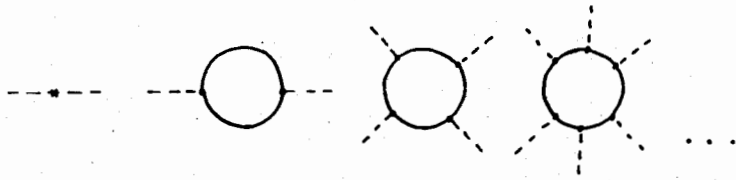


Рис.17

имеем

$$P_{\text{эфф}}(\sigma) = \frac{1}{2} \sigma^2 - iN \sum_{n=1}^{\infty} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \frac{1}{n} \left(\frac{\lambda}{N} \frac{\sigma^2}{k^2} \right)^n, \quad (3.1)$$

где N - число типов фермионов, $\lambda = Ng_{\text{GN}}^2$, $k^2 = k_0^2 - k^2$.

С учетом вышеуказанной замены

$$P_{\text{эфф}}(\sigma, T, \alpha) = \frac{1}{2} \sigma^2 - 2NT \int \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \ln \frac{k^2 + \omega_n^2 + \frac{1}{N} \sigma^2}{k^2 + \omega_n^2}, \quad (3.2)$$

где использована сумма $\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} = -\ln|1-x|$.

Вычислим сумму в (3.2). Пусть $\sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln(\omega_n^2 + a^2) = \Sigma$.

Дифференцируя обе части по a , получаем

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial a} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{2a}{\omega_n^2 + a^2} = \frac{1}{T} \frac{\text{sh} \frac{a}{T}}{\text{ch} \frac{a}{T} + \text{ch} \frac{a}{T}}, \quad (3.3)$$

где учтен явный вид ω_n . Из (3.3)

$$\Sigma = -\bar{\alpha} + \ln[1 + \exp(\frac{a-a}{T})][1 + \exp(\frac{a+a}{T})] + C, \quad (3.4)$$

где $\bar{\alpha} = \alpha/T$, C - произвольная константа, не зависящая от $a, (k, T)$.

Теперь (3.2) принимает вид

$$P_{\text{эфф}}(\sigma, T, \alpha) = \frac{1}{2} \sigma^2 - 2NT \int \frac{dk}{2\pi} \ln \frac{[1 + \exp(\frac{\alpha-k}{T})][1 + \exp(\frac{\alpha+k}{T})]}{[1 + \exp(\frac{\alpha-k}{T})][1 + \exp(\frac{\alpha+k}{T})]}, \quad (3.5)$$

где $\varepsilon = \sqrt{k^2 + \frac{1}{N} \sigma^2}$.

Первоначально исследуем (3.5) при $\alpha=0$.

В этом случае

$$P_{\text{эфф}}(\sigma, T) = \frac{1}{2} \sigma^2 - 2N \int \frac{dk}{2\pi} (\varepsilon - k) - 4NT \int \frac{dk}{2\pi} \ln \frac{1 + e^{-\varepsilon/T}}{1 + e^{-k/T}}, \quad (3.6)$$

где введен импульс обрезания Λ . Учитывая, что последний член в (3.6) конечен, достаточно перенормировать эффективный потенциал при $T=0$. Используем для этого условие Коулмена - Вайнберга

$$\frac{\partial^2 P_{\text{эфф}}(\sigma)}{\partial \sigma^2} \Big|_{\sigma=\sigma_0} = 1, \quad (3.7)$$

где σ_0 - классическое поле.

Для (3.6) оно приводит к соотношению

$$\ln \frac{\Lambda + \sqrt{\Lambda^2 + (g_{\text{GN}} \sigma_0)^2}}{g_{\text{GN}} \sigma_0} = \frac{\Lambda}{\sqrt{\Lambda^2 + (g_{\text{GN}} \sigma_0)^2}}. \quad (3.8)$$

При $\Lambda \gg g_{\text{GN}} \sigma_0$ имеем связь $2\Lambda = g_{\text{GN}} \sigma_0 e$. Таким образом, в результате перенормировки массы поля σ в эффективном потенциале исчезает зависимость от параметра обрезания. Теперь

$$P_{\text{эфф}}(\sigma, \sigma_0) = \frac{1}{2} \sigma^2 + \frac{1}{4\pi} \sigma^2 [\ln(\frac{\sigma}{\sigma_0})^2 - 3]. \quad (3.9)$$

Результат (3.9) весьма примечателен. Прежде всего отметим, что учет однопетлевых поправок привел к появлению дополнительного члена $\sigma^2 \ln \sigma^2$ в потенциальной энергии системы. При малых σ этот член дает отрицательную поправку, которая доминирует. При больших σ потенциальная энергия положительна и возрастает. Таким образом, теория является стабильной. В точке $\sigma=0$ имеет место локальный максимум. Условие экстремума имеет вид

$$\frac{\partial P_{\text{эфф}}(\sigma, \sigma_0, T)}{\partial \sigma} \Big|_{\sigma=\sigma_n} = \sigma_n \left\{ 1 + \frac{1}{2\pi} [\ln(\frac{\sigma_n}{\sigma_0})^2 - 2] + \frac{2\Lambda}{\pi} \int \frac{dk}{\varepsilon} (e^{\varepsilon/T} - 1)^{-1} \right\}. \quad (3.10)$$

При $T=0$ минимум (3.6) осуществляется в точке

$$\sigma_m = \pm \sigma_0 \exp(1 - \gamma/\lambda) \quad (3.11)$$

Таким образом, фермионы модели ГН приобретают массу M_F в результате динамического нарушения симметрии: $M_F = g_{cN} \sigma_m$. При переходе к одному из минимумов $P_{\text{эфф}}$, например, $+\sigma_m$, нарушается симметрия исходного лагранжиана (2.2): $\sigma \rightarrow -\sigma$, $\psi \rightarrow \gamma_5 \psi$. В фермионном спектре возникает массовая щель M_F . Вид потенциальной энергии при $T = \alpha = 0$ приведен на рис. 18.

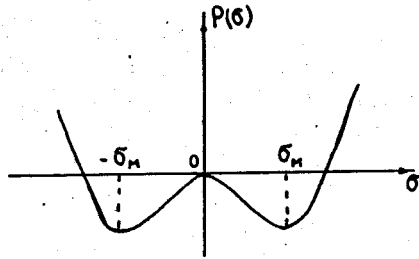


Рис. 18

Важно отметить, что, в отличие от четырехмерной модели Намбу и Иона-Лазинио, ненулевое вакуумное среднее модели ГН осуществляется при произвольной, отличной от нуля, величине константы связи g_{cN} . Поле σ является составным двухфермионным объектом $\bar{\psi}\psi$ и имеет формальный характер. Это также отличительная черта двумерия. В модели /75/ поле σ имеет физическую природу, поскольку удается получить для него и кинетический член.

б) Учет в (3.10) температурный эффект. В приближении $g_{cN}\sigma \ll T$ интеграл допускает аналитическую оценку /81/:

$$\int_0^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{k^2 + (g_{cN}\sigma)^2}} \left[\exp\left(\frac{\sqrt{k^2 + (g_{cN}\sigma)^2}}{T}\right) + 1 \right]^{-1} = -\frac{1}{4} \ln\left(\frac{g_{cN}\sigma}{T}\right) - \frac{\gamma_E}{2} + O\left[\left(\frac{g_{cN}\sigma}{T}\right)^2\right], \quad (3.12)$$

где $\gamma_E = 0,577$ - постоянная Эйлера, и (3.10) принимает вид

$$\frac{\partial P_{\text{эфф}}(\sigma, \sigma_0, T)}{\partial \sigma} = \sigma \left[1 - \frac{1}{\pi} (1 + \gamma_E) + \frac{1}{2\pi} \ln \frac{N}{\lambda} \left(\frac{\pi T}{\sigma_0}\right)^2 + O\left[\left(\frac{g_{cN}\sigma}{T}\right)^2\right] \right] = 0 \quad (3.13)$$

Из (3.13) получаем, что при $T > T_c$ имеет место минимум в $\sigma = 0$, а при $T < T_c$ - максимум, где

$$T_c = \frac{1}{\pi} g_{cN} \sigma_0 \exp\left(1 - \frac{\pi}{\lambda} + \gamma_E\right) = \frac{\lambda M_F}{\pi}, \quad (3.14)$$

$\gamma = \exp \gamma_E$. В /86/ отмечалась аналогия (3.14) с оценкой критической температуры сверхпроводящего перехода, причем вместо сверхпроводящей щели в (3.14) стоит масса фермиона. В дальнейшем будет показано, что более прямо (3.14) связана с температурой структурного пайерлсовского перехода, имеющего место в модели полмацетилена. Необходимо отметить, что при выводе (3.14) было использовано приближение среднего поля, справедливое, вообще говоря, при $N \rightarrow \infty$. Тем не менее, ряд результатов, полученных в модели ГН, остается оправданным и для конечных N /56/. Это необходимо учитывать при сравнении результатов моделей ГН и $(\text{CH})_x$, так как аналогия между ними имеет место при $N = 2$. С другой стороны, в /86/ показано, что за рамками приближения среднего поля, т.е. считая $\sigma = \sigma(x)$, при конечной температуре в системе будут существовать кинки в основном состоянии. Однако плотность кинков при малых T мала, и приближение среднего поля может оказаться вполне приемлемым /86/.

в) Перейдем к анализу (3.5) при конечных значениях α . В общем случае отыскание минимума $P_{\text{эфф}}(\sigma, T, \alpha)$ является весьма трудной задачей, и мы ограничимся исследованием приближения $\alpha \gg T$.

При этом (3.5) принимает вид

$$P_{\text{эфф}}(\sigma, 0, \alpha) = \frac{1}{2} \sigma^2 - \frac{N}{\pi} \left[\int_0^{\sqrt{\alpha^2 - (g_{cN}\sigma)^2}} dk (d - \varepsilon) + \int_0^{\infty} dk (\varepsilon - k) - \frac{d^2}{2} \right], \quad (3.15)$$

где первый член в квадратных скобках тождественно обращается в нуль при $\alpha < g_{cN}\sigma$. С учетом перенормировки перепишем (3.15) в виде

$$P_{\text{эфф}}(\sigma, \sigma_0, \alpha) = \frac{1}{2} \sigma^2 + \frac{1}{4\pi} \sigma^2 \left[\ln \left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right)^2 - 3 \right] - \frac{N}{\pi} \left[\int_0^{\sqrt{\alpha^2 - (g_{cN}\sigma)^2}} dk (d - \varepsilon) - \frac{d^2}{2} \right]. \quad (3.16)$$

Удобно рассмотреть два случая

1. $\alpha < g_{cN}\sigma$. Имеем

$$P_{\text{эфф}}(\sigma, \sigma_0, \alpha < g_{cN}\sigma) = \frac{1}{2} \sigma^2 + \frac{1}{4\pi} \sigma^2 \left[\ln \left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right)^2 - 3 \right] + \frac{Nd^2}{2\pi} \quad (3.17)$$

Условие экстремума (3.17)

$$\frac{\partial P_{\text{эппр}}}{\partial \sigma} = \sigma \left[1 - \frac{\lambda}{\pi} + \frac{\lambda}{\pi} \ln \frac{\sigma}{\sigma_0} \right] = 0 \quad (3.18)$$

Необходимо отметить, что (3.18) не содержит зависимости от α . Нетрудно убедиться, что в $\sigma = 0$ имеет место локальный максимум, а в $\sigma_M = \sigma_0 \exp(1 - \pi/\lambda)$ - минимум (3.17).

2. Более интересен случай $\alpha > g_{\text{сн}} \sigma$. При этом (3.16) можно записать в виде

$$P_{\text{эппр}}(\sigma, \sigma_0, \alpha > g_{\text{сн}} \sigma) = \frac{1}{2} \sigma^2 + \frac{\lambda}{4\pi} \sigma^2 \left[\ln \left(\frac{\sigma}{\sigma_0} \right) - 3 \right] + \frac{N}{\pi} \left[\frac{\alpha^2}{2} - \frac{\alpha}{2} \sqrt{\alpha^2 - (g_{\text{сн}} \sigma)^2} + \frac{(g_{\text{сн}} \sigma)^2}{2} \ln \frac{\alpha + \sqrt{\alpha^2 - (g_{\text{сн}} \sigma)^2}}{g_{\text{сн}} \sigma} \right] \quad (3.19)$$

Условие экстремума (3.19)

$$\frac{\partial P_{\text{эппр}}}{\partial \sigma} = \sigma \ln \frac{\alpha + \sqrt{\alpha^2 - (g_{\text{сн}} \sigma)^2}}{g_{\text{сн}} \sigma} = 0 \quad (3.20)$$

В $\sigma = 0$ имеет место максимум $P_{\text{эппр}}$ при $\alpha < g_{\text{сн}} \sigma / 2$ и минимум при $\alpha > g_{\text{сн}} \sigma / 2$. Кроме того, имеется решение (3.20) в виде

$$\sigma^* = \sigma_M \sqrt{\frac{2\alpha}{g_{\text{сн}} \sigma_M} - 1} \quad (3.21)$$

При $g_{\text{сн}} \sigma_M / 2 < \alpha < g_{\text{сн}} \sigma_M$ имеет место локальный максимум $P_{\text{эппр}}$, при $\alpha > g_{\text{сн}} \sigma_M$ - минимум.

Качественный вид решений приведен на рис. 19.

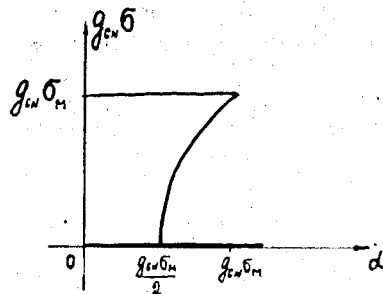


Рис. 19

Для анализа фазового перехода необходимо выписать значение эффективного потенциала в точках экстремума

$$\begin{aligned} P_{\text{эппр}}(0, \alpha) &= 0, \\ P_{\text{эппр}}(\sigma_M, \alpha) &= \frac{N}{\pi} \left[\frac{\alpha^2}{2} - \left(\frac{g_{\text{сн}} \sigma_M}{2} \right)^2 \right], \\ P_{\text{эппр}}(\sigma^*, \alpha) &= \frac{N}{\pi} (\alpha - g_{\text{сн}} \sigma^*)^2 \end{aligned} \quad (3.22)$$

Таким образом, $\alpha_c = g_{\text{сн}} \sigma_M / \sqrt{2} = M_F / \sqrt{2}$. Отметим, что этот результат отличается от 78%, 88%, где использовался предел $\alpha \gg M_F$. При $\alpha < \alpha_c$ имеет место двукратное вырождение основного состояния, а при $\alpha \geq \alpha_c$ вырождение снимается. Массовая щель в фермионном спектре исчезает, и восстанавливается симметрия исходного лагранжиана ($\sigma \rightarrow -\sigma, \psi \rightarrow \gamma_5 \psi$). Учитывая, что плотность частиц в системе определяется посредством

$$n = \frac{N}{\pi} \int_0^\infty dk \left[\exp\left(\frac{\epsilon - \alpha}{T}\right) + 1 \right]^{-1}, \quad (3.23)$$

при $T \rightarrow 0$ для безмассовых частиц получаем связь

$$n = \frac{N\alpha}{\pi}, \quad (3.24)$$

где N по-прежнему обозначает число типов фермионов. Таким образом,

$$n_c = \frac{NM_F}{\pi\sqrt{2}}. \quad (3.25)$$

С точки зрения модели ГН это чисто "экзотический" результат, показывающий, что и в двумерных моделях может реализовываться красивая идея восстановления нарушенной симметрии с ростом температуры и (или) плотности фермионов. Однако, как мы увидим в дальнейшем, в квазидвумерной модели полиацетилена, являющейся аналогом модели ГН при $N = 2$, эти результаты принимают вполне реальный смысл и соответствуют вполне реальной физической ситуации. Не исключено, что "подарок" природы - транс-полиацетилен - поможет понять и подтвердить наличие механизма восстановления симметрии, имеющего важнейшие следствия в космологии, астрофизике, квантовой хромодинамике и других областях физики.

Перейдем к изучению фазового перехода с восстановлением симметрии в модели Φ_F^4 .

§ II. Модель ϕ^4 с фермионами (ϕ_F^4)

В модели ϕ_F^4 имеется физическое скалярное поле с самодействием. Следовательно, при построении эффективного потенциала системы необходим учет квантовых поправок, обусловленных также и флуктуациями бозе-поля. При этом будем использовать приближение слабой связи $\lambda \sim g^2 \ll \mu^4$. Это позволит ограничиться однопетлевым приближением в эффективном потенциале.

Прежде всего необходимо отметить, что уже без учета квантовых поправок модель ϕ_F^4 , в отличие от модели ГН, имеет двукратно вырожденное основное состояние при $\mu^2 > 0$ (рис.18) с точками минимума $\phi_0 = \pm \mu_0 / \sqrt{\lambda}$. Потенциальная энергия системы в классическом случае

$$P_0(\phi) = -\frac{\mu_0^2}{2} \phi^2 + \frac{\lambda}{4} \phi^4 \quad (3.26)$$

В дальнейших расчетах мы будем предполагать $N = 2$. Именно этот случай представляет интерес для сравнения с моделью полиацетилена. Обобщение на произвольное N тривиально (при вычислении фермионных петель вместо множителя 2 появится множитель N). Очевидно, что учет квантовых поправок к (3.26) приведет к расходимости в эффективном потенциале, которая в случае двух измерений будет логарифмической. Как и в модели ГН, можно устранить эти расходимые члены, перенормируя массу поля ϕ . В случае конечной температуры и химического потенциала эффективный потенциал можно записать в виде /80,89/

$$P_{эфф}(\phi) = P_0(\phi) + \frac{1}{2} Q(\tau, d) \phi^2 \quad (3.27)$$

что соответствует введению дополнительного члена в лагранжиан $\delta \mathcal{L}' = \frac{1}{2} Q(\tau, d) \phi^2$, причем $Q(\tau, d)$ имеет логарифмическую расходимость, и член $\delta \mathcal{L}'$ выступает в качестве контрчлена.

Определим поля $\phi' = \phi - \rho$, где ϕ' есть отклонение поля ϕ от положения минимума

$$\frac{\partial P_{эфф}(\phi)}{\partial \phi} \Big|_{\phi=\rho} = 0 \quad (3.28)$$

С учетом сдвига в исходном лагранжиане (2.22) единственными однопетлевыми диаграммами, содержащими логарифмическую расходимость, являются "головастик" и собственная энергия бозона (см. рис.20).

Контрчлен $\delta \mathcal{L}'$ после сдвига принимает вид

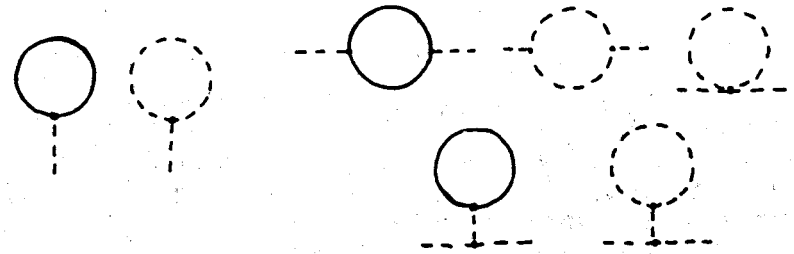


Рис.20

$$\delta \mathcal{L}' = \frac{1}{2} Q(\tau, d) \phi'^2 + Q(\tau, d) \rho \phi' + \frac{1}{2} Q(\tau, d) \rho^2 \quad (3.29)$$

Мы можем определить $Q(\tau, d)$, требуя, чтобы расходимости "головастика" и собственной энергии бозона сокращались контрчленами в (3.29). С учетом конечной температуры и химического потенциала вклад, обусловленный головастиками (рис.20), имеет вид

$$\Gamma = -i(2\pi)^d [3\lambda]_B(\tau, d) - 2g^2 I_F(\tau, d)] \rho \quad (3.30)$$

где

$$I_B(\tau, d) = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int dk [k^2 + m_B^2(\tau, d) + \omega_{nB}^2]^{-1} \quad (3.31)$$

$$I_F(\tau, d) = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int dk [k^2 + m_F^2(\tau, d) + \omega_{nF}^2]^{-1}$$

и $\omega_{nB} = 2n\pi T$, $\omega_{nF} = (2n+1)\pi T - id$ — маубаровские частоты. Осуществляя при помощи (3.3) суммирование в (3.31), приходим к

$$I_B(\tau, d) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\omega_B} \coth \frac{\omega_B}{2T} \quad (3.32a)$$

$$I_F(\tau, d) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\omega_F} \frac{\hbar \frac{\omega_F}{T}}{\ch \frac{\omega_F}{T} + \ch \frac{d}{T}} \quad (3.32b)$$

$$c \quad \omega_B = \sqrt{k^2 + m_B^2(\tau, d)}, \quad \omega_F = \sqrt{k^2 + m_F^2(\tau, d)}$$

Вклад от второго члена в $\delta L'$ (3.29) имеет вид
 $\delta T = i(2\pi)^2 Q(T, \alpha) \rho$. Таким образом, выбираем

$$Q(T, \alpha) = 3\lambda I_B(T, \alpha) - 2g^2 I_F(T, \alpha). \quad (3.33)$$

Нетрудно убедиться (см. /89/), что при таком выборе $Q(T, \alpha)$ контрчлен в $\delta L'$ полностью сокращает расходимость в собственной энергии бозона. Отметим зависимость массы бозонного и фермионного полей от температуры и химического потенциала. Теперь эффективный потенциал (3.27) определен, но требуется устранить логарифмическую расходимость. Как уже отмечалось, это можно осуществить путем перенормировки масс бозонного поля. А именно, вычтем в (3.27) член $\frac{1}{2} Q(0) \phi^2$, что соответствует изменению массы поля ϕ , т.е.

$$\mu_0^2 \rightarrow \mu^2 = \mu_0^2 + Q(0) = \mu_0^2 + 3\lambda I_B(0) - 2g^2 I_F(0).$$

После этой процедуры эффективный потенциал становится конечным и имеет вид

$$P_{\text{эфф}}(\phi) = P_{\text{норм}}(\phi) + \frac{1}{2} Q^R(T, \alpha) \phi^2, \quad (3.34)$$

а $P_{\text{норм}}(\phi)$ совпадает с учетом замены $\mu_0 \rightarrow \mu$ с $P_0(\phi)$,

$$Q^R(T, \alpha) = 3\lambda I_B^R(T, \alpha) - 2g^2 I_F^R(T, \alpha),$$

где

$$I_B^R(T, \alpha) = I_B(T, \alpha) - I_B(0) = \frac{1}{2\pi} \ln \frac{m_B(0)}{m_B(T, \alpha)} + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{dk}{\omega_b} \left(e^{\frac{\omega_b}{T}} - 1 \right)^{-1}, \quad (3.35)$$

$$I_F^R(T, \alpha) = I_F(T, \alpha) - I_F(0) = \frac{1}{2\pi} \ln \frac{m_F(0)}{m_F(T, \alpha)} - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dk}{\omega_f} F\left(\frac{\omega_f}{T}, \frac{\alpha}{T}\right), \quad (3.36)$$

причем

$$F\left(\frac{\omega_f}{T}, \frac{\alpha}{T}\right) = \left[\exp\left(\frac{\omega_f - \alpha}{T}\right) + 1 \right]^{-1} + \left[\exp\left(\frac{\omega_f + \alpha}{T}\right) + 1 \right]^{-1}.$$

Условие экстремума эффективного потенциала принимает вид

$$\frac{\partial P_{\text{эфф}}}{\partial \phi} \Big|_{\phi=\rho} = \rho \left[\lambda \rho^2 - \mu^2 + Q^R(T, \alpha | \rho) \right] = 0. \quad (3.37)$$

Отметим, что в $Q^R(T, \alpha | \rho)$ входят массы полей σ и ψ . С другой

стороны, m_b и m_f сами определяются через $Q^R(T, \alpha | \rho)$:

$$m_b^2(T, \alpha) = \frac{\partial^2 P_{\text{эфф}}(\phi)}{\partial \phi^2} \Big|_{\phi=\rho} = -\mu^2 + 3\lambda \rho^2 + Q^R(T, \alpha | \rho) \quad (3.38)$$

и $m_f = g\rho$.

Прежде всего отметим, что (3.37) имеет тривиальное решение $\rho = 0$. При этом фермионы безмассовые $m_f = 0$, а масса бозонного поля определяется из уравнения

$$m_b^2(T, \alpha) = -\mu^2 + Q^R(T, \alpha | 0) \quad (3.39)$$

При $T = \alpha = 0$ имеем $Q^R(0) \equiv 0$, и поле ϕ имеет отрицательную массу, что сигнализирует о спонтанном нарушении симметрии в системе. Для поиска нетривиальных решений удобно переписать (3.37), с учетом (3.38), в виде

$$m_b^2(T, \alpha) - 2\mu^2 + 2Q^R(T, \alpha | \rho) = 0. \quad (3.40)$$

Теперь при $T = \alpha = 0$ имеется решение $m_b^2(0) = 2\mu^2$, т.е. бозоны приобретают физическую массу. Согласно (3.38), при этом $\rho(0) = \mu/\sqrt{\lambda}$, и фермионы становятся массивными $m_f(0) = g\mu/\sqrt{\lambda}$.

В общем случае анализ уравнения (3.40) провести не удастся. Мы ограничимся некоторыми приближениями. Первоначально рассмотрим только температурные эффекты, положив $\alpha = 0$.

а) В приближении $m_b(T), m_f(T) \ll T$ интегралы в (3.35), (3.36) допускают аналитическую оценку /81/ так, что

$$Q^R(T) = 3\lambda \left\{ \frac{1}{2\pi} \ln \frac{m_b(0)}{4\pi T} + \frac{T}{2m_b(T)} + \frac{1}{2\pi} \delta_E + O\left[\left(\frac{m_b(T)}{T}\right)^2\right] \right\} - 2g^2 \left\{ \frac{1}{2\pi} \ln \frac{m_f(0)}{\pi T} + \frac{1}{2\pi} \delta_E + O\left[\left(\frac{m_f(T)}{T}\right)^2\right] \right\}$$

При этом уравнение (3.40) принимает вид

$$m_b^3(T) - \rho m_b(T) + q = 0 \quad (3.41)$$

с

$$\rho = 2\mu^2 - \frac{3\lambda}{\pi} \ln \frac{m_b(0)}{4\pi T} - \frac{3\lambda}{\pi} \delta_E + \frac{2g^2}{\pi} \ln \frac{m_f(0)}{\pi T} + \frac{2g^2}{\pi} \delta_E, \quad q = 3\lambda T.$$

Анализ кубического уравнения (3.41) приводит к значению критической температуры

$$T_c = \frac{4\sqrt{2}M^3}{9\sqrt{3}\lambda} \left[1 - \frac{3}{2} B(T=T_c) \right], \quad (3.42)$$

где

$$B(T=T_c) = \frac{3\lambda}{2\pi\mu^2} \left[\ln \frac{9\sqrt{3}\lambda}{16\pi\mu^2} + \delta\epsilon \right] - \frac{g^2}{\mu^2} \left[\ln \frac{9\sqrt{3}\lambda m_F(0)}{4\sqrt{2}\pi\mu^3} + \delta\epsilon \right]$$

определяет малую поправку, поскольку $\lambda \sim g^2 \ll \mu^2$. При $T < T_c$ основное состояние системы вырождено $\rho \neq 0$, а при $T \geq T_c$ остается только тривиальное решение $\rho = 0$. Отметим, что при $\alpha = 0$ вклад, обусловленный учетом квантовых поправок фермионного поля, существенно подавлен. Влияние квантовых флуктуаций бозонного поля на температурный фазовый переход является решающим.

Несложно определить значение параметра порядка ρ при стремлении к критической температуре $\rho(T \rightarrow T_c^-) = 0,57\rho(0)$. Следовательно, $m_F(T \rightarrow T_c^-) = 0,57m_F(0)$.

Таким образом, параметр порядка в точке $T = T_c$ испытывает скачок. Соответственно,

$$m_B^{\pm}(T \rightarrow T_c^-) = 0,33m_B^{\pm}(0), \quad m_B^{\pm}(T \rightarrow T_c^+) = 0,1m_B^{\pm}(0),$$

т.е. масса бозонного поля также имеет разрыв в точке $T = T_c$. При этом в области $T \geq T_c$ m_B не обращается в нуль.

Мы вернемся к обсуждению этих результатов при анализе модели полиацетилена.

б) Рассмотрим случай $\alpha \neq 0$. Будем использовать приближение $\alpha \gg T$ и $T \gg m_F(T, \alpha)$. При этом в подынтегральном выражении (3.36) можно использовать разложение по малому параметру $\beta = \frac{m_F(T, \alpha)}{T}$:

$$\int_0^{\infty} \frac{dt}{[\exp(\beta \cosh t - \bar{\alpha}) + 1]} \approx e^{\bar{\alpha}} \int_0^{\infty} \frac{dt}{1 + e^{\bar{\alpha} + \beta \cosh t}} = \frac{e^{\bar{\alpha}}}{\sqrt{(1+e^{\bar{\alpha}})^2 - \bar{\alpha}^2}} \ln \left| \frac{1 + e^{\bar{\alpha} + \beta + \sqrt{(1+e^{\bar{\alpha}})^2 - \beta^2}}}{1 + e^{\bar{\alpha} + \beta - \sqrt{(1+e^{\bar{\alpha}})^2 - \beta^2}}} \right|$$

$$= \bar{\alpha} - \ln \beta,$$

где $\bar{\alpha} = \alpha/T$. Таким образом,

$$Q^R(T, \alpha) = 3\lambda \left[\frac{1}{2\pi} \ln \frac{m_B(0)}{4\pi T} + \frac{T}{2m_B(T, \alpha)} + \frac{1}{2\pi} \delta\epsilon \right] - 2g^2 \left[\frac{1}{2\pi} \ln \frac{m_F(0)}{T} - \frac{\bar{\alpha}}{2\pi} \right].$$

Ограничиваясь основным вкладом, приходим к уравнению на $m_B(T, \alpha)$:

$$m_B^3(T, \alpha) - \left(2\mu^2 - g^2 \frac{n}{T} \right) m_B(T, \alpha) + 3\lambda T = 0, \quad (3.43)$$

где вновь учтена связь плотности фермионов n с химическим потенциалом (3.24) $n = 2\alpha/\pi$.

Стандартный анализ уравнения (3.43) приводит к критическому значению плотности

$$n_c = \frac{2\mu^2}{g^2} T - \frac{3\left(\frac{3\lambda}{2}\right)^{2/3}}{g^2} T^{5/3}. \quad (3.44)$$

Следует отметить, что в (3.44) первый член обусловлен вкладом от фермионных петель, а второй - вкладом от бозонных петель. При $\lambda \sim g^2 \ll \mu^2$ вклад, обусловленный фермионными петлями, решающий. При фиксированной температуре и $n \geq n_c$ уравнение (3.37) имеет единственное решение $\rho = 0$. Примечательно, что в критической точке $n_c = 2\mu^2 T_c / g^2$ (с учетом малости параметров), как $\rho(T_c, n_c)$, так и $m_B(T_c, n_c)$ обращаются в нуль.

В заключение исследования фазового перехода в модели ϕ_F^4 выделим предел $T \rightarrow 0$. Нетрудно убедиться, что в этом случае

$$I_F^R(0, \alpha) \approx \frac{1}{2\pi} \ln \frac{m_F(0)}{2\alpha}, \quad \text{а} \quad I_B^R(0, \alpha) \rightarrow 0. \quad \text{Таким образом;}$$

(3.37) принимает вид $\lambda \rho^2 = \mu^2 - \frac{g^2}{\pi} \ln(2\alpha/m_F(0))$ и

$$n_c = \frac{m_F(0)}{\pi} \exp(\pi\mu^2/g^2). \quad (3.45)$$

Отметим, что все полученные результаты справедливы только в низшем порядке теории возмущений. В критической области необходим учет высших поправок. Есть основания полагать [82], что наши результаты справедливы везде, кроме малой области вблизи критической температуры.

Прежде чем переходить к изучению структурного фазового перехода в полиацетилена, целесообразно сделать ряд замечаний. Мы сознательно достаточно подробно привели анализ фазового перехода в моделях РКП на основе теоретико-полевой техники. Дело в том, что техника температурных функций Грина применительно к диаграммным вычислениям Фейнмана позволяет получить ряд интересных результатов с точки зрения ФКС и уже находит достаточно широкое применение [90, 91]. Так, в [91] на основе этой техники построена квантовая статистическая механика протяженных объектов (солитонов) в рамках моделей Синус-Гордон, ϕ^4 и т.п.

Общая схема достаточно проста. Эффективный потенциал, который несложно получить в однопетлевом приближении, при конечной температуре является ни чем иным, как термодинамическим потенциалом системы /92/. В отсутствие солитона рассматриваются малые отклонения от положения минимума $\phi \rightarrow \phi = \phi' + \rho$, и, например, для модели ϕ^4 получают термодинамический потенциал Ω_0 , аналогичный (3.34) при $q = 0$. Затем рассматривается кинковое решение (2.9) и вводится $\phi = \phi_k + \phi'$, где ϕ' описывает отклонение поля ϕ от кинкового вакуума. Повторяя процедуру получения Ω_0 , получают Ω' - термодинамический потенциал для однокинкового сектора. Тогда термодинамическая функция для одного кинка $\Omega_k = \Omega' - \Omega_0$. Реализация этой программы в рамках модели ϕ^4 /91/ приводит к значению энергии покоящегося кинка

$$E_k = \Omega_k - T \frac{d\Omega_k}{dT} = \frac{2\sqrt{2}\mu^3}{3\lambda} - \left(\frac{3}{2\pi} - \frac{1}{4\sqrt{3}}\right)\sqrt{2}\mu + \frac{\sqrt{6}}{2}\mu N\left(\frac{\sqrt{6}}{2}\mu\right) - 3\sqrt{2}\mu f\left(\frac{\sqrt{2}\mu}{T}\right), \quad (3.46)$$

где $N(\omega) = (e^{\frac{\omega}{T}} - 1)^{-1}$, $f\left(\frac{\sqrt{2}\mu}{T}\right) = \frac{2\mu^2}{\pi} \int dk \frac{1}{\omega_k[(2k)^2 + 2\mu^2]} N(\omega_k)$,

$\omega_k = \sqrt{k^2 + 2\mu^2}$. Таким образом, при $T=0$

$$E_k^0 = \frac{2\sqrt{2}\mu^3}{3\lambda} - \left(\frac{3}{2\pi} - \frac{1}{4\sqrt{3}}\right)\sqrt{2}\mu, \quad (3.47)$$

а при $T \gg \mu$

$$E_k = \frac{2\sqrt{2}\mu^3}{3\lambda} - \frac{3}{\sqrt{2}\pi} + \frac{T}{2}. \quad (3.48)$$

Нетрудно обобщить результаты на случай движущегося солитона, а также найти плотность числа солитонов /91/.

С другой стороны, большое количество работ последних лет посвящено термодинамическим вычислениям в конечнотемпературной РКТП /90/. Имеется тенденция к все большему сближению этих двух областей физики.

Итак, на примере двух двумерных полевых моделей показано, что рост температуры системы приводит к восстановлению симметрии, нарушенной при $T=0$. При $T > T_c$ система не содержит кинков в качестве элементарных возбуждений. Важную роль играет ненулевая плотность

фермионов. Причем с ростом плотности эффекты, обусловленные конечной фермионной плотностью, возрастают и становятся более существенными, нежели температурные эффекты. В рамках модели ϕ_F^4 это приводит к изменению вида фазового перехода. Перейдем к анализу модели полиацетилена.

§ 12. Модель транс-полиацетилена

Еще раз вернемся к аналогии, отмеченной в начале данной главы, между моделями ГН и транс-(СН)_x. При этом мы будем широко эксплуатировать связь между массой фермиона в модели ГН и димеризационной щелью в транс-(СН)_x. Естественно предположить, что эффекты, имеющие место в моделях РКТП, будут справедливы и для аналогичных моделей ФКС. Как уже отмечалось, полиацетилен является диэлектриком Пайерлса с удвоением периода. Известно, что с ростом температуры системы имеет место подавление пайерлсовской димеризации. Причем критическое значение, при котором исчезает димеризационная щель, аналогично (3.14) и имеет вид $T_c = \gamma \Delta(\circ) / \pi$, где $\Delta(\circ)$ - значение при $T=0$.

В /83/ показано, что наличие внешнего поля также приводит к "схлопыванию" массовой щели в модели ГН. Аналогичный эффект имеет место и в модели транс-полиацетилена /84/.

Построим термодинамический потенциал для системы взаимодействующих электронов на деформируемой цепочке атомов

$$\Omega(\Delta, T, d) = -\frac{2T}{N} \sum_{\epsilon=\pm 2} \sum_q \ln \left[1 + \exp\left(\frac{\alpha - \epsilon \epsilon}{T}\right) \right] + \frac{\Delta^2}{4\pi t_0 \lambda}, \quad (3.49)$$

где $\epsilon_{\pm 2} = \pm \sqrt{(\Delta \sin q)^2 + (2t_0 \cos q)^2}$, N - число атомов в цепочке, $\lambda = 4a_0^2 / \pi v_F K$, α - химический потенциал. Мы будем придавать ему в дальнейшем тот же смысл, что и в моделях РКТП, т.е. α учитывает электрон-дырочную асимметрию системы, $a_0 \equiv 1$. Кроме того, в (3.49) рассматривается однородная димеризация $\Delta \neq \Delta(x)$. Линеаризуя электронный спектр вблизи точек ферми и переходя к континуальному пределу ($N \rightarrow \infty$), получим

$$\Omega(\Delta, T, d) = -\frac{2T}{\pi v_F} \int_0^{K/2} dq \ln \left[1 + \exp\left(\frac{\alpha - \epsilon}{T}\right) \left[1 + \exp\left(\frac{d + \epsilon}{T}\right) \right] \right] + \frac{\Delta^2}{4\pi t_0 \lambda}, \quad (3.50)$$

где $\epsilon = \sqrt{q^2 + \Delta^2}$, K - импульс обрезания. Необходимо отметить, что, в отличие от моделей РКТП, импульс обрезания K в (3.50) хорошо определен и соответствует импульсу ферми. Полная ширина зоны Бриллюэна $W = 2\sqrt{K^2 v_F^2 + \Delta^2} = 2Kv_F = 4t_0$.

Прежде чем переходить к анализу (3.50), отметим, что термодинамический потенциал $\Omega(\Delta, T, d)$ является полным аналогом эффективного потенциала $P_{\text{эфф}}(\delta, T, d)$ в модели ГН (3.5). Так что все исследование § 10 этой главы можно перенести на модель транс-(СН)_x. Более подробно мы остановимся на этом несколько дальше, при анализе модели цис-(СН)_x.

Условие экстремума (3.50) имеет вид

$$\frac{\partial \Omega(\Delta, T, d)}{\partial \Delta} = \Delta \left(1 - 2\lambda \int_0^{kV_F} \frac{dq}{\epsilon} \frac{\frac{\hbar \epsilon}{T}}{ch \frac{\epsilon}{T} + ch \frac{d}{T}} \right) = 0 \quad (3.51)$$

Поскольку параметры t_0, λ для (СН)_x определены, можно исследовать (3.51) численно. Результаты расчета приведены на рис. 21, 22.

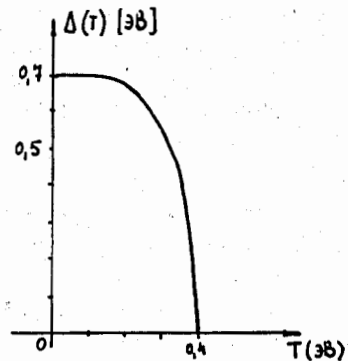


Рис. 21

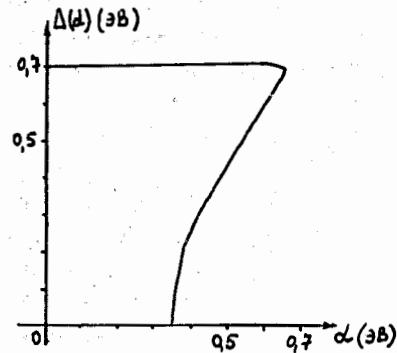


Рис. 22

На рис. 21 представлена зависимость димеризационной щели от температуры при $d = 0$. Щель остается практически постоянной до $T \approx 0,2$ эВ, а затем плавно уменьшается до $\Delta = 0$ при $T = 0,4$ эВ. Очевидно, что этот результат хорошо согласуется с T_c . Решение $\Delta = 0$ является локальным максимумом при $T < T_c$ и минимумом при $T \geq T_c$.

Кривая на рис. 22 получена при $T = 300\text{K}$ (0,026 эВ). Сразу же отметим, что аналогичные вычисления проводились в интервале $250\text{K} < T < 350\text{K}$, и зависимость от T практически не влияет на результат. Нижняя граница $T = 250\text{K}$ обусловлена предельной возможностью используемого калькулятора. Численные расчеты прекрасно согласуются с аналитическими (см. § 10).

Таким образом, критическая плотность

$$n_c = \frac{\sqrt{2} \Delta(0)}{\pi v_F} \quad (3.52)$$

Отметим, что в то время как $T_c \approx 400\text{K}$, что значительно выше температуры плавления полиацетилена, критическая плотность (3.52) имеет вполне разумную численную оценку и позволяет объяснить экспериментальные результаты по легированию цепочек транс-(СН)_x. Мы вернемся к подробному изучению этого вопроса в гл. V.

В главе I отмечалась возможность описания транс-полиацетилена в рамках феноменологической модели ϕ^4 [32]. Очевидно, что модель ϕ^4 является аналогом модели ϕ_F^4 при отсутствии фермионных членов и с учетом замены скорости света на скорость звука в цепочке атомов.

Учет флуктуаций бозонного поля в рамках модели ϕ^4 приводит к критической температуре $T_c^* = 4\sqrt{2} \mu^3 / 9\sqrt{3} \lambda = 0,385 E_x^0$, где использованы выражения (3.42) и (3.47). Если использовать значение $E_x^0 = 4\Delta(0)/3\pi$, полученное в модели [32], то приходим к $T_c^* = 0,16 \Delta(0)$.

С другой стороны, без учета флуктуаций бозе-поля в рамках модели [73] получено выражение $T_c = 8\Delta(0)/\pi = 0,57\Delta(0)$.

Таким образом, $T_c^*/T_c = 0,28$, т.е. квантовые флуктуации фононного поля приводят к понижению температуры пайерсовского перехода приблизительно в четыре раза. Это хорошо подтверждает выводы работ [31, 93].

Кроме того, модель ϕ^4 широко используется для описания структурных фазовых переходов. Известно [94], что в одномерном случае при структурном фазовом переходе отсутствует мягкая фононная мода. Это согласуется с приведенными результатами в рамках модели ϕ_F^4 . Действительно, в $T = T_c$ масса бозонного поля испытывает скачок и не обращается в нуль. Необходимо отметить, что учет конечной фермионной плотности приводит к смягчению фононной моды в точке фазового перехода, вплоть до обращения в нуль. Этот результат может иметь важное значение при изучении структурных фазовых переходов в несобственных (*n*- или *p*-типа) полупроводниках, описываемых в рамках квазиодномерной модели.

§ 13. Модель цис-полиацетилена

Модель цис-(СН)_x отличается от модели транс-(СН)_x наличием затравочной щели, обусловленной димеризацией под влиянием "скелета" σ-связей. Это аналогично наличию затравочной фермионной массы

в модели ГН, т.е. в лагранжиан (2.1) добавляется член $m_0 \bar{\psi} \psi$. При этом дискретная симметрия исходного лагранжиана нарушается, и можно говорить только о приближенном сохранении симметрии /76/.

Несмотря на такое небольшое изменение, модель цис-(СН)_x приобретает ряд важных отличительных свойств, упомянутых в гл.1. Здесь мы рассмотрим, как это отразится на эффектах, обусловленных конечной температурой и химическим потенциалом.

Термодинамический потенциал на один атом углерода имеет вид

$$\Omega(\Delta, T, \alpha) = -\frac{2T}{N} \sum_q \ln [1 + \exp(\frac{\alpha - \epsilon}{T})] [1 + \exp(\frac{\alpha + \epsilon}{T})] + \frac{\Delta_i^2}{4\pi t_0 \lambda}, \quad (3.53)$$

где $\epsilon = \sqrt{(\bar{\Delta} \sin \varphi)^2 + (2t_0 \cos \varphi)^2}$, $E_F \equiv 0$.

Щель в электронном спектре $\bar{\Delta}^2 = \Delta_e^2 + \Delta_i^2 + 2\Delta_e \Delta_i \cos \varphi$.

Таким образом,

$$\Delta_i^2 = \bar{\Delta}^2 - 2\Delta_e \cos \varphi \sqrt{\bar{\Delta}^2 - (\Delta_e \sin \varphi)^2} + \Delta_e^2 \cos 2\varphi. \quad (3.54)$$

Мы рассматриваем однородное состояние $\Delta \neq \Delta(x)$.

Напомним, что фаза $\varphi = \text{const.}$ определяется атомной структурой полимера.

Условие экстремума (3.53) есть

$$0 = \frac{\partial \Omega(\Delta, T, \alpha)}{\partial \bar{\Delta}} \Big|_{\bar{\Delta} = \bar{\Delta}_0} = \bar{\Delta}_0 \left[\int_0^{k_{UF}} \frac{dq}{\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial \bar{\Delta}} - \frac{1}{2\lambda} \left(1 - \frac{\Delta_e \cos \varphi}{\sqrt{\bar{\Delta}_0^2 - (\Delta_e \sin \varphi)^2}} \right) \right]. \quad (3.55)$$

При $\Delta_e = 0$ очевидно приходим к (3.51). Отметим, что в (3.55)

$\bar{\Delta}_0 > \Delta_e \sin \varphi$, т.е. при $\Delta_e \neq 0$, $\bar{\Delta}_0 > 0$. Уравнение (3.55) можно решать при помощи ЭВМ. Мы использовали при этом значения параметров модели /35/ $k_{UF} = 2t_0 = 5$ эВ, $1/2\lambda = 2,664$. Результаты расчета приведены на рис. 23, 24, 25. На рис. 23 приведена зависимость параметра щели $\bar{\Delta}_0$ от температуры при $\alpha = 0$, $\varphi = 0$ и различных значениях Δ_e . В отличие от случая $\Delta_e = 0$ (см. рис. 21), щель $\bar{\Delta}_0$ не обращается в нуль и имеет асимптотику $\bar{\Delta}_0 \rightarrow \Delta_e$ при $T \rightarrow \infty$. С ростом Δ_e растет и значение $\bar{\Delta}_0(T=0)$, причем кривая $\bar{\Delta}_0(T)$ становится все более пологой.

На рис. 24 представлены кривые $\bar{\Delta}_0(T)$ при фиксированном значении $\Delta_e = 0,14$ эВ и при различных значениях угла φ . С ростом φ значения $\bar{\Delta}_0(T)$ уменьшаются. При $T \rightarrow \infty$ имеет место асимптотика $\bar{\Delta}_0(T) \rightarrow \Delta_e$. Весьма примечательной является зависимость $\bar{\Delta}_0(\alpha)$ при фиксированной температуре и $\varphi = 0$. При малых Δ_e поведение

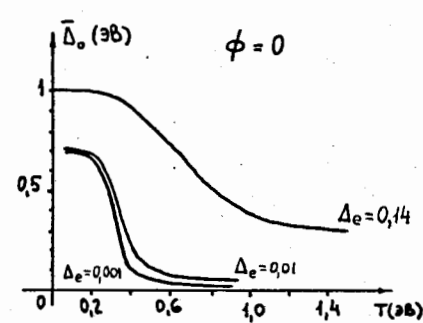


Рис. 23

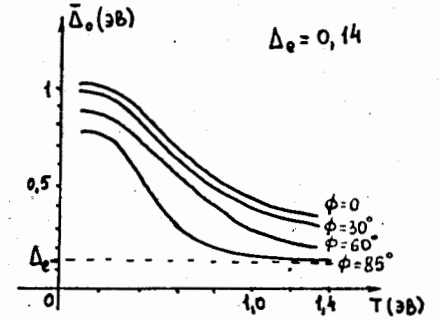


Рис. 24

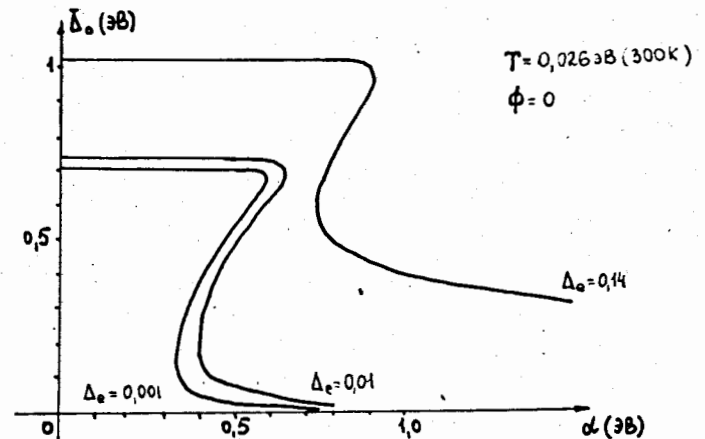


Рис. 25

$\bar{\Delta}_0(\alpha)$ близко к случаю $\Delta_e = 0$ (рис. 22), но есть существенное различие. При $\Delta_e \neq 0$ исчезает корень $\bar{\Delta}_0 = 0$, а имеется лишь асимптотика $\bar{\Delta}_0(\alpha) \rightarrow \Delta_e$ при $\alpha \rightarrow 2t_0$. При $\alpha \rightarrow \infty$ $\bar{\Delta}_0(\alpha) \rightarrow 0$. Отметим кривую $\bar{\Delta}_0(\alpha)$ при $\Delta_e = 0,14$ эВ. Во-первых, значение $\bar{\Delta}_0(0)$ возрастает. Во-вторых, кривая смещается и несколько изменяет свою форму. Следует ожидать, что здесь уже не так резко будет выделена смена режима, т.е. уменьшится скачок $\bar{\Delta}_0(\alpha)$. Кроме того, смещается

сама критическая точка α_c . Численный расчет показывает, что $0,85 \text{ эВ} < \alpha_c < 0,9 \text{ эВ}$ при $\Delta_e = 0,14 \text{ эВ}$.

Целесообразно провести некоторый аналитический анализ. Прежде всего отметим, что при $\alpha = 0$ уравнение (3.55) принимает вид

$$\int_0^{k\Gamma} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \tanh \frac{\epsilon}{2T} = \frac{1}{2\lambda} \left(1 - \frac{\Delta_e \cos \varphi}{\sqrt{\bar{\Delta}_0^2 - (\Delta_e \sin \varphi)^2}} \right) \quad (3.56)$$

В случае $T \rightarrow 0$ приходим к уравнению

$$\ln \frac{W}{\bar{\Delta}_0} = \frac{1}{2\lambda} \left(1 - \frac{\Delta_e \cos \varphi}{\sqrt{\bar{\Delta}_0^2 - (\Delta_e \sin \varphi)^2}} \right) \quad (3.57)$$

Учитывая, что при $\Delta_e = 0$ $\bar{\Delta}_0 = \Delta_0 = W \exp(-1/2\lambda)$, перепишем (3.57) в виде

$$\sqrt{\bar{\Delta}_0^2 - (\Delta_e \sin \varphi)^2} \ln \frac{\bar{\Delta}_0}{\Delta_0} = \frac{\Delta_e \cos \varphi}{2\lambda} \quad (3.58)$$

При условии $|\Delta_e \sin \varphi| \ll \bar{\Delta}_0$ из (3.58) нетрудно получить

$$\bar{\Delta}_0 \approx \Delta_0 \left(1 + \frac{\Delta_e \cos \varphi}{2\lambda \Delta_0} \right) \quad (3.59)$$

Отметим, что эта оценка дает хорошее согласие с численным расчетом. С другой стороны, при $T \rightarrow \infty$ из (3.56) получается асимптотика $\bar{\Delta}_0 \rightarrow \Delta_e$, что согласуется с рис.23,24.

Более сложен анализ случая $\alpha \neq 0$. Как и ранее, ограничимся приближением $\alpha \gg T$. Удобно рассмотреть две области. Из (3.53) в континуальном пределе

$$\Omega(\bar{\Delta} > d) = -\frac{2}{\pi \nu_F} \left[4t_0 d + 2t_0^2 + \frac{\bar{\Delta}^2}{4} + \frac{\bar{\Delta}^2}{2} \ln \frac{\Delta_0}{\bar{\Delta}} - \frac{1}{4\lambda} \left(\Delta_e^2 \cos 2\varphi - 2\Delta_e \cos \varphi \sqrt{\bar{\Delta}^2 - (\Delta_e \sin \varphi)^2} \right) \right] \quad (3.60)$$

Условие экстремума (3.60) имеет вид, аналогичный (3.58). Таким образом, в области $\bar{\Delta} > d$ имеем решение (3.59). Более интересна область $\bar{\Delta} < d$:

$$\Omega(\bar{\Delta} < d) = -\frac{2}{\pi \nu_F} \left[4t_0 d + 2t_0^2 + \frac{\bar{\Delta}^2}{4} + \frac{\bar{\Delta}^2}{2} \ln \frac{\Delta_0}{d + \sqrt{d^2 - \bar{\Delta}^2}} + \frac{\alpha}{2} \sqrt{d^2 - \bar{\Delta}^2} - \frac{1}{4\lambda} \left(\Delta_e^2 \cos 2\varphi - 2\Delta_e \cos \varphi \sqrt{\bar{\Delta}^2 - (\Delta_e \sin \varphi)^2} \right) \right] \quad (3.61)$$

Условие экстремума $\frac{\partial \Omega(\bar{\Delta} < d)}{\partial \bar{\Delta}} \Big|_{\bar{\Delta} = \bar{\Delta}_0} = 0$ принимает вид

$$\sqrt{\bar{\Delta}_0^2 - (\Delta_e \sin \varphi)^2} \ln \frac{\alpha + \sqrt{d^2 - \bar{\Delta}_0^2}}{\Delta_0} = \frac{\Delta_e \cos \varphi}{2\lambda} \quad (3.62)$$

Рассмотрим первоначально случай $\varphi = 0$ и предел $\bar{\Delta}_0 \ll \Delta_0$. Тогда (3.62) имеет решение

$$\bar{\Delta}_0^* = \frac{\Delta_e}{2\lambda \ln 2d/\Delta_0} \quad (3.63)$$

Отметим, что при $\alpha \rightarrow \Delta_0/2$ в отличие от случая транс-полмацетилена (рис.22), условие (3.62) не имеет корней. При $d \rightarrow \infty$ в (3.63) $\bar{\Delta}_0^* \rightarrow 0$, а при $\alpha \rightarrow 2t_0$, $\bar{\Delta}_0^* \rightarrow \Delta_e$, что совпадает с численным расчетом (рис.25).

В пределе $\Delta_e/\Delta_0 \ll 1$ уравнение (3.62) содержит корень $\bar{\Delta}_0^* = \Delta_0 \sqrt{\frac{2\alpha}{\Delta_0} - 1}$, совпадающий с результатом в модели транс-(СН)_x. Если построить зависимость $\bar{\Delta}_0^*(\alpha)$ от α , то придем к рис.25.

Необходимо исследовать, при каких значениях α будет иметь место минимум $\Omega(\bar{\Delta}, T, d)$. Построим разность

$$\Omega(\bar{\Delta} > d) - \Omega(\bar{\Delta} < d) = -\frac{2}{\pi \nu_F} \left[\frac{1}{4} (\bar{\Delta}_0^2 - \bar{\Delta}_0^{*2}) + \frac{\Delta_0^2}{2} \ln \frac{\Delta_0}{\bar{\Delta}_0} + \frac{\Delta_e \cos \varphi}{2\lambda} \sqrt{\bar{\Delta}_0^2 - (\Delta_e \sin \varphi)^2} - \frac{\bar{\Delta}_0^{*2}}{2} \ln \frac{\Delta_0}{\alpha + \sqrt{d^2 - \bar{\Delta}_0^{*2}}} - \frac{\alpha}{2} \sqrt{d^2 - \bar{\Delta}_0^{*2}} - \frac{\Delta_e \cos \varphi}{2\lambda} \sqrt{\bar{\Delta}_0^{*2} - (\Delta_e \sin \varphi)^2} \right] \quad (3.64)$$

Имеет смысл рассмотреть предел $\Delta_e = 0$ и $\varphi = 0$. Тогда $\bar{\Delta}_0 = \Delta_0$, и из (3.64) нетрудно получить, что $\Omega(\Delta_0, d) < \Omega(\bar{\Delta}_0^*, d)$.

С другой стороны, $\Omega(\Delta_0, d) - \Omega(0, d) = -\frac{2}{\pi \nu_F} \left(\frac{1}{4} \Delta_0^2 - \frac{1}{2} d^2 \right)$, так что $\alpha_c = \Delta_0/\sqrt{2}$ в согласии с (3.52). Аналогичный результат имеет место и при $\Delta_e \ll \bar{\Delta}_0$.

Если использовать явный вид $\bar{\Delta}_0$ и учесть (3.57), то (3.64) можно переписать в виде

$$\Omega(\bar{\Delta} > \alpha) - \Omega(\bar{\Delta} < \alpha) = -\frac{2}{\pi v_F} \left[\frac{1}{4} (\bar{\Delta}_0^2 - \bar{\Delta}_0'^2) + \frac{\Delta_e}{4\lambda} (\bar{\Delta}_0 - \bar{\Delta}_0') - \frac{\alpha}{2} \sqrt{\alpha^2 - \bar{\Delta}_0'^2} \right] \quad (3.65)$$

В грубом приближении $\alpha \gg \bar{\Delta}_0'$ из (3.65) несложно получить

$$\alpha_c^2 = \frac{\bar{\Delta}_0'^2}{2} + \frac{\Delta_e}{2\lambda} \left(\bar{\Delta}_0 - \frac{\Delta_e}{2\lambda \ln \frac{2}{\Delta_0} \sqrt{\frac{\bar{\Delta}_0'^2}{2} + \frac{\Delta_e \bar{\Delta}_0'}{2\lambda}}} \right) \quad (3.66)$$

где использовано (3.63). Отметим, что при $\Delta_e = 0,14$ эВ численная оценка (3.66) дает $\alpha_c = 0,87$ эВ, опять же в хорошем согласии с численными расчетами на ЭВМ.

Таким образом, в пнс-(СН)_X при $\alpha < \alpha_c$ имеет место димеризационная щель $\bar{\Delta}_0$, тогда как в области $\alpha \geq \alpha_c$ происходит смена режима, и реализуется состояние с щелью $\bar{\Delta}_0'$ (3.63).

В точке $\alpha = \alpha_c$ имеет место скачок параметра порядка $\bar{\Delta}$. В случае $\alpha = 0$ параметр порядка плавно меняется с ростом температуры, согласно рис.23,24. Эти же выводы, очевидно, справедливы для модели РКТП (2.1) с затравочной массой фермионов. В гл. V мы обсудим применимость полученных результатов к реальной ситуации в пнс-(СН)_X. А пока перейдем к достаточно подробному изложению вопроса, связанного с дробными зарядами солитонов в одномерных моделях.

□

СОЛИТОНЫ С ДРОБНЫМИ ЗАРЯДАМИ В ФКС и РКТП

Исследования необычных квантовых чисел, локализованных на топологических солитонах, посвящен целый ряд работ^{74,35,95-101/}, на результатах которых и будет основано наше изложение. Физическая подоснова возникновения дробных квантовых чисел достаточно прозрачна.

Наличие в системе объектов с нетривиальной топологией приводит к изменению структуры основного состояния системы. Так, например, в случае доменной стенки требуется бесконечная энергия для того, чтобы ее опрокинуть (в цепочке полиацетилена (см.рис.9) необходимо "перевернуть" бесконечное число π -связей). В теории поля квантование полей осуществляется относительно вакуумного состояния. В нашем случае квантование относительно нового "солитонного" вакуума может привести к необычным квантовым числам, локализованным на солитоне.

§ 14. Солитоны с дробными зарядами в модели Φ_F^4 и полиацетилена

Рассмотрим механизм возникновения дробных зарядов на примере модели Φ_F^4 . Для простоты положим $N = 1$. Согласно (3.26), минимум потенциальной энергии достигается при $\langle \Phi \rangle = \rho = \pm \mu / \sqrt{\lambda}$. При этом фермионы преобретают массу $m_F = g\rho$. Свободное уравнение Дирака (2.23) имеет решение в виде плоских волн с непрерывным энергетическим спектром $\epsilon_k = \pm \sqrt{k^2 + m_F^2}$, причем можно выделить решения с положительными $u_k^{(+)}(x)$, $v_k^{(+)}(x)$ и отрицательными $u_k^{(-)}(x)$, $v_k^{(-)}(x)$ модами. Квантование осуществляется стандартным разложением по модам

$$\Psi = \sum_k \left(e^{-i\epsilon_k t} b_k^{(+)} u_k^{(+)}(x) + e^{i\epsilon_k t} d_k^{(+)} v_k^{(+)}(x) \right) \quad (4.1)$$

где b_k^{+} (b_k^{-}) и d_k^{+} (d_k^{-}) - операторы рождения (уничтожения) частиц и античастиц соответственно.

Лагранжиан (2.22) симметричен относительно операции зарядового сопряжения \mathcal{C}_3 , переводящей решение с положительной энергией в решение с отрицательной энергией и наоборот. Отметим, что $u_k^{(-)} = \mathcal{C}_3(u_k^{(+)})^*$.

Введем оператор заряда

$$Q = \int dx : \Psi^{\dagger}(x) \Psi(x) : \quad (4.2)$$

С учетом (4.1)

$$Q = \sum_k (b_k^\dagger b_k - d_k^\dagger d_k) ,$$

так что $Q|0\rangle = 0$, т.е. вакуум является нейтральным.

В присутствии солитона необходимо решить уравнение Дирака в поле солитона. Как показано в гл. II, при этом в энергетическом спектре появляется дискретная мода с нулевой энергией. Соответствующая волновая функция $\Psi_0(x)$ имеет вид (2.25). Причем функция $\Psi_0(x)$ является зарядово-самосогрешенной, т.е. $\Psi_0^* = b_3 \Psi_0(x) = \Psi_0(x)$.

Осуществляем квантование

$$\Psi = a \Psi_0(x) + \sum_k (e^{iE_k t} B_k U_k^{(+)} + e^{iE_k t} \mathcal{D}_k^+ V_k^{(-)}) \quad (4.3)$$

В (4.3) выделена нулевая мода; E_k , $U_k^{(+)}(x)$, $V_k^{(-)}(x)$ - энергия и волновые функции уравнения Дирака в присутствии солитона. Операторы B_k (b_k), \mathcal{D}_k^+ (d_k) определены в солитонном секторе. Как и ранее, $V_k^{(-)} = b_3 (U_k^{(-)})^*$. Обозначим солитонный вакуум $|S\rangle$. Тогда $B_k |S\rangle = 0$, $\mathcal{D}_k |S\rangle = 0$, и оператор B_k^+ (\mathcal{D}_k^+) рождает фермион (антифермион). Поскольку состояние $\Psi_0(x)$ вырождено по энергии, действие оператора a на состояние $|S\rangle$ порождает другое состояние с той же энергией. Обозначим эти состояния $|\pm, S\rangle$. Тогда

$$a |+, S\rangle = |-, S\rangle ; a^+ |-, S\rangle = |+, S\rangle ; \quad (4.4)$$

$$a |-, S\rangle = 0 ; a^+ |+, S\rangle = 0$$

В (3.4) плюс относится к занятому состоянию и минус - к незанятому. Определим заряд солитонного вакуума, подставляя (4.3) в (4.2),

$$Q = a^+ a - \frac{1}{2} + \sum_k (B_k^+ B_k - \mathcal{D}_k^+ \mathcal{D}_k) \quad (4.5)$$

Таким образом,

$$Q | \pm, S \rangle = \pm \frac{1}{2} | \pm, S \rangle , \quad (4.6)$$

т.е. каждое из двух солитонных состояний несет 1/2 единицу заряда.

Аналогичный результат был получен в гл. I при анализе свойств модели полиацетилена. В случае транс-полиацетилена π -электроны имеют спин, и дробление заряда, локализованного на солитоне, скрыто удвоением степеней свободы. Это привело к солитонам с необычным

соотношением спина и заряда. К этим выводам можно прийти совсем просто из топологических соображений. Пусть мы имеем цепочку транс- $(CH)_x$, например, в фазе А (см. рис. 4), в которой образовалось два солитона на конечном сегменте. Сравним две цепочки с одинаковым числом узлов (рис. 26).



Рис. 26

Элементарный подсчет числа π -связей показывает, что на нижнем рисунке на выделенном сегменте "не хватает" ровно одной π -связи. Таким образом, двухсолитонное состояние оказывается эквивалентным основному состоянию (в фазе А в нашем случае) плюс одна π -связь. Если исключить спин и предположить, для простоты, что каждой связи соответствует один электрон, то в присутствии пар солитонов появляется дефицит ровно в один электрон. Поскольку нет оснований выделить какой-либо из солитонов, то симметрия между ними приводит к тому, что каждый солитон должен нести электронное число - 1/2.

В полиацетилене дефицит составляет два электрона, т.е. каждый солитон несет электронное число - 1. Можно продолжить данную идеологию и рассмотреть модель с трехкратно вырожденным основным состоянием. На рис. 27 изображены три вырожденных конфигурации тримеризованной цепочки.

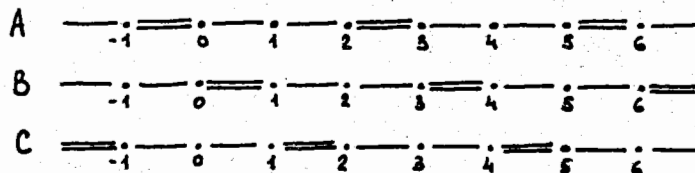


Рис. 27

Для удобства атомы пронумерованы. В фазе А "подтягиваются" атомы (-1,0), (2,3), (5,6) ..., в фазе В - (0,1), (3,4), (6,7) ..., в фазе С - (1,2), (4,5),

Амплитуду смещения n -го атома из положения равновесия можно записать в виде

$$y_n = y \cos \left(\frac{2}{3} \pi n - \theta \right) , \quad (4.7)$$

где ψ и θ фиксируют смещение атома с $n = 0$, причем $\theta = \pi/6$ в фазе А, $\theta = 5\pi/6$ в фазе В и $\theta = 3\pi/2$ в фазе С.

Вообще говоря, в такой системе можно выделить два класса доменных стенок: кинк типа I образуется при переходе через фазы $A \rightarrow B$, $B \rightarrow C$, $C \rightarrow A$, кинк типа II соответствует переходу $A \rightarrow C$, $C \rightarrow B$, $B \rightarrow A$.

Рассмотрим бесконечную цепочку в фазе А, т.е. при $n \rightarrow -\infty$ $\theta = \pi/6$. Пусть на цепочке выделены три узла n_1, n_2, n_3 , которые широко разведены друг от друга. Причем в окрестности узла n_1 имеет место В-фаза, в окрестности узла n_2 - С-фаза. При $n = n_2$ вновь восстанавливается фаза А. Это означает, что при $n \rightarrow n_1$ фаза $\theta \rightarrow 5\pi/6$, при $n \rightarrow n_2$ $\theta \rightarrow 3\pi/2$ и при $n \rightarrow n_3$ $\theta \rightarrow 13\pi/6$.

Таким образом, полное изменение фазы составляет $\Delta\theta = 2\pi$. При этом ^{/95,96/} через гауссову поверхность вдали от кинков течет общий заряд $\Delta Q = -\frac{\Delta\theta}{\pi}|e| = -2|e|$. Предполагая идентичность кинков типа I, приходим к результату, что заряд каждого кинка равен $\frac{2}{3}|e|$. В полиацетилене мы рассматривали два кинка, а изменение фазы также было 2π . В общем случае для системы с ρ вырожденными основными состояниями аналогичные рассуждения приводят к заряду, локализованному на солитоне, кратному величине $\frac{2}{\rho}|e|$. Отметим, что эти простые результаты согласуются с численными расчетами для цепочек конечной длины, а также с аналитическими результатами с использованием метода функций Грина ^{/95/}.

Таким образом, в системе с вырожденным основным состоянием имеются стабильные возбуждения (топологические кинки) с дробными зарядами.

Для кинков типа II заряд равен $-\frac{2}{3}|e|$, т.е. они являются антикинками по отношению к кинкам I. В случае $\rho = 3$, благодаря нарушению основного состояния, можно создать пары кинк-антикинк $K\bar{K}$ или триплеты $KK\bar{K}$, $\bar{K}K\bar{K}$. Таким образом, имеется некоторая аналогия с кварковой структурой мезонов и адронов. Весьма интересной представляется попытка описать барионы как солитоны в рамках модели Скирма ^{/105/}. В дальнейшем мы не будем останавливаться на системах с произвольным вырождением вакуума, а ограничимся $\rho = 2$.

§ 15. Солитоны с дробными зарядами в модели двухатомных полимеров

Рассмотрим модель с гамильтонианом

$$H = \int dx \left\{ \psi^* \sigma_2 i \frac{d\psi}{dx} + \psi^* \sigma_1 \psi \varphi + \epsilon \psi^* \sigma_3 \psi + V(\varphi) \right\}, \quad (4.8)$$

предложенным в ^{/101/} для описания двухатомных полимеров. В (4.8)

$\psi = \begin{pmatrix} \psi \\ \varphi \end{pmatrix}$, ϵ - параметр, учитывающий нарушение симметрии гамильтониана относительно операции зарядового сопряжения, $V(\varphi)$ - потенциал, σ_i - матрицы Паули. При $\epsilon = 0$ и конкретном выборе потенциала $V(\varphi)$ модель (4.8) совпадает при переопределении полей ψ с континуальной моделью ползацетилена (без учета спина) или $N = I$ моделями РКП в статическом случае. Для простоты изложения мы ограничимся случаем $N = I$, в противном случае в (4.8) необходимо ввести суммирование по числу типов фермионов.

Не конкретизируя явный вид $V(\varphi)$, будем предполагать, что в основном состоянии имеет место двукратное вырождение основного состояния, и, следовательно, имеются солитонные решения $\varphi_s(x)$. Для определения заряда, локализованного на солитоне, необходимо знать спектр задачи в присутствии солитона $\varphi(x) = \varphi_s(x)$ и в его отсутствие $\varphi(x) = \varphi_0 = \text{const}$. Тогда

$$Q = \int dx [\rho^s(x) - \rho^0(x)], \quad (4.9)$$

где $\rho(x) = \sum_n \psi_n^*(x) \psi_n(x)$; суммирование осуществляется по всем занятым уровням в фермионном спектре.

Уравнение Дирака для стационарных состояний имеет вид

$$\left(-i\sigma_2 \frac{d}{dx} + \sigma_1 \varphi + \sigma_3 \epsilon \right) \psi_n = E_n \psi_n \quad (4.10)$$

Функции ψ предполагаются нормированными $\int |\psi_n(x)|^2 dx = 1$. В компонентах (4.10) примет вид

$$\begin{aligned} -v_x + \varphi v + \epsilon u &= E u, \\ u_x + \varphi u - \epsilon v &= E v, \end{aligned} \quad (4.11)$$

где $v_x = \partial v / \partial x$, индекс n опущен, поля v, u, φ зависят от x . Из (4.11) получим

$$\begin{aligned} v &= \frac{u_x + \varphi u}{E + \epsilon}, \\ -u_{xx} + (\varphi^2 - \varphi_x)u &= (E^2 - \epsilon^2)u. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Прежде всего отметим, что при $\varphi = \varphi_0$ решением системы (4.12) являются плоские волны

$$\begin{aligned} u_k(x,t) &= \sqrt{\frac{E+\epsilon}{2E}} \exp[i(kx - Et)], \\ v_k(x,t) &= \frac{\varphi_0 + ik}{E + \epsilon} u(x,t) \end{aligned} \quad (4.13)$$

с непрерывным спектром $E = \pm \sqrt{k^2 + \varphi_0^2 + \epsilon^2}$. Предположим, что $\varphi_s(x)/x \rightarrow \pm \infty \rightarrow \pm |\varphi_0|$.

Нетрудно убедиться, что в присутствии солитона имеется дискретный уровень при $E_s = \pm |\epsilon|$ (в дальнейшем будем полагать $E_s = \epsilon > 0$) с волновой функцией

$$u_\epsilon^s(x) = N_0 \exp[-\int dx' \varphi_s(x')] \quad (4.14)$$

$$v_\epsilon^s(x) = 0$$

а также непрерывный спектр с $E = \pm \sqrt{k^2 + \varphi_0^2 + \epsilon^2}$ и

$$u^s(x) = \sqrt{\frac{E+\epsilon}{2E}} u_k^s(x) \quad (4.15)$$

$$v^s(x) = -\frac{1}{\sqrt{(E+\epsilon)2E}} (\partial_x + \varphi(x)) u_k^s(x)$$

где $u_k^s(x)$ - нормированные решения уравнения Шредингера, конкретный вид которых пока не существует. Полагая, что уровень $E_s = \epsilon$ свободен, получим плотность заряда

$$\rho_k(x) = \frac{E+\epsilon}{2E} |u_k(x)|^2 + \frac{1}{2E(E+\epsilon)} |(\partial_x + \varphi) u_k(x)|^2 \quad (4.16)$$

$$|u_k(x)|^2 + \frac{1}{4E(E+\epsilon)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} |u_k(x)|^2 + \frac{1}{2E(E+\epsilon)} \frac{\partial}{\partial x} [|u_k(x)|^2 \varphi(x)]$$

где использовано второе уравнение в (4.12). Очевидно, что в отсутствие кванка остается только первый член в (4.16). Теперь

$$Q = \int dx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} [|u_k^s(x)|^2 - |u_k^o(x)|^2] + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{1}{4E(E+\epsilon)} \times \quad (4.17)$$

$$[\partial_x |u_k^s(x)|^2 + 2 |u_k^s(x)|^2 \varphi_s(x)] \Big|_{x=-\infty}^{x=+\infty}$$

Отметим, что при выводе (4.17) мы исключили из рассмотрения все связанные состояния, кроме $E = \epsilon$, предполагая солитонный профиль, имеющий только одно связанное состояние. Это справедливо для рассматриваемых нами моделей.

В (4.17) двойной интеграл вычисляется полностью, поскольку предполагается свойство полноты функций $u_k(x)$. Для этого доста-

точно вспомнить, что $u_k^o(x)$ представляет все шредингеровские моды в вакууме, а $u_k^s(x)$ укорочено от полного солитонного сектора, так как исключено связанное состояние, добавляющее -1 к величине Q (ср. с (4.5)).

Предположим $u_k^s(x)|_{x \rightarrow \infty} \rightarrow T e^{ikx}$, $u_k^s(x)|_{x \rightarrow -\infty} \rightarrow e^{ikx} + R e^{-ikx}$, где T и R - коэффициенты прохождения и отражения, соответственно, причем $|T|^2 + |R|^2 = 1$.

Таким образом,

$$Q = -1 + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{\varphi_0}{2E(E+\epsilon)} [|T|^2 + |R|^2 + 1] = -1 + \frac{\varphi_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{E(E+\epsilon)} \quad (4.18)$$

где $E = -\sqrt{k^2 + \varphi_0^2 + \epsilon^2}$.

Окончательно,

$$Q = -\frac{1}{\pi} \arctg \frac{\varphi_0}{\epsilon} \quad (4.19)$$

Нетрудно убедиться, что при $\epsilon \rightarrow 0$ заряд, локализованный на солитоне $Q = -1/2$ в согласии с предыдущими выводами. Если вернуться к моделям РКТП, то член с ϵ возникает благодаря взаимодействию фермионов с дополнительным скалярным полем φ_2 , т.е. лагранжиан взаимодействия имеет вид $\mathcal{L}_I = g \bar{\psi} (\varphi_1 + i \gamma_5 \varphi_2) \psi$, причем $\varphi_2(x) \rightarrow \pm \text{const}$ при $x \rightarrow \pm \infty$.

Кроме того, отметим, что в полиацетилене и моделях (2.1), (2.22) известен как явный вид солитонного решения $\varphi_s(x) = \varphi_0 \tanh \varphi_0 x$, так и фермионные волновые функции $u_k(x)$ (1.15'), так что можно вычислить плотность заряда.

$$\tilde{\rho}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} [\rho_k^s(x) - \rho_k^o(x)] = \frac{Q}{2\varphi_0} \frac{\partial}{\partial x} \varphi_s(x) \quad (4.20)$$

В /97/ вычислена величина квантовых флуктуаций заряда солитона. Показано, что средняя квадратичная величина флуктуации оператора заряда относительно средней величины Q_s (в общем случае дробной) мала как $\mathcal{O}(1/L)$ при $L \gg \xi_0$, где ξ_0 - ширина солитона, L - длина цепочки. При $L \rightarrow \infty$ волновая функция солитона является собственной функцией оператора заряда с дробным собственным значением. В /98/ проведено обобщение этих результатов на случай солитонов с фермионным числом $1/\rho$. При этом утверждается, что фермионный заряд является хорошо определенной наблюдаемой, т.е. в принципе предполагается возможность измерения дробного фермионного заряда. В /99/ рассмотрен одномерный электронный газ с полузаполненной

зоной, в котором электроны связаны с межузельными и внутриузельными решеточными деформациями. В области, где оба типа деформаций имеют ненулевую ожидаемую величину, возникает новый класс солитонов, которые спонтанно нарушают симметрию зарядового сопряжения ($\epsilon \neq 0$) и являются низкими электронными возбуждениями системы. Заряд солитона при этом является непрерывной функцией констант связи.

§ 16. Изменение дробного заряда солитона при конечных температурах и химическом потенциале

В /102, 103/ сделано обобщение результатов на случай конечной температуры системы, а в /104/ принят во внимание и конечный химический потенциал фермионов. Для этого к гамильтониану (4.8) необходимо добавить член типа $-\alpha \int \psi^* \psi dx$, учитывающий асимметрию числа частиц и античастиц. Обобщение выражения (4.9) достаточно тривиально /104/.

$$Q(\alpha, T) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \sum_n [\rho_n^s(x) - \rho_n^o(x)] n(\epsilon_i - \alpha), \quad (4.21)$$

где $n(\epsilon_i - \alpha) = [\exp(\frac{\epsilon_i - \alpha}{T}) + 1]^{-1}$ - функция распределения Ферми. Таким образом, (4.17) примет вид

$$Q(\alpha, T) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \sum_{p=21-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} (|u_k^s(x)|^2 - |u_k^o(x)|^2) n(pE - \alpha) + \sum_{p=21-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{1}{4pE(pE + \epsilon)} \left[\partial_x |u_k^s(x)|^2 + 2|u_k^s(x)|^2 \varphi_s(x) \right] \Big|_{x=-\infty}^{x=\infty} n(pE - \alpha) + n(\epsilon - \alpha), \quad (4.22)$$

где учтено, что при конечном α возможно заполнение уровней как $E = \epsilon$, так и более высоких (в зоне проводимости). Член $n(\epsilon - \alpha) = \begin{cases} 0, & \epsilon > \alpha \\ 1, & \epsilon \leq \alpha \end{cases}$ учитывает заполнение дискретного уровня $E = \epsilon$. В (4.22) $E = \sqrt{k^2 + \varphi_0^2 + \epsilon^2}$. Для конкретных моделей, имеющих для нас интерес, функции $\varphi_s(x)$, $u_k^s(x)$, $u_k^o(x)$ известны (см. формулы I.15, I.15', 2.9-2.II, 2.24, 2.25), поэтому

$$Q(\alpha, T) = -2\varphi_0 \sum_{p=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{n(pE - \alpha)}{k^2 + \varphi_0^2} + 2\varphi_0 \sum_{p=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{n(pE - \alpha)}{2pE(pE + \epsilon)} + n(\epsilon - \alpha). \quad (4.23)$$

В дальнейшем мы будем анализировать выражение (4.23). До этого мы практически исключили из рассмотрения конкретный вид потенциала $V(\varphi)$. Однако при включении эффектов конечной температуры и химического потенциала эффективный потенциал системы изменяется, причем, как было показано в гл. III, существуют критические значения T_c и α_c , выше которых симметрия системы восстанавливается. Очевидно, что солитонов в такой системе уже нет, и все рассуждения теряют смысл. Таким образом, при анализе (4.23) необходимо учитывать наличие T_c и α_c , а также зависимость $\varphi = \varphi_0(T, \alpha)$ (см. рис. 21-25). Поэтому предельные значения $T \rightarrow \infty$, $\alpha \rightarrow \infty$, используемые в /102-104/ для $Q(\alpha, T)$, не имеют места в случае наших конкретных моделей.

Первоначально рассмотрим случай $\alpha = 0$.

Тогда

$$Q(T) = -\frac{\varphi_0}{2\pi} \int \frac{dk}{k^2 + \varphi_0^2} + \frac{\epsilon \varphi_0}{2\pi} \int \frac{dk}{E(k^2 + \varphi_0^2)} \tanh \frac{E}{2T} + (\epsilon^2 + 1)^{-1}, \quad (4.24)$$

где использованы соотношения $n(E) + n(-E) = 1$ и $n(E) - n(-E) = -\tanh E/2T$.

Нетрудно убедиться, что при $T=0$ мы приходим к результату (4.19). При низких температурах интеграл в (4.24) можно оценить /103/, и

$$Q(T) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{\varphi_0}{\epsilon} + \frac{1}{\epsilon^2 + 1} - \frac{2\epsilon}{\pi \varphi_0} \left(\frac{\sqrt{\varphi_0^2 + \epsilon^2}}{T} \right)^{-1/2} \exp\left(-\frac{\sqrt{\varphi_0^2 + \epsilon^2}}{T}\right) + O\left[T, \exp\left(-\frac{\sqrt{\varphi_0^2 + \epsilon^2}}{T}\right)\right]. \quad (4.25)$$

Весьма примечательным является предел $\epsilon \rightarrow 0$. При этом $Q(T) = 0$, т.е. при конечной температуре средний заряд оказывается равным нулю. Это означает, что при конечной температуре должны рождаться солитон-антисолитонные пары, т.е. в пределе $\epsilon \rightarrow 0$ основным состоянием будет дублет солитонов с фермионным числом $\pm 1/2$, так что среднее фермионное число обращается в нуль.

При $\epsilon \neq 0$ и $T \ll \epsilon$ $Q(T)$ стремится к своему значению при $T=0$, а при $T \approx \epsilon$ имеет место осцилляция величины $Q(T)$.

При $T \rightarrow T_c$ $\varphi_0(T) \rightarrow 0$ и $Q(T \rightarrow T_c) \rightarrow 0$, т.е. имеет место делокализация заряда, поскольку, в свою очередь, делокализуется сам солитон. При $\varphi_0 \rightarrow 0$ $\xi_0 \rightarrow \infty$, где ξ_0 - ширина солитона. Фермионные моды и бозонные моды расцепятся, что и ведет к нулевому ожидаемому величине Q на солитоне.

Рассмотрим (4.23) при конечных значениях α . Первоначально ограничимся пределом $T \rightarrow 0$. При этом рассмотрим три области значений α . При $\alpha > m(\alpha)$, где $m(\alpha) = \sqrt{\varphi_0^2(\alpha) + \epsilon^2}$, имеем

$$Q(\alpha > m) = \frac{2}{\pi} \left[\operatorname{arctg} \frac{\varphi_0}{m-\epsilon} + \operatorname{arctg} \left(\frac{\varphi_0}{m+\epsilon} \tanh \frac{1}{2} \operatorname{arcsch} \frac{\alpha'}{m} \right) - \operatorname{arctg} \frac{\alpha'}{\varphi_0} \right], \quad (4.26)$$

где $\alpha' = \sqrt{\alpha^2 - m^2}$.

В области $\epsilon < \alpha < m(\alpha)$

$$Q(\epsilon < \alpha < m) = \frac{2}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{\varphi_0}{m-\epsilon}, \quad (4.27)$$

и, наконец, при $0 < \alpha < \epsilon$

$$Q(0 < \alpha < \epsilon) = -1 + \frac{2}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{\varphi_0}{m-\epsilon}. \quad (4.28)$$

Отметим, что в (4.27), (4.28) исчезла зависимость от α .

Аналогичные соотношения несложно получить для отрицательных α , причем при $\epsilon = 0$ имеет место симметрия относительно точки $\alpha = 0$. В случае модели полиацетилена и ГН $\epsilon = 0$, и зависимость представлена на рис.28. В модели φ_F^4 имеет место плавная кривая (рис.29).

При $\epsilon \neq 0$ см. рис.30. Если рассмотреть конечные температуры, то в пределе $\alpha \gg T$ результаты останутся прежними, а при $\alpha \rightarrow 0$

$Q(0, T) \rightarrow 0$, так что кривая на рис.30 слегка изменится (см.рис.31).

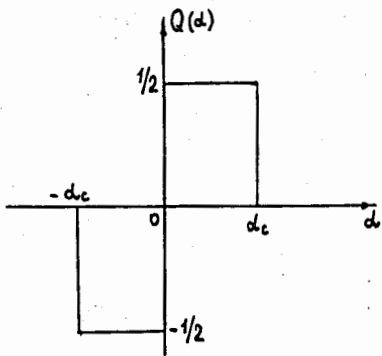


Рис. 28

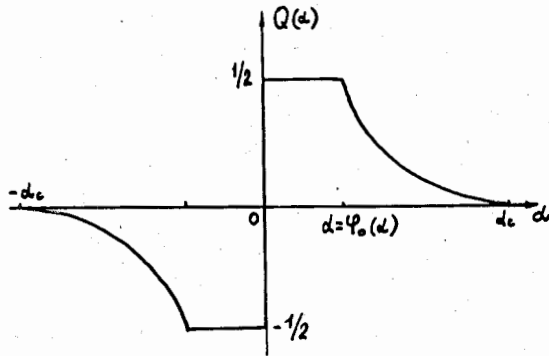


Рис. 29

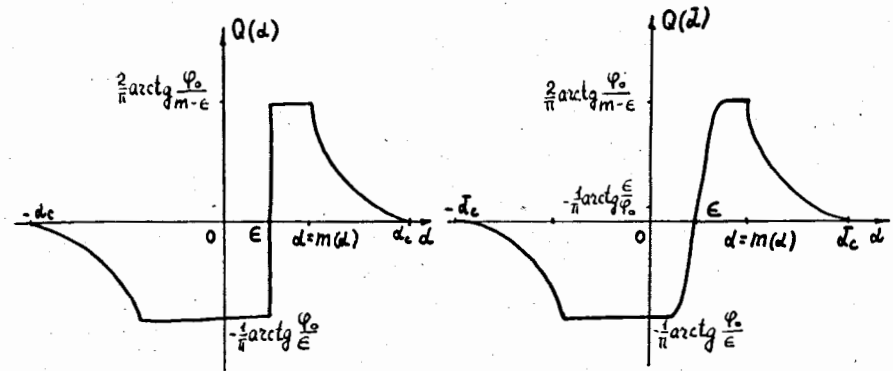


Рис. 30

Рис. 31

Отметим, что полученные результаты имеют достаточно ясную физическую интерпретацию. При $\epsilon = 0$ и $T = \alpha = 0$ солитонный уровень формируется из половины состояния, отщепленного от зоны проводимости и половины - от валентной зоны (моря Ферми). При этом имеет место вырождение, и заряд солитона равен $\pm |e|/2$. При наличии спина у фермиона дробление заряда скрыто, и имеет место солитоны со спином $1/2$, но без заряда, и с зарядом $\pm |e|$, но без спина. При $\alpha > m(\alpha)$ происходит заполнение зоны проводимости (опустошение валентной зоны). При этом заряд, локализованный на солитоне, "истощается". При критических значениях T_c, d_c солитоны исчезают, и нет никакой локализации заряда.

В [102] рассматривается фермионный заряд, связанный с существованием монополярных решений в четырехмерных (3+1) неабелевых калибровочных теориях. Общие свойства, отмеченные в данной главе для случая двух измерений, сохраняются для четырехмерных моделей. На этом мы закончим обзор дробных фермионных зарядов и перейдем к изучению перехода диэлектрик - металл в полиацетилена.

□

ПЕРЕХОД ДИЭЛЕКТРИК - МЕТАЛЛ В ПОЛИАЦЕТИЛЕНЕ

В настоящей главе мы более детально остановимся на поведении полиацетилена при высокой концентрации примеси.

§ 17. Экспериментальные данные

Электрические и магнитные свойства образцов $(\text{CH})_x$ представлены в гл. I. Весьма примечательными являются оптические свойства легированного $(\text{CH})_x$. На рис. 32 представлен спектр поглощения транс-полиацетилена при различных концентрациях примеси ^{/106/}, в качестве примеси используется AsF_5 .

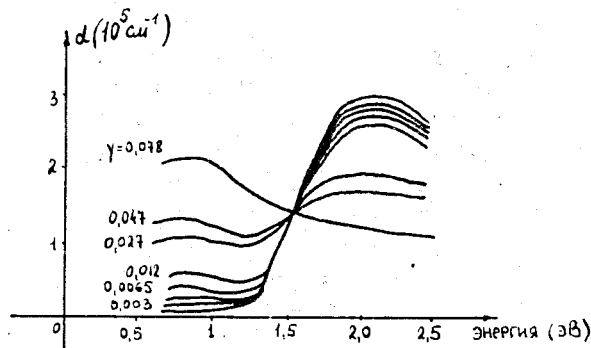


Рис. 32

α - коэффициент оптического поглощения. При $\gamma = 0,078$ межзонное поглощение отсутствует, т.е. дельта в электронном спектре исчезает, однако не обнаруживается и согласия с теорией оптического поглощения Друде, характерного для нормальных металлов.

Среди множества работ по исследованию термоэлектрических свойств выделим ^{/107/}. Экспериментальные данные в области высоких концентраций согласуются с поведением простого металла с некоторым отличием в деталях. Делается важный вывод, что имеет место металл с полузаполненной зоной, причем транспорт существенно одномерен. В случае примеси AsF_5 в металлической фазе альтернирование связей отсутствует, а для FeCl_3 и I , по-видимому, ситуация более сложная, что может быть связано с нарушениями, обусловленными атомами примеси.

В настоящее время имеется ряд объяснений эффекта металлизации цепочек транс- $(\text{CH})_x$. Имеет смысл выделить два основных механизма: а) солитонный и б) кластерный, при котором нет необходимости в солитонной картине вообще. Необходимо отметить, что подход, исключавший солитоны, в транс- $(\text{CH})_x$, развивался с работ ^{/27,28/} и достаточно аргументирован ^{/22,64/}. Имеет смысл остановиться на полемике, связанной с двумя точками зрения более подробно.

Прежде всего, отметим, что стандартная методика ^{/1,2/} позволяет синтезировать образцы цис- $(\text{CH})_x$. При внесении примеси в цис- $(\text{CH})_x$ необходимо учитывать цис-транс изомеризацию. Так, при 12% примеси AsF_5 линии цис- $(\text{CH})_x$ в рамановском спектре разрушаются, а имеются линии транс- $(\text{CH})_x$ ^{/19/}. В области концентраций $0,02 < \gamma < 0,05$ преобладает цис-поведение. Для примеси иода I ситуация более неясна. Исключить эффект изомеризации можно путем тепловой обработки цис- $(\text{CH})_x$, в результате чего получается транс- $(\text{CH})_x$. Первым свидетельством против солитонной картины явились данные работы ^{/27/}, где исследовалась проводимость и магнитная восприимчивость образцов цис- $(\text{CH})_x$, как чистых, так и легированных AsF_5 , а также чистого транс- $(\text{CH})_x$. Было сделано три принципиальных вывода:

- 1) Спиновая восприимчивость цис- $(\text{CH})_x$ возрастает с ростом концентрации примеси и имеет характер восприимчивости Паули.
- 2) Предполагается, что результаты по цис- $(\text{CH})_x$ применимы к образцам транс- $(\text{CH})_x$. Отсутствие изменения магнитной восприимчивости χ в области малых концентраций в транс- $(\text{CH})_x$ (см. рис.7) объясняют недостаточной чувствительностью измерительных приборов, поскольку возрастание χ в транс- $(\text{CH})_x$ должно быть аналогичным цис- $(\text{CH})_x$, т.е. иметь величину порядка $2,4 \cdot 10^{-7} \frac{\text{emu}}{\text{mole}}$, тогда как в чистом транс- $(\text{CH})_x$ $\chi \approx 1,2 \cdot 10^{-6}$, что в десять раз выше, чем в чистом цис- $(\text{CH})_x$. В ^{/27/} утверждается, что заряженные немагнитные солитоны не требуются для объяснения проводимости в транс- $(\text{CH})_x$.

3) Утверждается, что примесь, вносимая в образцы полиацетилена, распределена неоднородно и уже при концентрации 0,7% (с примесью AsF_5) образуются высокопроводящие области ("капли"). Проводимость при этом заключается в туннелировании между металлическими областями, тогда как переход диэлектрик - металл связан с достижением порога перекрывания металлических "капель", после которого имеет место уже металлический континуум.

В ^{/22/} эти выводы подтверждаются рядом других экспериментальных данных. В ^{/22,64/} обсуждаются различные измерения в образцах транс- $(\text{CH})_x$ и даны аргументы против солитонной картины. Вообще говоря, требуются новые более тщательные экспериментальные данные, позволяющие отдать предпочтение какой-либо картине.

§ 18. Теоретические модели

Соответственно двум подходам имеются различные интерпретации перехода диэлектрик - металл в полиацетилене. Как уже отмечалось, в ^{/22/} предложена модель металлического острова ("капли"). Неоднородность размещения внедренной примеси приводит к образованию металлических областей с относительно высокой концентрацией примеси, разделенных полупроводящими областями. Внутри металлических областей отсутствует альтернирование связей, так что солитонов там нет. С ростом концентрации примеси размер металлических областей увеличивается, до тех пор, пока не будет достигнут порог перекрывания. Отметим, что в полупроводящих областях допускаются солитонные возбуждения. Теоретически модель имеет общую аналогию с моделями, используемыми для описания гранулярных металлов. В ^{/108/} представлены новые данные по проводимости полиацетилена с примесью AsF_5 . Результаты согласуются с расчетами ^{/110/} для модели, включающей высокопроводящие сегменты, разделенные диэлектриком.

В рамках солитонной картины предложено несколько объяснений перехода диэлектрик - металл. Прежде всего предполагается, что при увеличении числа примесных атомов растет число солитон - антисолитонных пар в цепочке, так что образуется солитонная подрешетка, модулирующая димеризованную решетку атомов (см. рис. 33).

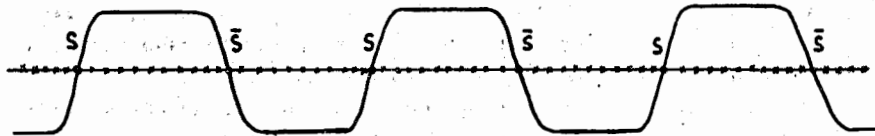


Рис. 33

При этом в центре энергетической щели имеет место узкая примесная зона. Солитонная подрешетка создает слабый экспоненциально затухающий обменный потенциал ^{/111,112/} между солитами. С ростом концентрации носителей модулированная димеризованная решетка непрерывно переходит в несоизмеримую пайерсовскую решетку, и примесная зона расширяется (см. рис.15), образуя две пайерсовские щели. Проводимость

осуществляется по примесной зоне и носит фреilihовский характер. В ^{/109/} учтен также эффект мецепочечной связи и влияние поля, создаваемого примесным атомом.

В ^{/119/} рассмотрено взаимодействие между солитами и солитон-фононное взаимодействие. Получена критическая концентрация, при которой солитонная решетка "течет" $n_c = a_0^2 / \pi^2 \xi_0^2$, (где a_0 - постоянная решетки, ξ_0 - ширина солитона) согласующаяся с экспериментальными данными по транс-(CH)_x. В ^{/113/} учтено также взаимодействие солитонов с примесью. Мы не останавливаемся на других интересных исследованиях ^{/33,114-116/}, отсылая заинтересованных читателей к оригинальной литературе.

Численный расчет для континуальной модели полиацетилена (LI2) при произвольном заполнении зоны (близком, однако, к единице) приведен в ^{/69/}. Обобщение на случай конечной температуры и химического потенциала сделано в ^{/117/}.

Показано, что в общем случае имеет место решение самосогласованных уравнений

$$-i v_F \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} - \Delta(x) \sigma_z \Psi(x) = E \Psi(x), \quad (5.1)$$

$$\Delta(x) = -\lambda \pi v_F \sum_n \frac{f(E_n)}{E_n} \left(v_F \frac{\partial}{\partial x} + 2\Delta(x) \right) |u(x)|^2$$

(где $\Psi = \begin{pmatrix} \psi \\ \bar{\psi} \end{pmatrix}$, $f(E_n)$ - функция распределения Ферми) в виде

$$\Delta(x) = k v_F x \operatorname{sn}(\alpha x, k), \quad (5.2)$$

где $\operatorname{sn}(\alpha x, k)$ - эллиптическая функция Якоби. Решение (5.2) описывает солитонную решетку с плотностью солитонов

$$n_s = \frac{\alpha}{4K(k)}; \quad (5.3)$$

$K(k)$ - функция Макдональда. Параметры k и α определены таким образом, чтобы минимизировать термодинамический потенциал

$$\Omega(T, \alpha) = -2T \sum_n \ln \left(1 + e^{\frac{\epsilon - E_n}{T}} \right) + \int_0^L dx \frac{\Delta^2(x)}{\lambda v_F}; \quad (5.4)$$

L - длина цепочки.

В пределе $k \rightarrow 0$ решение (5.2) переходит в обычный синус, а при $k \rightarrow 1$ имеем стандартное солитонное нарушение $\Delta(x) = \Delta_0 \tanh x / \xi_0$.

Электронный энергетический спектр в поле $\Delta(x)$, определяемом посредством (5.2), получен в [117] и имеет вид, изображенный на рис. 15. Параметр k определяется через химический потенциал посредством соотношения

$$\alpha = \frac{2\Delta_0}{\pi} \frac{E(k')}{k'} \quad (5.5)$$

где $k' = \frac{2k}{1+k}$. Примечательно, что в пределе $k \rightarrow 1$ химический потенциал совпадает с энергией покоящегося кинка. Термодинамический потенциал равен [117, 21/]

$$\frac{\Omega}{L} = -\frac{1}{2a_0} \left(\pi t_0 + \frac{\Delta_0^2}{2\pi t_0} \frac{2-k'^2}{k'^2} + 2d \right) \quad (5.6)$$

и плотность примесных электронов

$$n = \frac{\Delta_0}{v_F k' K(k')} \quad (5.7)$$

Фазовая диаграмма для непрерывной модели (СН)_x построена в [117/] и имеет вид (рис.34)

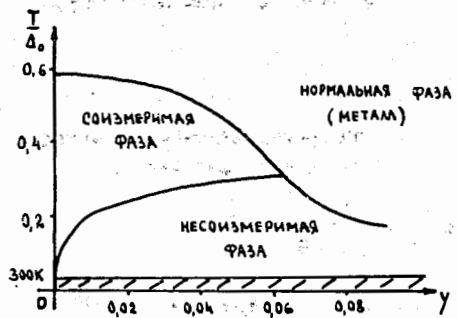


Рис.34

Таким образом, при комнатной температуре уже при малых концентрациях примеси ($\gamma \approx 10^{-6}$) несоизмеримая фаза оказывается энергетически предпочтительнее. Отметим, что в этой области температур нет перехода в нормальную фазу, т.е. щель в электронном спектре, и, соответственно, альтернирование связей имеет место при высоких концентрациях примеси. В [109/] исчезновение энергетической щели объяснено произвольным

расположением примеси. Отметим, что в основе этих результатов лежит достаточно ясная картина. Согласно теореме Пайерлса, одномерный металл с произвольным заполнением зоны Бриллюэна неустойчив относительно перехода в диэлектрическую фазу с (в общем случае), несоизмеримой волной зарядовой плотности. Этот факт и находит отражение на рис.34.

С другой стороны, исследование поляризационного оператора фононов (см., например, [31/]) показало, что при малом отклонении от полузаполненной зоны $\gamma \lesssim T_c/t_0$ предпочтительнее оказывается именно удвоение периода. Если при малых γ несоизмеримая фаза неустойчива относительно перехода в фазу солитонной решетки, то при $\gamma = \gamma_c$ снимается вырождение основного состояния, и солитонов в системе существовать не может. Численная оценка (3.52) приводит к следующему результату: при $0,7 \text{ эВ} < \Delta_0 < 0,9 \text{ эВ}$ и $W = 10 \text{ эВ}$ критическая концентрация

$$0,063 < \gamma_c < 0,09, \text{ где}$$

$$\gamma_c = \frac{n_c}{n_0} = \frac{2\sqrt{2}\Delta_0}{\pi W} \quad (5.8)$$

и $n_0 = 1/a_0$ - плотность \tilde{n} -электронов в чистом транс-(СН)_x. Отметим хорошее совпадение значения γ_c с экспериментальными данными. Как отмечалось выше, при $\gamma \lesssim T_c/t_0 = 0,16$ для модели транс-(СН)_x, предпочтительнее оказывается удвоение периода. Таким образом, с одной стороны при $\gamma > \gamma_c$ нет солитонов, а, следовательно, и солитонной решетки. В то же время несоизмеримая фаза еще не является доминирующей, и возможен разрыв фазовой диаграммы (см. рис.35),

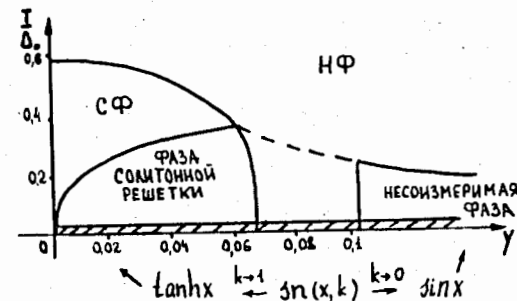


Рис.35

так что в некоторой области концентраций даже при низких температурах возможно существование металлической фазы. Этот качественный вывод позволяет объяснить как металлизацию цепочек $(\text{CH})_x$ при $\gamma > \gamma_c$, так и уменьшение проводимости при дальнейшем увеличении концентрации примеси, связанное с переходом в несоизмеримую фазу.

Таким образом, если достаточно протяженный участок цепочки транс- $(\text{CH})_x$ имеет избыток электронов (дырок) выше критической величины, то может наступить металлизация. При этом альтернирование связей отсутствует, и все π -электроны участвуют в проводимости (происходит "разрыв" π -связи) ^{/192/}. При $\gamma < \gamma_c$ основное состояние димеризовано, и имеет место солитонная решетка. При неоднородном распределении примеси "разрыв" π -связей будет происходить в отдельных протяженных областях с концентрацией, достигшей критического значения, что, вообще говоря, согласуется с моделью металлических островов ^{/22/}. Кроме того, согласно ^{/107/}, проводимость транс- $(\text{CH})_x$ при высоких концентрациях примеси существенно одномерна, что также согласуется с металлизацией одномерных нитей. В общем случае, по-видимому, возможно сосуществование в одном образце "металлических" цепочек и цепочек с солитонной решеткой. Это может быть связано как с видом примесных атомов, так и со способом допирования.

Если перенести эти результаты на цис- $(\text{CH})_x$, то критическая концентрация имеет величину $\gamma_c \approx 0,12$. При этом в спектре имеет место энергетическая щель Δ_e . Согласно ^{/19/}, именно при $\gamma \approx 0,12$ линия цис- $(\text{CH})_x$ в легированном образце полностью исчезает. Однако если в легированном транс- $(\text{CH})_x$ щель в этой области концентраций отсутствует, то в легированном цис- $(\text{CH})_x$, перейдем в транс- $(\text{CH})_x$, должна остаться димеризационная щель Δ_e . Таким образом, вышеуказанный механизм перехода диэлектрик - металл может быть весьма важен для физики легированных квазиодномерных полупроводников. В главе III исследовалась также возможность восстановления симметрии при повышении температуры системы. Полученный результат $T_c = 0,4$ эВ (≈ 4500 К) в случае полиацетилена означает, что при всех реальных температурах имеет место пайерлсовская димеризация в чистом транс- $(\text{CH})_x$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Отметим ряд решающих аспектов, обуславливающих непрерывно возрастающий интерес к физике полиацетилена.

Прежде всего, необходимо указать на огромные перспективы практического использования полиацетилена в качестве легкого металла. Экспериментальные исследования образцов $(\text{CH})_x$ подтверждают такую возможность.

Теоретическое описание полиацетилена опирается на модель, имеющую аналог в РКТП. Это, с одной стороны, открывает большие возможности в исследовании нетривиальных гипотез теории поля, поскольку реальные образцы $(\text{CH})_x$ допускают их экспериментальную проверку. С другой стороны, методы РКТП могут быть эффективно использованы при расчетах в модели $(\text{CH})_x$. Отметим основные успехи, достигнутые в этом направлении:

1) Двумерные модели РКТП допускают существование объектов с нетривиальной топологией. Влияние таких объектов на физические свойства рассматриваемых систем весьма существенно, поскольку сама структура основного состояния изменяется в присутствии солитонов. В полиацетилене имеются экспериментальные данные, подтверждающие существование солитонов.

2) Эффект спонтанного нарушения симметрии присутствует во многих физически содержательных моделях РКТП. Возможность восстановления симметрии при высоких температурах и (или) плотностях фермионов имеет важные следствия в космологии, астрофизике, квантовой хромодинамике. В полиацетилене восстановление симметрии означает исчезновение пайерлсовской димеризации и способствует переходу в металлическое состояние.

3) Возможность дробления фермионного заряда широко обсуждается в РКТП. Отметим, что вырождение основного состояния системы и, как следствие, наличие топологических солитонов с необходимостью ведут к дробным фермионным зарядам. В полиацетилене дробление "скрыто" удвоением степеней свободы из-за наличия спина у электронов. Это приводит к солитонам с необычным соотношением заряда и спина, что находит экспериментальное подтверждение (см. гл. I).

Теоретические исследования полиацетилена продолжают в течение шести последних лет и еще далеки от своего завершения. Предстоит большая и плодотворная работа как в изучении свойств полиацетилена, так и в физике одномерных проводников в целом.

Авторы выражают искреннюю благодарность всем слушателям настоящих лекций и прежде всего профессору В.Г.Маханькову за полезные обсуждения затронутых вопросов.

□

Литература

1. Shirakawa H., Ikeda S., Ito T., Polym J., 1973, 4, p.460; J.Polym.Sci. Polym.Chem.Ed., 1974, 12, p. 11.
2. Ito T., Shirakawa H., Ikeda S. J.Polym.Sci.Polym.Chem.Ed., 1975, 13, p.1943.
3. Fincher C.R. et al. Solid State Commun., 1978, 27, p.489.
4. Fincher C.R. et al. Phys.Rev., 1979, B19, p.4140.
5. Suzuki N. et al. Phys.Rev.Lett., 1980, 45, p.1209, 1463.
6. Fincher C.R. et al. Phys.Rev., 1979, B20, p.1589.
7. Grant P.M., Patra I.P. Solid State Commun., 1979, 29, p.225.
8. Fincher C.R. et al. Phys.Rev.Lett., 1982, 48, p.100.
9. Yannoni C.S., Clarke T.C. Phys.Rev.Lett., 1983, 51, p.1191.
10. Овчинников А.А., Украинский И.И., Квенцель Г.Ф. УФН, 1973, 108, с.81.
11. Fukutome H., Sasai M. progr.theor.Phys., 1982, 67, p.41.
12. Weinberger B.H. et al. J.Chem.Phys., 1980, 72, p.4749.
13. Nechtschein M. et al. Phys.Rev.Lett., 1980, 44, p.356.
14. Robin P. et al. Phys.Rev., 1983, B27, p.3938.
15. Blanchet G.B., Fincher C.R., Heeger A.J. Phys.Rev.Lett., 1983, 51, p.2132.
16. Blanchet G.B., Fincher C.R., Chung T.-C., Heeger A.J. Phys. Rev.Lett., 1983, 50, p.1938.
17. Vardeny Z., Orenstein J., Baker G.L. Phys.Rev.Lett., 1983, 50, p.2032; J.Physique, Coll., 1983, 44, p.C3-325.
18. Orenstein J., Baker G.L., Vardeny Z. J.Physique, coll., 1983, 44, p.C3-407.
19. Kuzmany H. phys.stat.sol.(b), 1980, 97, p.521.
20. Baeriswyl D. Physica, 1983, B117/118, p.617.
21. Streitwolf H.W. phys.stat.sol.(b), 1985, 127, p.11.
22. Tomkiewicz Y. et al. Phys.Rev., 1981, B24, p.4348.
23. Chiang C.K. et al. Phys.Rev.Lett., 1977, 39, p.1098.
24. Khinger K. et al. J.Physique, 1983, 44, p.C3-115.
25. Ikehata S. et al. Phys.Rev.Lett., 1980, 45, p.1123.
26. Pao M. et al. int: Physics in One Dimension, Ed. J. Bernasconi and T. Schneider, Springer-Series in Solid State Sciences, 1981, v.23, p.218.
27. Tomkiewicz Y. et al. Phys.Rev.Lett., 1979, 43, p.1532.
28. Lauchlan L. et al. Phys.Rev., 1981, B24, p.3701.
29. Etemad S. et al. Solid State Commun., 1981, 40, p.75.
30. Пайерлс Р. Квантовая теория твердых тел. ИЛ., 1956, с.129-133.
31. Булаевский Л.Н. УФН, 1975, 115, с.263.

32. Rice M.J. Phys.Lett., 1979, A71, p.152.
33. Rice M.J., Timonen J. Phys.Lett., 1979, A73, p.368.
34. Su W.P., Schrieffer J.R., Heeger A.J. Phys.Rev.Lett., 1979, 42, p.1698.
35. Su W.P., Schrieffer J.R., Heeger A.J. Phys.Rev., 1980, B22, p.2099.
36. Ooshika Y. J.Phys.Soc.Japan, 1957, 12, p.1238, 1246.
37. Longuet-Higgins H.C., F.R.S., Salem L. Proc. Roy.Soc., 1959, A251, p.172.
38. Chiang C.K. et al. J.Chem.Phys., 1978, 69, p.5098.
39. Weinberger B.H. et al. Phys.Rev., 1979, B20, p.223.
40. Saito R., Kamimura H. J.Phys.Soc., Japan, 1983, 52, p.407.
41. Subbaswamy K.R., Grabowski M. Phys.Rev., 1981, B24, p.2168.
42. Kivelson S., Heim D.E. Phys.Rev., 1982, B26, p.4278.
43. Hirsch J.E. Phys.Rev.Lett., 1983, 51, p.296.
44. Mazumdar S., Dixit S.N. Phys.Rev.Lett., 1983, 51, p.292.
45. Dixit S.N., Mazumdar S. Phys.Rev., 1984, B29, p.1824.
46. Hirsch J.E., Fradkin E. Phys.Rev.Lett., 1982, 49, p.402; Phys.Rev., 1983, B27, p.1680.
47. Бразовский С.А., Дзялошинский И.Е., Кирова Н.Н. ЖЭТФ, 1981, 81, с.2279.
48. Бразовский С.А., Дзялошинский И.Е., Кричевер И.М. ЖЭТФ, 1982, 83, с.389.
49. Бразовский С.А. Письма в ЖЭТФ, 1978, 28, с.656.
50. Бразовский С.А. ЖЭТФ, 1980, 78, с.677.
51. Takayama H., Lin-Liu Y.R., Maki K. Phys.Rev., 1980, B21, p.2388.
52. Horowitz B. Phys.Rev., 1980, B22, p.1101.
53. Осипов В.А., Федянин В.К. ОИЯИ, П17-64-138, Дубна, 1984.
54. Маханьков В.Г., Федянин В.К., Якушевич Л.В. ОИЯИ, П17-10448, Дубна, 1977; Phys.Lett., 1977, A61, p.256.
55. Бразовский С.А., Кирова Н.Н. Письма в ЖЭТФ, 1981, 33, с.6.
56. Dashen R.F., Hasslacher B., Neveu A. Phys.Rev., 1975, D12, p.2443.
57. Campbell D.K., Bishop A.R. Phys.Rev., 1981, B24, p.4859.
58. Campbell D.K., Bishop A.R. Nucl. Phys., 1982, B200 FS4, p.297.
59. Leblans Y., Matsumoto H., Umezawa H., Mancini F. Phys.Rev., 1984, B30, p.5958.
60. Etemad S. et al. J.Physique, 1983, 44, p.C3-413.
61. Onodera Y., Okuno S. J.Phys.Soc.Japan, 1983, 52, p.2478.
62. Flood J.D., Ehrenfreund E., Heeger A.J., MacDiarmid A.G. Solid State Commun., 1982, 44, p.1055.

63. Ball R., Su W.P., Schrieffer J.R. J. Physique, 1983, 44, p. C3-429.
64. Baeriswyl D. Proc. 3rd General Conf. Cond. Matter Division EPS (Lausanne 1983).
65. Hubbard J. Proc. Roy. Soc., 1963, A276, p. 238.
66. Lindner V., Fedyanin V.K. phys. stat. sol. (b), 1978, 89, p. 123; 1979, 95, K83.
67. Ukrainskii I.I. In: Wissenschaftliche Berichte (ZFW), 29, Dresden, 1984, p. 69.
68. Бразовский С.А., Горьков Л.П., Лебедев А.Г. ЖЭТФ, 1982, 83, с. 1198.
69. Бразовский С.А., Гордунин С.А., Кирова Н.Н. Письма в ЖЭТФ, 1980, 31, с. 486.
70. Бразовский С.А., Матвеев С.И. ЖЭТФ, 1984, 87, с. 1400.
71. Bishop A.R. et al. Phys. Rev. Lett., 1984, 52, p. 671.
72. Fedyanin V.K., Makhankov V.G. Physica Scripta, 1983, 28, p. 221; Phys. Rep., 1984, 104, p. 1.
73. Gross D.J., Neveu A. Phys. Rev., 1974, D10, p. 3235.
74. Jackiw R., Rebbi C. Phys. Rev., 1976, D13, p. 3398.
75. Nambu Y., Jona-Lasinio G. Phys. Rev., 1961, 122, p. 345.
76. Volkov M.K. Ann. Phys., N.Y., 1984, 157, p. 282.
77. Campbell D.K., Liao Y.-T. Phys. Rev., 1976, D14, p. 2093.
78. Dashen R.F., Hasslacher B., Neveu A. Phys. Rev., 1975, D11, p. 3424.
- 79a. Боголюбов Н.Н. Изв. АН СССР, сер. физ., 1947, II, с. 77; Вестник МГУ, 1947, 7, с. 43.
- б. Боголюбов Н.Н. В кн.: Статистическая физика и квантовая теория поля, "Наука", 1973, с. 7-80.
- в. Боголюбов Н.Н. ОИЯИ, P-781, Дубна, 1961.
- г. Боголюбов Н.Н. ЖЭТФ, 1958, 34, с. 58; Physica, 1960, 26, p. 1.
80. Weinberg S. Phys. Rev., 1974, D9, p. 3357.
81. Dolan L., Jackiw R. Phys. Rev., 1974, D9, p. 3320.
82. Киржиц Д.А., Линде А.Д. ЖЭТФ, 1974, 67, с. 1263; Ann. Phys., N.Y., 1976, 101, p. 195; Linde A.D. Rep. Progr. Phys., 1979, 42, p. 389.
83. Harrington B.J., Park S.-Y., Yildiz A. Phys. Rev., 1975, D11, p. 1472.
84. Криве И.В., Рожавский А.С. ЖЭТФ, 1981, 81, с. 1811.
85. Bernard C.W. Phys. Rev., 1974, D9, p. 3312.
86. Dashen R.F., Ma S., Rajaraman R. Phys. Rev., 1975, D11, p. 1499.
87. Harrington B.J., Yildiz A. Phys. Rev. Lett., 1974, 33, p. 324.
88. Harrington B.J., Yildiz A. Phys. Rev., 1975, D11, p. 1705.
89. Fedyanin V.K., Osipov V.A. In: III Int. Symp. on Selected Problems of Statical Mechanics, Dubna, 1984, D17-84-850, p. 276.

90. Niemi A.J., Semenoff G.W. Nucl. Phys., 1984, B230 FS10, p. 181.
91. Takayama H., Maki K. Phys. Rev., 1979, B20, p. 3223, 5009.
92. Осипов В.А., Федянин В.К. Краткие сообщения ОИЯИ, № 4-84, Дубна, 1984, с. 33.
93. Rice M.J., Strässler S. Solid State Commun., 1973, 13, p. 1389, 1931.
94. Schneider T., Stoll E. Phys. Rev., 1976, E13, p. 1216.
95. Su W.P., Schrieffer J.R. Phys. Rev. Lett., 1981, 46, p. 738.
96. Goldstone J., Wilczek F. Phys. Rev. Lett., 1981, 47, p. 986.
97. Kivelson S., Schrieffer J.R. Phys. Rev., 1982, B25, p. 6447.
98. Frishman Y., Horowitz B. Phys. Rev., 1983, B27, p. 2565.
99. Kivelson S. Phys. Rev., 1983, B28, p. 2653.
100. Yamagishi H. Phys. Rev. Lett., 1983, 50, p. 458.
101. Jackiw R., Semenoff G. Phys. Rev. Lett., 1983, 50, p. 439.
102. Midorikawa S. Progr. theor. Phys., 1983, 69, p. 1831.
103. Niemi A.J., Semenoff G.W. Phys. Lett., 1984, B135, p. 121.
104. Soni V., Baskaran G. Preprint TH 3869-CERN, 1984.
105. Witten E. Nucl. Phys., 1979, B160, p. 57; 1983, B223, p. 422, 433.
106. Feldblum A. et al. Phys. Rev., 1982, B26, p. 815.
107. Park Y.W., Han W.K., Choi C.H., Shirakawa H. Phys. Rev., 1984, B30, p. 5847.
108. Audenaert M. Phys. Rev., 1984, B30, p. 4609.
109. Mele E.J., Rice M.J. Phys. Rev., 1981, B23, p. 5397.
110. Sheng P. Phys. Rev., 1980, B21, p. 2180.
111. Horowitz B. Phys. Rev. Lett., 1981, 46, p. 742.
112. Bak P., Pokrovsky V.L. Phys. Rev. Lett., 1981, 47, p. 958.
113. Akshenov V.L., Didyk A.Y., Žakula R., JINR, E17-84-483, Dubna, 1984.
114. Horowitz B. Solid State Commun., 1980, 34, p. 61.
115. Bredas J.L., Chance R.R., Silbey R. J. Phys. Chem., 1981, 85, p. 756.
116. Bužka B.R. IC report, IC-82-48, Trieste, 1982.
117. Mertshing J., Fischbeck H.J. Phys. stat. sol. (b), 1981, 103, p. 783.

Рукопись поступила в издательский отдел
14 ноября 1985 года.

ПЕРЕЧЕНЬ

лекций, вышедших с 1974 по 1985 гг.

Фаустов Р.Н. Связанная система частиц в квантовой электродинамике. Вып.1. ОИЯИ, Дубна, 1974.

Синаев А.Н. Современные аппаратные системы модульной структуры, используемые при создании измерительно-вычислительных комплексов /КАМАК, ВЕКТОР/. Вып.2. ОИЯИ, 8507, Дубна, 1975.

Волков Д.В. Кварки как следствие дуальности. Вып.3. ОИЯИ, P2-8765, Дубна, 1975.

Пальчик М.Я., Фрадкин Е.С. Введение в теорию конформно-инвариантных квантовых полей. Вып.4. ОИЯИ, 2-8874, Дубна, 1975.

Замори Э. Микропроцессоры. Вып.5. ОИЯИ, P10-8852, Дубна, 1975.

Биленький С.М. Вопросы физики нейтрино высоких энергий. Вып.6. ОИЯИ, 2-9026, Дубна, 1975.

Малкин И.А., Манько В.И. Инварианты, когерентные состояния и динамические симметрии квантовых систем. Вып.7. ОИЯИ, P2-9228, Дубна, 1975.

Волков М.К., Первушин В.Н. Квантовая теория поля с киральным лагранжианом и физика мезонов низких энергий. Вып.8. ОИЯИ, P2-9390, Дубна, 1976.

Басиладзе С.Г. Интегральные схемы с эмиттерной связью и их применение в наносекундной ядерной электронике. Вып.9. ОИЯИ, 13-9744; Дубна, 1976.

Аникин С.А. и др. Перенормированные составные поля в квантовой теории поля. Вып.10. ОИЯИ, P2-10528, Дубна, 1977.

Шляпников П.В. Множественные процессы и инклюзивные реакции. Вып.11. ОИЯИ, P2-10681, Дубна, 1977.

Капусцик Э. Галилеева инвариантность в теории поля. Вып.12. ОИЯИ, P2-10677, Дубна, 1977.

Бутцев В.С. Явление возбуждения высокоспиновых ядерных состояний и механизм поглощения отрицательных p -мезонов. В. 13, ОИЯИ, P15-10847, Дубна, 1977.

Валуев Б.Н. Применение алгебры Клиффорда к решению задачи Изинга - Онсагера. Вып.14. ОИЯИ, P17-11020, Дубна, 1977.

Капусцик Э. Нестандартные алгебры квантово-механических наблюдаемых. Вып.15. ОИЯИ, P4-11497, Дубна, 1978.

Блохинцев Д.И. Квантовая механика. Лекции по избранным вопросам. Вып.16. ОИЯИ, P2-11728, Дубна, 1978.

Ширикова Н.Ю. Начинаям работать на ЭВМ CDC-6500. Вып.17. ОИЯИ, P11-11739, Дубна, 1978.

Барбашов Б.М., Нестеренко В.В. Непрерывные симметрии в теории поля. Вып.18. ОИЯИ, P2-12029, Дубна, 1978.

Некоторые проблемы физики высоких энергий /сборник/. Вып.19. ОИЯИ, P2-12080, Дубна, 1978.

Басиладзе С.Г. Электронная регистрирующая аппаратура физического эксперимента. Вып.20. ОИЯИ, P13-12151, Дубна, 1979.

Ефремов А.В., Радюшкин А.В. Партонь, жесткие процессы и квантовая хромодинамика. Вып.21. ОИЯИ, P2-12803, Дубна, 1979.

Говорков А.Б. Введение в теорию кварков. Вып.22. ОИЯИ, P2-12803, Дубна, 1979.

Говорков А.Б. Цветные кварки и глюоны. Вып.23. ОИЯИ, P2-80-6, Дубна, 1980.

Исаев П.С. Глубоконеупругое рассеяние лептонов на нуклонах. Партонная модель нуклона. Вып.24. ОИЯИ, P2-80-325, Дубна, 1980.

Казakov Д.И., Ширков Д.В. Суммирование асимптотических рядов в квантовой теории поля. Вып.25. ОИЯИ, P2-80-462, Дубна, 1980.

Ососков Г.А. Применение методов распознавания образов в физике высоких энергий. Вып.26. ОИЯИ, P10-83-187, Дубна, 1983.

Малышев В.А. Элементарное введение в математическую физику бесконечно-частичных систем. Вып.27. ОИЯИ, P17-83-363, Дубна, 1983.

Савушкин Л.Н., Фоменко В.Н. Введение в мезонную теорию ядерных взаимодействий и ядерных систем. Вып.28. ОИЯИ, P4-83-369, Дубна, 1983.

Биленький С.М. Осцилляции нейтрино. Вып.29. ОИЯИ, P2-83-441, Дубна, 1983.

Бужек В. Введение в метод стохастического квантования. Вып.30. ОИЯИ, P2-84-419, Дубна, 1984.

Шумовский А.С., Юкалов В.И. Фазовые состояния и переходы. Вып.31. ОИЯИ, P17-85-676, Дубна, 1985.

Владимиров А.А. Введение в квантовые интегрируемые системы. Метод R-матрицы. Вып.32. ОИЯИ, P17-85-742, Дубна, 1985.