ОСОБЕННОСТИ ПОВЕДЕНИЯ ВОЛН ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ В КВАЗИОДНОМЕРНЫХ ПРОВОДНИКАХ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

С. Н. Артеменко*

Институт радиотехники и электроники Российской академии наук 103907, Москва, Россия

Поступила в редакцию 30 сентября 1996 г.

На основе микроскопической теории исследуются свойства волны зарядовой плотности при низких температурах. Особенностью поведения волны зарядовой плотности при низких температурах является большой сдвиг химического потенциала вблизи ее дефектов (солитонов, дислокаций, центров пиннинга), что приводит к увеличению проводимости кристалла вдоль цепочек при неподвижной волне зарядовой плотности и определяет ее динамику. Выведены уравнения динамики волны зарядовой плотности, с их помощью оценены скорости движения 2*π*-солитонов вдоль проводящих цепочек. Показано, что солитоны обладают малой подвижностью и их дрейф не дает существенного вклада в проводимость. Большой сдвиг химического потенциала около центров сильного пиннинга может привести к значительному увеличению линейной проводимости вдоль проводящих цепочек.

1. ВВЕДЕНИЕ

Как известно, в квазиодномерных проводниках ниже температуры пайерлсовского перехода образуется волна зарядовой или спиновой плотности, в результате чего проводник переходит в полупроводниковое (или в полуметаллическое, как NbSe₃) состояние [1]. Кинетические свойства веществ с волнами зарядовой и спиновой плотности очень похожи, практически все утверждения, которые мы сделаем о волнах зарядовой плотности могут быть отнесены и к волнам спиновой плотности. В пайерлсовском состоянии одноэлектронные возбуждения (электроны и дырки) сосуществуют с деформируемым подвижным электронным кристаллом — волной зарядовой плотности. Если к кристаллу приложено электрическое поле E выше порогового E_T , величина которого зависит от концентрации примесей и температуры, волна зарядовой плотности начинает скользить по кристаллу и вносить вклад в ток, в результате чего проводимость кристалла с ростом электрического поля увеличивается на несколько порядков. При $E < E_T$ волна зарядовой плотности не может двигаться как целое и проводимость квазиодномерного проводника определяется одноэлектронными возбуждениями, что делает материал похожим на обычный полупроводник, с тем отличием, что деформация волны зарядовой плотности (например, в электрическом поле) приводит к изменению концентрации электронов и дырок, вследствие чего возмущения этой волны влияют на проводимость также и в полях ниже порогового. Вклад волны зарядовой плотности в проводимость может быть обусловлен не только ее движением как целого, но и движением ее нелинейных возбуждений — дефектов электронного кристалла — солитонов, дислокаций.

*E-mail: art@mail.cplire.ru

К настоящему времени достигнуто в целом хорошее понимание свойств проводников с волнами зарядовой плотности при относительно высоких температурах $T > T_P/3$ (см. обзоры в книге [2]), при которых упомянутые выше эффекты хорошо воспроизводятся и неплохо описываются в рамках представления о волне зарядовой плотности как об упругой среде, взаимодействие которой с примесями описывается теорией слабого (коллективного) пиннинга [3]. Свойства волн зарядовой плотности при более низких температурах поняты значительно хуже, чем при высоких температурах. При понижении температуры уменьшается энергия активации проводимости вдоль цепочек в полях ниже порогового, а энергия активации поперечной проводимости остается неизменной [4, 5], такое поведение часто объясняют вкладом движущихся дефектов волны зарядовой плотности, например, фазовых 2*π*-солитонов. Кроме того, наблюдается резкий рост порогового поля и появление зависимости энергии активации нелинейной проводимости от электрического поля, наблюдается широкий разброс параметров образцов, указывающий на увеличение роли дефектов при понижении температуры. При совсем низких температурах (например, для TaS₃ ниже 20 K) наблюдается максимум низкочастотной диэлектрической проницаемости [6-8], все большую роль начинают играть метастабильные состояния и возбуждения волн зарядовой плотности с малой энергией, а в электрических и термодинамических свойствах появляются эффекты, которые можно интерпретировать как проявление стекольных свойств волн зарядовой плотности [9]. Для объяснения подобных эффектов были предложены модели, основанные на существовании метастабильных состояний с различной координатной зависимостью фазы вблизи центров пиннинга и на переходах между этими состояниями [10–12]. Была также предложена интерпретация низкотемпературного максимума диэлектрической проницаемости как проявления релаксационной моды, связанной с примесным пиннингом [13]. В цитированных работах, однако, не учитывалась возможность большого сдвига химического потенциала от середины энергетической щели при деформации волны зарядовой плотности при низких температурах. Как было показано в [14] на примере солитонных доменных стенок в соизмеримой волне зарядовой плотности, такой сдвиг должен приводить к немонотонной температурной зависимости длины экранирования неоднородных возмущений волны зарядовой плотности, и в [15] была предложена основанная на такой температурной зависимости модель для объяснения поведения диэлектрической проницаемости при низких температурах, в которой деформации волны зарядовой плотности вызывались периодически расположенными центрами пиннинга. Согласно [16, 17] большой сдвиг химического потенциала возникает также в 2π -солитонах и вокруг центров пиннинга, причем в результате такого сдвига могут образовываться металлические островки, в которых химический потенциал попадает в область разрешенных состояний выше или ниже пайерлсовской щели. В результате структура и характерные размеры возмущений фазы оказываются сильно зависящими от температуры, а ролью одноэлектронных возбуждений нельзя пренебрегать даже при самых низких температурах. Это, в частности, приводит к температурной зависимости энергии не только фазовых, но и амплитудных солитонов [18].

Таким образом, для корректного описания роли волн зарядовой плотности в проводимости при низких температурах и, в частности, выяснения, могут ли играть 2π -солитоны (вакансии или лишние узлы электронного кристалла) и другие дефекты волн зарядовой плотности роль носителей заряда, требуются уравнения кинетики для волн зарядовой плотности и одноэлектронных возбуждений, учитывающие сильную деформацию этой волны вблизи дефектов и описывающие движение ее нелинейных возмущений. В настоящей работе мы выведем такие уравнения, отличающиеся от стандартных квазиклассических уравнений тем, что они учитывают возможность резких изменений фазы волны зарядовой плотности между соседними цепочками, а также возможность больших отклонений химического потенциала от середины щели. Таким образом, в приближении самосогласованного поля будут учтены нелинейные эффекты в кулоновском экранировании электрического поля, созданного плотностью заряда, возникающего при деформации волны зарядовой плотности. Выведенные уравнения будут применены для оценки скорости движения 2π -солитонов и их вклада в проводимость.

В наших расчетах мы будем полагать заряд электрона, постоянные Планка и Больцмана равными единице.

2. ИСХОДНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Для вывода уравнений движения для фазы волны зарядовой плотности и выражений для плотности тока мы воспользуемся уравнениями для функций Грина, проинтегрированных по компоненте импульса вдоль проводящих цепочек. Подобные уравнения были выведены в работах [20, 14] с помощью метода Келдыша для неравновесных процессов [19] для случая малых изменений всех величин на расстояниях порядка фермиевской длины волны $2\pi/p_F$ вдоль цепочек и в непрерывном пределе по координатам, перпендикулярным цепочкам. Подобные уравнения нетрудно обобщить и на случай больших разностей фаз волн зарядовой плотности между проводящими цепочками, который нам понадобится для исследования возмущений, локализованных на одной или нескольких цепочках. Для этого надо, не пользуясь разложением в ряд по малым градиентам в поперечном направлении, использованным в [14], перейти к узельному представлению Ванные по номерам цепочек подобно тому, как это было сделано с похожими уравнениями для слоистого сверхпроводника в [21]. Затем для простоты мы воспользуемся приближением сильной связи электрона на цепочке, т.е. ограничимся взаимодействием между ближайшими соседями, когда спектр в направлении, перпендикулярном цепочкам, имеет вид

$$\epsilon_{\perp} = 2t_{\perp}(\cos ap_y + \cos ap_z), \quad t_{\perp} \ll \Delta.$$

В результате мы получим уравнение для функций Грина, которые являются матрицами по временным индексам, введенным Келдышем, а также по индексу, относящемуся к двум листам поверхности Ферми квазиодномерного проводника при $+p_F$ и $-p_F$, и по номеру цепочки n:

$$\check{g} = \left(\begin{array}{cc} \hat{g}^R & \hat{g}^K \\ 0 & \hat{g}^A \end{array}\right),$$

где \hat{g}^R и \hat{g}^A — запаздывающая и опережающая функции Грина, а \hat{g}^K — введенная Келдышем функция Грина, содержащая информацию о функции распределения электронов. Матричные функции \check{g} удовлетворяют уравнению

$$iv\frac{d\check{g}_{nm}}{dx} + t_{\perp} \sum_{i} (A_{nn+i}\check{g}_{n+im} - \check{g}_{nm+i}A_{m+im}) + i\left(\sigma_{z}\frac{d\check{g}_{nm}}{dt_{1}} + \frac{d\check{g}_{nm}}{dt_{2}}\sigma_{z}\right) + (i\sigma_{y}\Delta_{n} - \Phi_{n}\sigma_{z})\check{g}_{nm} - \check{g}_{nm}(\sigma_{y}\Delta_{m} - \sigma_{z}\Phi_{m}) + \frac{i}{2}\nu_{f}\left[\sigma_{z}\check{g}_{nn}\sigma_{z}\check{g}_{nm} - \check{g}_{nm}\sigma_{z}\check{g}_{mm}\sigma_{z}\right] -$$

$$-\frac{i}{4}\nu_b \left[\sigma_x \check{g}_{nn} \sigma_x \check{g}_{nm} - \check{g}_{nm} \sigma_x \check{g}_{mm} \sigma_x + \sigma_y \check{g}_{nn} \sigma_y \check{g}_{nm} - \check{g}_{nm} \sigma_y \check{g}_{mm} \sigma_y\right] = 0, \tag{1}$$

где под произведением надо понимать свертку по времени и матричное произведение, *x* — координата вдоль цепочек, самосогласованный электрический потенциал появляется в уравнениях в виде кирально инвариантной комбинации с фазой

$$\Phi_n = \phi_n - rac{v}{2} rac{d arphi_n}{d x} - rac{1}{2} rac{d arphi_n}{d t},$$

 ϕ_n — матричный элемент электрического потенциала на функциях Ваннье цепочки n, Δ_n и φ_n — амплитуда и фаза параметра порядка на n-ой цепочке,

$$A_{nm} = \sigma_z \cos \frac{\varphi_n - \varphi_m}{2} + i \sin \frac{\varphi_n - \varphi_m}{2},$$

 σ_k — матрицы Паули, а суммирование в слагаемом с t_{\perp} производится по ближайшим соседям. Последние слагаемые в (1) описывают интеграл упругих столкновений, ν_f и ν_b — обратные времена рассеяния импульса вперед и назад, т.е. без переходов и с переходами между противоположными листами поверхности Ферми. Отметим, что уравнения для \check{g} выписаны в представлении с выделенной фазой параметра порядка.

Параметр порядка удовлетворяет условиям самосогласования [14, 20]

$$i\left(1+\frac{1}{\omega_Q^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)(\sigma_y\cos\varphi_n+\sigma_x\sin\varphi_n)\Delta_n=\frac{\lambda}{2}\int(\hat{g}_{nn}^K-\sigma_z\hat{g}_{nn}^K\sigma_z)\,d\epsilon,$$
(2)

где ω_Q — частота фононов с волновым вектором пайерлсовской неустойчивости. Сумма компонент матричного уравнения (2) дает уравнение для амплитуды, а разность — для фазы.

Плотность заряда на цепочке *n* может быть вычислена как.

$$p_n = \frac{2}{\pi v} \left(\frac{1}{8} \int \operatorname{Sp}(\sigma_z \hat{g}_{nn}^K) d\epsilon - \Phi \right).$$
(3)

Для тока вдоль цепочек мы воспользуемся выражением

$$j_n(x) = \frac{1}{4\pi} \int \operatorname{Sp}\hat{g}_{nn}^K d\epsilon.$$
(4)

Ток в направлении, перпендикулярном цепочкам, между цепочками n и n + 1 определяется как

$$j_{n,n+1}(x) \propto t_{\perp} \int \operatorname{Sp}(A_{nn+1}\hat{g}_{n+1\,n}^{K} - \hat{g}_{n\,n+1}^{K}A_{n+1n}) \, d\epsilon.$$
(5)

Решение уравнений (1) в общем случае — весьма сложная задача. Мы ограничимся случаем плавных возмущений фазы, когда фаза вдоль цепочек мало изменяется на расстояниях порядка длины когерентности v/Δ , а характерные частоты много меньше Δ . Мы будем учитывать только те возмущения щели, которые вызваны координатной зависимостью фазы, при этом мы исключим из рассмотрения амплитудные солитоны [22, 23]. Можно выделить два вида возмущений функций Грина в состоянии с неоднородной волной зарядовой плотности. Первый вид — это возмущения в состоянии термодинамического равновесия, вызванные равновесной деформацией волны зарядовой плотности, например, наличием фазовых солитонов, дислокаций, центров пиннинга. Такие возмущения не вызывают отклонения функции распределения от равновесной, и поэтому достаточно найти решения для запаздывающей и опережающей функций Грина. Функция \hat{g}^{K} в этом случае определяется как

$$\hat{g}^K = (\hat{g}^R - \hat{g}^A) \operatorname{th}(\epsilon/2T).$$

Последнее соотношение несправедливо при отклонении от равновесия, когда имеется диссипация. В этом случае надо решать отдельное уравнение для \hat{g}^{K} , описывающее, в частности, функцию распределения квазичастиц. При этом в \hat{g}^{K} появляется аномальная часть, описывающая отклонение функции распределения от равновесной и определяющая ток и коэффициент трения волны зарядовой плотности (см. [14]). В следующем разделе мы остановимся на равновесных возмущениях.

3. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ НЕОДНОРОДНОЙ ВОЛНЫ ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ В СОСТОЯНИИ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО РАВНОВЕСИЯ

Мы будем решать уравнения (1) по теории возмущений по параметру t_{\perp} , описывающему связь между цепочками, и по электрическому полю вдоль цепочек $-d\phi/dx$.

В однородном состоянии и в пренебрежении связями между цепочками из (1) можно получить удобные выражения для запаздывающей и опережающей функций Грина, представленных в виде неявных решений

$$g_{nn} = g_n \sigma_z + f_n i \sigma_y \equiv \frac{\epsilon_n}{\xi_n} \sigma_z + \frac{\Delta_n}{\xi_n} i \sigma_y, \tag{6}$$

где

$$\epsilon_n = \epsilon - \Phi_n + i\nu_+ g_n^{R(A)}/2, \quad \nu_+ = \nu_f + \nu_b, \quad \tilde{\Delta}_n = \Delta_n - i\nu_f f_n^{R(A)}/2, \quad \xi_n^{R(A)} = \pm \sqrt{\epsilon_n^2 - \tilde{\Delta}_n^2}$$

Плотность электронных состояний определяется диагональными компонентами функций Грина с помощью соотношения

$$N(\epsilon) = (g^R - g^A)/2. \tag{7}$$

Как видно из (6), (7), при деформации волны зарядовой плотности и наличии электрического потенциала возникает изгиб энергетических зон — зависимость плотности состояний от координат определяется смещением энергии на величину $\Phi_n(x)$. Так как в равновесии электрохимический потенциал (т. е. сумма электрического и химического потенциала) должен быть постоянен, а градиент фазы равен изменению локального значения волнового вектора волны зарядовой плотности, то

$$\Phi_n(x) = -\mu_n(x),$$

где μ_n – локальное значение смещения химического потенциала от середины щели. (Мы не учитываем здесь обычно присутствующую асимметрию между электронами и дырками в пайерлсовских полупроводниках, проанализированную в [24] и выражающуюся в небольшом отклонении μ от середины щели в недеформированном проводнике с волнами зарядовой плотности.)

Согласно (6) и (7) в пределе $\nu \to 0$ плотность состояний имеет корневую особенность на краю щели. Эта особенность размывается за счет взаимодействия между цепочками, а также рассеяния, которое мы будем считать не слишком сильным, $\nu \ll \Delta$ (противоположный предел соответствует бесщелевому пайерлсовскому состоянию). Решение уравнений для \hat{g}^R и \hat{g}^A с учетом рассеяния несложно получить для энергий $|\epsilon - \Delta| \ll \Delta$, когда диагональные g и недиагональные f компоненты матриц \hat{g}^R и \hat{g}^A близки и уравнения для $g^{R(A)}$ сводятся к кубическому уравнению, решением которого является

$$g^{R(A)} = \frac{1}{4} \left(\frac{\Delta}{\nu}\right)^{1/3} \left\{ i \left[(4\eta)^{1/3} - \left(1 + \eta/2 + \sqrt{1+\eta}\right)^{1/3} - \left(1 + \eta/2 - \sqrt{1+\eta}\right)^{1/3} \right] \pm \sqrt{3} \left[\left(1 + \eta/2 + \sqrt{1+\eta}\right)^{1/3} - \left(1 + \eta/2 - \sqrt{1+\eta}\right)^{1/3} \right] \right\},$$
(8)

где $\eta = 2(\epsilon - \Delta)^3/27\Delta\nu^2$, $\nu \equiv \nu_f + \nu_b$. При больших η , т.е. при $\epsilon - \Delta \gg (\Delta\nu^2)^{1/3}$, решение (8) уменьшается как $1/\sqrt{\epsilon - \Delta}$, а вблизи края ($\eta \approx -1$), при $|\epsilon - E_G| \ll (\Delta\nu)^{1/3}$, где полуширина запрещенной зоны $E_G = \Delta - 3(\Delta\nu^2)^{1/3}$ перенормирована за счет размытия плотности состояний, зависимость (8) сводится к

$$g^{R(A)} = -i \left(\frac{\Delta}{2\nu}\right)^{1/3} \pm \frac{\sqrt{3}}{\nu^{2/3}} \left(\frac{\Delta}{2}\right)^{1/6} \sqrt{\epsilon - E_G}.$$
 (9)

Из этого выражения следует, что из-за рассеяния плотность состояний на краю запрещенной зоны, в согласии с численными расчетами [25], обращается в нуль.

Вычислим теперь поправки вида $g_{x,nn}\sigma_x$ к решению (6) для \hat{g}^R и \hat{g}^A . Подстановка этих поправок в условие самосогласования (2) даст уравнение для фазы. По параметру t_{\perp}/Δ поправка, которая описывает взаимодействие между цепочками, появляется во втором порядке:

$$g_{x,nn} = -\sum_{i} \frac{it_{\perp}^{2} \Delta \sin(\varphi_{n} - \varphi_{n+i})}{\xi_{n} \xi_{n+i} (\xi_{n} + \xi_{n+i})} - \frac{i\hbar v \Delta}{2\xi_{n}^{3}} \frac{d\mu}{dx}.$$
 (10)

Градиенты $\Phi_n(x)$ и $\Delta(x)$ также дают вклады в $g_{x,nn}$ и в f_{nn} , определяющие, соответственно, возмущения фазы и амплитуды волн зарядовой плотности. Расписав матричные уравнения (1) по компонентам, в пренебрежении взаимодействием между цепочками мы получим одинаковые уравнения для $g_{x,nn}^{R(A)}$, каждое из которых имеет вид

$$v^2 \frac{d^2 g_x}{dx^2} + 4\tilde{\xi}^2 g_x = -2iv \left(f \frac{d\Phi}{dx} + g \frac{d\Delta}{dx} \right), \tag{11}$$

где сделано преобразование сдвига энергии на величину $\Phi_n(x)$,

$$\tilde{\xi}^2 = \epsilon^2 - \Delta^2 + 6i\nu\Delta f^R.$$

Выражение для поправки, определяющей возмущение $\Delta(x)$, имеет вид

ЖЭТФ, 1997, 111, вып. 4

$$\delta f = -\frac{ivg}{2(\epsilon g - \Delta f)} \frac{dg_x}{dx},\tag{12}$$

где под g и f следует понимать опережающие и запаздывающие функции Грина в нулевом приближении по градиентам и по t_{\perp} .

Если ξ в левой части (11) достаточно велико, то можно пренебречь второй производной по координате, т.е. воспользоваться локальным решением, соответствующим квазиклассическому приближению, которое дает стандартные уравнения для фазы, использующиеся, например, в задаче о фазовых солитонах в работах [26, 27]. Как будет видно из дальнейшего, такое приближение справедливо, если при изгибе зон химический потенциал не достигает разрешенных состояний, либо когда он проникает в разрешенные состояния на достаточно малую глубину. Решение уравнения (11) имеет вид

$$g_x = -\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \frac{f\Phi' + g\Delta'}{2\tilde{\xi}} \exp\frac{2i\tilde{\xi}|x-x_1|}{v},$$
(13)

где штрих обозначает производную по координате. Подстановка (10), (13) и (12) в условия самосогласования (2) дает уравнения для фазы и амплитуды волны зарядовой плотности. Однако вычислить интегралы по энергии в (2) в общем случае весьма непросто, поскольку функции g и f сложным образом зависят от факторов, приводящих к размытию плотности состояний. Поэтому мы рассмотрим предельный случай идеального квазиодномерного проводника, который применим, если характерные кинетические энергии квазичастиц (т. е. температура T или $\mu - E_G$ при $|\mu| > \Delta$) превышают ($\Delta \nu^2$)^{1/3} и величину размытия одномерной плотности состояний за счет неидеальной конгруэнтности (нестинга) участков поверхности Ферми при сдвиге на волновой вектор волны зарядовой плотности. В этом случае для фазы получим

$$J\sum_{i}\sin\left(\varphi_{n+i}-\varphi_{n}\right) = \frac{i\Delta}{4v}\int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \int_{-\infty}^{\infty} dx_{1} \left[\Delta\Phi'(x_{1})+\epsilon\Delta'(x_{1})\right] \times \\ \times \left(\frac{\exp\left(2i\xi^{R}|x-x_{1}|/v\right)}{(\xi^{R})^{2}}-\frac{\exp\left(2i\xi^{A}|x-x_{1}|/v\right)}{(\xi^{A})^{2}}\right) th\frac{\epsilon-\Phi(x)}{2T},$$
(14)

где $\xi^{R(A)} = \pm \sqrt{(\epsilon \pm i0)^2 - \Delta^2}$, здесь *i*0 показывает направление обхода особенностей при интегрировании по ϵ . Вычисление интеграла в правой части (14) дает

$$\operatorname{Re}\sum_{n=0}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{2\pi\Delta_{0}T\left\{\Delta_{0}\Phi'(x_{1})+\left[\Phi(x)+iT_{n}\right]\Delta'(x_{1})\right\}}{v\tilde{\zeta}_{n}^{2}}\exp\left(-\frac{2\tilde{\zeta}_{n}|x-x_{1}|}{v}\right)dx_{1},\qquad(15)$$

где

$$\tilde{\zeta}_n = \sqrt{\Delta_0^2 + \left[T_n + i\Phi(x)\right]^2},$$

 $T_n = (2n+1)\pi T$. Коэффициент *J*, описывающий силу взаимодействия между цепочками, в общем случае определяется интегрированием (10) и имеет довольно громоздкий вид. Мы приведем выражение для случая $\Delta \gg T$, который реализуется практически при всех температурах ниже флуктуационной области, а также для случая, когда большой сдвиг химического потенциала, сравнимый с величиной щели, происходит только на одной цепочке:

$$J = \frac{t_{\perp}^2}{v} \frac{\Delta^2}{|\Phi| \sqrt{\Delta^2 - \Phi^2/4}} \left[2 \arcsin \frac{|\Phi|}{2\Delta} - \theta(|\Phi| - \Delta) \left(\frac{\pi}{2} - \arcsin \frac{2\Delta^2 - \Phi^2}{|\Phi|\Delta} \right) \right]$$

Отметим, что зависимость $J(\Phi)$ довольно слабая, $J(0) = t_{\perp}^2/v$, $J(0)/J(\Delta) \approx 0.8$, поэтому модель с постоянной величиной J = J(0) дает качественно правильные результаты.

Для того чтобы сделать уравнения замкнутыми, (14), (15) следует дополнить уравнением, описывающим отклонение амплитуды волны зарядовой плотности от невозмущенного значения Δ_0 :

$$\Delta - \Delta_0 = \operatorname{Re} \sum_{n=0}^{\infty} 2\pi v \Delta T \left(\frac{1}{\tilde{\zeta}_n} - \frac{1}{\zeta_n} \right) - \operatorname{Re} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{v}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\pi T \left[\mu(x) + iT_n \right] \left[\Delta_0 \mu''(x_1) + (\mu(x) + iT_n) \Delta''(x_1) \right]}{\tilde{\zeta}_n^4} \exp \left(-\frac{2\tilde{\zeta}_n |x - x_1|}{v} \right) dx_1, \quad (16)$$

где $\zeta_n = \tilde{\zeta}_n (\Phi = 0)$. Отметим, что первое слагаемое в правой части (16) содержит невозмущенное значение амплитуды и должно быть линеаризовано по поправке $\Delta - \Delta_0$.

Если подынтегральная функция в (14) мало меняется на длине порядка $v/\sqrt{\Delta^2 - \mu^2}$, справедливо локальное приближение и уравнение сводится к стандартному квазиклассическому уравнению для фазы (см. [26, 27]) с дополнительной силой пропорциональной градиенту Δ. Покажем, что локальное приближение справедливо, когда сдвиг химического потенциала не достигает края щели либо когда μ незначительно проникает в область разрешенных состояний, т.е. в металлических островках достаточно малых размеров. Для этого прибавим и вычтем к th[$(\epsilon - \Phi(x))/2T$] в правой части (14) th($\epsilon/2T$) и рассмотрим интегралы с множителем th($\epsilon/2T$) и разностью двух оставшихся тангенсов по-отдельности. В интеграл по ϵ от слагаемого с th($\epsilon/2T$), вычисленный с помощью обхода полюсов тангенса в комплексной плоскости, основной вклад дает область энергий $\epsilon \sim i\Delta$. Поэтому характерная длина спадания экспоненты в интеграле по x_1 окажется малой, $\sim v/\Delta$, а так как мы рассматриваем возмущения мало меняющиеся на длине когерентности, функции Ф' и Δ' можно вынести из под знака интеграла. В результате вычисления оставшихся интегралов мы получим в правой части (14) результат квазиклассического приближения $N_s \Phi'$, где $N_s = 1 - \sqrt{2\pi\Delta/T} \exp(-\Delta/T) \sim 1$ при $\Delta > T$. Легко убедиться, что оставшийся интеграл по ϵ , содержащий разность th $[(\epsilon - \Phi(x))/2T]$ – th $(\epsilon/2T)$, оказывается при $\Delta - |\Phi(x)| \gg T$ пропорционален малой экспоненте exp $[(\Delta - |\Phi|)/T]$ и его можно отбросить. Таким образом, вне металлического островка можно пользоваться локальным приближением. Предположим теперь, что координата x находится внутри маленького металлического островка длиной l_m , и покажем, что последний интеграл, описывающий нелокальный вклад в уравнение, мал при достаточно малых l_m . При $l_m \ll v/\max\{T, \sqrt{\Delta}(|\Phi| - \Delta)\}$ характерная длина изменения экспоненты значительно превышает размеры островка и поэтому можно отбросить x в экспоненте. Так как зависимости $\Phi(x)$ и $\Delta(x)$, возникающие в солитоне, являются нечетными, то под интегралом по x_1 останется нечетная функция, интеграл от которой равен нулю. Таким образом, нелокальный вклад оказывается мал и в случае достаточно малого металлического островка.

В общем случае произвольного возмущения квазиклассическое приближение неприменимо и следует решать полные интегрально-дифференциальные уравнения (14)–(16).

4. УРАВНЕНИЯ В НЕСТАЦИОНАРНОМ СЛУЧАЕ

Если к проводнику с волнами зарядовой плотности приложено электрическое поле и протекает электрический ток, то в уравнении для фазы появляются слагаемые, связанные с отклонением функции распределения квазичастиц от равновесной и в системе появляется ток квазичастиц. Для того чтобы найти распределение квазичастиц, следует решать кинетическое уравнение для \hat{g}^{K} , которое для плавных возмущений может быть сведено к квазиклассическим кинетическим уравнениям для функций распределения [14]. Нас, однако, интересуют возмущения, которые являются плавными вдоль цепочек, но быстро меняются в направлении перпендикулярном цепочкам. Именно такие возмущения возникают, например, в солитонах и около центров пиннинга. В этом разделе мы обобщим подход работы [14] на возмущения такого рода.

Мы ограничимся случаем малых частот, когда характерные времена, за которые изменяются электрическое поле, фаза волны зарядовой плотности и т.д., превышают времена релаксации энергии и импульса. В этом случае распределение квазичастиц по энергиям описывается равновесной функцией распределения Ферми с химическим потенциалом μ , являющимся функцией координат и времени, которая в неравновесном случае, вообще говоря, не должна совпадать с потенциалом Ф. Для вычисления μ мы будем пользоваться уравнением Пуассона, в котором плотность заряда на n-ой цепочке вычисляется с помощью формулы (3) с

$$\operatorname{Sp}(\sigma_z \hat{g}_{nn}^K) = 2N(\epsilon) \operatorname{th} \left[(\epsilon - \mu)/2T \right],$$

где плотность состояний $N(\epsilon)$ определяется (7) с функциями Грина, найденными в предыдущем разделе:

$$\rho_n = -\frac{\kappa^2}{4\pi} \left[\frac{v}{2} \frac{d\varphi_n}{dx} + f(\mu_n) \right] + \frac{\varepsilon_\Delta}{4\pi} \frac{d^2 \Phi}{dx^2}.$$
 (17)

Здесь $1/\kappa$ — радиус экранирования в металлическом состоянии, ϵ_{Δ} описывает вклад в диэлектрическую постоянную, связанный с пайерлсовской щелью, возникающий из-за поправок к $g^{R(A)}$ (вывод см. в [14]), $f(\mu)$ описывает вклад одноэлектронных возбуждений в плотность заряда, аналогичный вкладу электронов и дырок в обычных полупроводниках:

$$f(\mu) = \int_{\Delta}^{\infty} d\epsilon N(\epsilon) \left[n_F(\epsilon - \mu) - n_F(\epsilon + \mu) \right], \tag{18}$$

 n_F — функция распределения Ферми. Явный вид $f(\mu)$ зависит от степени размытия плотности состояний у края щели, хотя качественный характер зависимости $f(\mu)$ универсален. В пренебрежении размытием $g^{R(A)}$ при $\Delta - |\mu| \gg T$

$$f(\mu) = N_Q \operatorname{sh}(\mu/T), \quad N_Q = \sqrt{2\pi\Delta/T} \exp(-\Delta/T),$$

а при $|\mu| - \Delta \gg T$

$$f(\mu)=\sqrt{\mu^2-\Delta^2}.$$

Так как изменения всех величин вдоль цепочек плавные, возмущения функции \hat{g}^{K} , возникающие как отклик на поле, направленное вдоль цепочек, имеют квазиклассический характер и поэтому основной вклад в них дают возмущения функции распределения квазичастиц, а возмущениями функций $\hat{g}^{R(A)}$ можно пренебречь. Возмущение функции распределения может быть вычислено, как это было сделано в [14]:

$$n_z = \frac{vV'_n + (\nu_b/2)G_-\dot{\varphi}_n}{\nu_e \epsilon \epsilon} \frac{dn_F(\epsilon - \mu_n)}{d\epsilon},\tag{19}$$

$$V_n = \Phi_n - \mu_n, \tag{20}$$

где

$$\nu_{eff} = \nu_b G_-/2 + i \Delta F_+/G_-, \quad G_- = g^R - g^A, \quad F_+ = f^R + f^A,$$

а V_n — электрохимический потенциал, который в равновесии обращается в нуль в результате взаимной компенсации полевого и диффузионного вкладов в ток, точка над функцией обозначает производную по времени.

Возмущение функции распределения (19) описывает продольный ток квазичастиц и приводит к появлению в уравнении для фазы члена, описывающего трение движущейся волны зарядовой плотности. Соответствующие неравновесные добавки к компонентам функций Грина имеют вид

$$\operatorname{Sp} g^K = G_- n_z, \quad g_x^{(a)} = -F_+ n_z.$$

Подставляя эти выражения в уравнение (4), вычислим плотность тока вдоль цепочек:

$$j_{l} = \frac{\sigma_{Nl}\nu_{b}}{2v} \left(\frac{\partial\varphi_{n}}{\partial t} + \int_{-\infty}^{\infty} G_{-}n_{z}d\epsilon \right) - \frac{\varepsilon_{\Delta}}{4\pi} \frac{d^{2}\Phi}{dxdt} = \frac{\sigma_{Nl}\nu_{b}}{2v}(1-b)\frac{\partial\varphi_{n}}{\partial t} - \sigma_{l}V_{n}' - \frac{\varepsilon_{\Delta}}{4\pi} \frac{d^{2}\Phi}{dxdt}, \quad (21)$$

где σ_{Nl} — проводимость вдоль цепочек в нормальном состоянии (т.е. с $\Delta = 0$). Выражение для проводимости квазичастиц σ_l , так же, как и параметр b, описывающий влияние квазичастиц на ток волн зарядовой плотности, зависят от степени размытия плотности состояний и от сдвига химического потенциала, они определяются вкладом первого и второго слагаемых в функции распределения (19) в интеграл (21). Результат вычисления этих величин в пределе чистого материала и $|\mu| < \Delta$ можно найти, например, в [14]. Мы не будем приводить явное выражение для b, так как при низких температурах он не играет существенной роли в токе волн зарядовой плотности вдоль цепочек (играя, однако, определяющую роль во вкладе движущейся волны зарядовой плотности в эффект Холла и перенос тепла [28, 29]). Здесь мы ограничимся результатом вычисления σ_l при условии $T \ll \Delta$ для произвольного сдвига химического потенциала:

$$\sigma_l = 4\sigma_{Nl} \frac{\nu_b T}{\nu\Delta} \left[\ln\left(2 \operatorname{ch} \frac{E_G - |\mu|}{2T}\right) - \frac{E_G - |\mu|}{2T} \right].$$
(22)

Это выражение выведено в пренебрежении размытием плотности состояний у края щели, в противоположном предельном случае (9) сильного размытия из-за большой частоты столкновений коэффициент 4 в (9) следует заменить на 3.

Вычисляя вклад в уравнение для фазы, связанный с неравновесной добавкой к функции распределения квазичастиц (19), и добавляя его к уравнению для фазы, выведенному в предыдущем разделе, мы получим уравнение движения для фазы. Здесь мы для простоты запишем это уравнение в квазиклассическом приближении, применимость которого в металлических островках, как уже отмечалось выше, ограничена маленькими островками:

$$\frac{1}{2v}\frac{m^*}{m}\frac{\partial^2\varphi_n}{\partial t^2} + \gamma\frac{\partial\varphi_n}{\partial t} - \frac{v}{2}\frac{\partial^2\varphi_n}{\partial x^2} + J\sum_i \sin\left(\varphi_n - \varphi_{n+i}\right) = E_n,\tag{23}$$

где m — масса электрона, $m^* = (1 + 4\Delta^2/\lambda\omega_Q^2)m$ — «эффективная масса волны зарядовой плотности», которая появляется из-за слагаемого с временной производной в (2) (напомним, что большая эффективная масса является одним из отличий волн зарядовой плотности от волн спиновой плотности, в которых эффективная масса должна совпадать с зонной массой [1]). Коэффициент трения определяется как

$$\gamma \frac{\partial \varphi_n}{\partial t} = \frac{i\Delta}{2v} \int F_+ n_z d\epsilon.$$
(24)

Как и проводимость квазичастиц, γ зависит от размытия плотности состояний. В пренебрежении размытием и при $\Delta - |\mu| \gg T$ он приведен в [14], где также было показано, что главный вклад в коэффициент трения вносят квазичастицы с энергией вблизи края щели, так что при вычислении γ требовалось обрезать интегрирование в области расходимости плотности состояний. Здесь мы приведем результат для противоположного предельного случая $T \gg (\Delta \nu^2)^{1/3}$, когда основной вклад в интеграл (24) дают квазичастицы вблизи размытого края плотности состояний

$$\gamma = \frac{3\nu_b \Delta^{1/3} T}{(2\nu)^{4/3}} \left[\ln \left(2 \operatorname{ch} \frac{E_G - |\mu|}{2T} \right) - \frac{E_G - |\mu|}{2T} \right].$$
(25)

Отметим, что в главном приближении в правую часть (23) входит электрическое поле $E = -d\phi/dx$, а не градиент электрохимического потенциала, определяющий ток квазичастиц в (21). Вклад, пропорциональный градиенту химического потенциала, появится, если учесть связанные с наличием квазичастиц поправки, которые малы при низких температурах.

Если исследовать уравнения для фазы (23) с взаимодействием между ближайшими цепочками на устойчивость по отношению к малым возмущениям фазы, то окажется, что однородное решение с одинаковыми фазами на всех цепочках неустойчиво. Устойчивым является решение, в котором фазы соседних цепочек отличаются на π . Это соответствует давно известному факту, что в приближении сильной связи противоположные участки поверхности Ферми совпадают при сдвиге на волновой вектор, соответствующий удвоению периода в направлении, перпендикулярном цепочкам. Поэтому волна зарядовой плотности, образующаяся при пайерлсовском переходе, также соответствует удвоению периода в поперечном направлении. В дальнейшем под φ_n мы будем понимать отклонения фазы от устойчивого решения, в котором соседние цепочки находятся

в противофазе. Уравнения для таких отклонений будут отличаться от (23) только знаком перед J.

В отличие от отклика на поле, параллельное цепочкам, плотность тока в направлении, перпендикулярном цепочкам, не описывается в квазиклассическом приближении, поскольку мы рассматриваем возмущения, в которых разность фаз между соседними цепочками может быть велика. В этом случае в выражении для плотности тока следует учитывать не только возмущения функции распределения квазичастиц, но и возмущения запаздывающей и опережающей функций Грина. При вычислении недиагональных по номеру цепочки компонент функций Грина, необходимых для нахождения тока между цепочками, можно пренебречь слагаемыми, содержащими производные, и ограничиться первым порядком теории возмущений по взаимодействию между цепочками t_{\perp} . Вычисление комбинаций функций Грина, входящих в формулу для плотности тока между цепочками (5), дает

$$j_t = i \frac{\sigma_{Nt}\nu_+}{4d} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \left(th \frac{\epsilon - V_n}{2T} - th \frac{\epsilon - V_{n+1}}{2T} \right) (F^{RA} + F^{AR} - F^{RR} - F^{AA}), \quad (26)$$

где σ_{Nt} — проводимость в направлении, перпендикулярном цепочкам, в нормальном состоянии, а

$$F^{IJ} = \frac{g_n^I g_{n+1}^J - 1 + f_n^I f_{n+1}^J \cos(\varphi_n - \varphi_{n+1})}{\zeta_n^I + \zeta_{n+1}^J}.$$

Как видно из (26), ток между цепочками n и n + 1 возникает при наличии разности электрохимических потенциалов

$$V_n - V_{n+1} = \Phi_n - \mu_n - \Phi_{n+1} + \mu_{n+1},$$

а его величина зависит от сдвигов химического потенциала на рассматриваемых цепочках, так как, согласно (6), зависимости компонент гриновских функций g_n , f_n и f_{n+1} , g_{n+1} от энергии сдвинуты на величины Φ_n и Φ_{n+1} , соответственно. Отметим также, что проводимость σ_t зависит от разности фаз между соседними цепочками, это тот же эффект, который должен проявляться в туннельном контакте двух проводников с волнами зарядовой плотности [30]. Вычисление интегралов в (26) в общем случае весьма громоздко, поэтому мы обсудим качественный характер проводимости и ее вид в различных предельных случаях. При низких температурах и в пределе малых Φ_n и Φ_{n+1} проводимость экспоненциально мала:

$$\sigma_t \propto \sigma_{Nt} \left[1 + \cos\left(\varphi_n - \varphi_{n+1}\right) \right] \exp\left(-\Delta/T\right). \tag{27}$$

Отметим, что при этих условиях экспоненциально мала и продольная проводимость:

$$\sigma_l \propto \sigma_{Nl} \exp{(-\Delta/T)}.$$

Если же на одной из цепочек имеется большой сдвиг потенциала $\Phi_n \approx \mu_n$, как это бывает возле центра пиннинга или в фазовом солитоне [16, 17], то продольная и поперечная проводимости ведут себя по разному. Проводимость вдоль цепочки (22) возрастает пропорционально $\exp(|\Phi|/T)$ вследствие увеличения локальной плотности квазичастиц, а

12 ЖЭТФ, №4

влияние большого сдвига химического потенциала на поперечную проводимость сказывается лишь на предэкспоненциальном множителе в (27), который сильно уменьшается при увеличении Ф. Дело в том, что при малых разностях химического потенциала Ф на соседних цепочках проводимость, как и положено в полупроводниках, обратно пропорциональна частоте рассеяния импульса, что выражается в малой величине знаменателей вида $\zeta_n^R + \zeta_{n+1}^A$ в (26). При больших $\Phi_n - \Phi_{n+1} \gg \sqrt{\Delta T}$ характер отклика соответствует туннельному току между цепочками и знаменатели в двух первых слагаемых (26) больше не являются малыми, а интегрирование дает по порядку величины

$$\sigma_t = O\left(\frac{\Delta\nu^2 T^{3/2}}{(\Delta\nu^2 + \mu T^2)\mu^{3/2}}\right) \sigma_{Nt} \exp\left(-\Delta/T\right).$$
(28)

Уравнение движения для фазы совместно с уравнениями Пуассона и непрерывности, в которые надо подставить выражения для плотностей заряда (17) и тока (21), (26), определяют вклад движущейся волны зарядовой плотности или ее частей в проводимость.

5. ВКЛАД ФАЗОВЫХ СОЛИТОНОВ В ПРОВОДИМОСТЬ

Как аналитические [16], так и численные [17] расчеты фазовых солитонов показывают, что их структура и энергия отличаются лишь количественно в таких различных моделях, как модель с взаимодействием между ближайшими цепочками и модель с одной цепочкой (последняя описывает взаимодействие многих цепочек в приближении самосогласованного поля [10]). Это указывает на то, что качественные свойства солитонов не зависят от конкретной кристаллической и энергетической структуры квазиодномерного проводника. Ниже при оценке скорости движения солитона под действием приложенного к квазиодномерному проводнику напряжения мы будем по возможности упрощать модель квазиодномерного проводника и сведем ее, в конце концов, к простейшей модели с одной цепочкой, пренебрегая в уравнениях, описывающих солитон, возмущениями фазы и потенциала на соседних цепочках. При этом мы будем пользоваться квазиклассическим уравнением (23) для фазы, рассматривая солитоны, не содержащие металлического островка, или с маленьким островком. Так как мы ищем решение для солитона, движущегося вдоль цепочек, зависимость всех функций от времени должна иметь вид

$$\varphi(x,t) \equiv \varphi\left[x - x_s(t)\right]$$

и поэтому производные по времени сводятся к производным по координате. Перейдем к безразмерным переменным, в которых единицами энергии, времени и длины являются t_{\perp} , $1/t_{\perp}$ и v/t_{\perp} , соответственно. Тогда в линейном приближении по приложенному напряжению и скорости уравнение для фазы принимает вид

$$\frac{\partial \varphi_n}{\partial x} \left(\frac{m^*}{2m} \ddot{x}_s + \gamma \dot{x}_s \right) + \sum_i \sin \left(\varphi_n - \varphi_{n+i} \right) = \frac{\partial (\mu_n + V_n)}{\partial x},\tag{29}$$

где безразмерная величина γ измерена в единицах t_{\perp}/v и мы выразили электрический потенциал через электрохимический и химический потенциалы с помощью определения (20).

Часть лапласиана в уравнении Пуассона, зависящую от координат, перпендикулярных цепочкам, мы запишем в дискретном виде и пренебрежем малыми слагаемыми, содержащими ϵ_{Δ} :

$$\zeta \sum_{i} (\phi_{n+i} - \phi_n) = \frac{1}{2} \frac{d\varphi_n}{dx} + f(\mu_n),$$
(30)

где безразмерный параметр $\zeta = \hbar v / 8e^2 \sim 10^{-2}$.

Для решения задачи нам также понадобится уравнение непрерывности, которое после подстановки в него выражений для плотностей тока и заряда принимает вид

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\sigma_l}{\sigma_{Nl}} \frac{\partial V_n}{\partial x} \right) + a \sum_i \frac{\sigma_t}{\sigma_{Nt}} (V_{n+i} - V_n) + 2\dot{x}_s \nu_b \frac{\partial}{\partial x} \left[f(\mu) + b \frac{\partial \varphi_n}{\partial x} \right] = 0, \quad (31)$$

где

$$a = (\sigma_{Nt}/\sigma_{Nl})(v^2/t_\perp d^2) \sim 1.$$

Для того чтобы вычислить x_s , домножим уравнение (29) на $\partial \varphi_n / \partial x$, а затем просуммируем по *n* и проинтегрируем по *x* от $-\infty$ до ∞ . В результате часть слагаемых может быть представлена в виде интегралов от производных от функций, возмущение которых уменьшается на бесконечности, так что ненулевой вклад в интегралы дадут только несколько слагаемых:

$$\left(\frac{m^*}{2m}\ddot{x}_s + \gamma\dot{x}_s\right) \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial\varphi_n}{\partial x}\right)^2 dx = \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial V_n}{\partial x} \frac{\partial\varphi_n}{\partial x} dx.$$
 (32)

В первом порядке по теории возмущений в интегралы, входящие в (32), можно подставить невозмущенные решения для статического солитона.

Для определения x_s из уравнения (32) следует найти зависимость $V_n(x)$, которая определяется уравнением непрерывности (31). Так как внутри большей части солитона имеется большой сдвиг химического потенциала на центральной цепочке [16, 17], проводимость σ_t , согласно (28), пренебрежимо мала и мы можем найти решение (31), отбросив второе слагаемое в (32). В результате мы найдем решение для градиента электрохимического потенциала

$$\frac{\partial V_n}{\partial x} = -\frac{j_{ext}}{\sigma_l} + \dot{x}_s \frac{2\nu_b \sigma_{Nl}}{\sigma_l} \left(f(\mu_n) + b \frac{\partial \varphi_n}{\partial x} \right), \tag{33}$$

где постоянная интегрирования определяется из условия, что вдали от солитона ток определяется только одноэлектронными возбуждениями, $j_{ext} = \sigma_{0l} E(x = \infty)$ — плотность тока, а $\sigma_{0l} = \sigma_l(x = \infty)$ — проводимость вдали от солитона. При подстановке (33) в уравнение (32) для x_s первое слагаемое даст силу, вызывающую движение солитона, а второе – дополнительное трение, связанное с перераспределением зарядов при движении солитона. Этот вклад имеет ту же природу, что и активационно растущий при понижении температуры вклад квазичастиц в затухание волны зарядовой плотности [31, 32] при ее однородном движении в присутствии слабых центров пиннинга при относительно больших температурах.

Таким образом, в силу малости тока между цепочками при большом сдвиге химического потенциала от центра пайерлсовской щели градиент электрохимического потенциала (33) определяется значениями фазы и потенциала на той же цепочке. Это оправдывает использование модели с одной цепочкой для качественного исследования подвижности солитона и его вклада в проводимость. Поэтому, учитывая, что возмущения фазы и потенциала в солитоне быстро уменьшаются при удалении от центральной цепочки, мы пренебрежем вкладом всех цепочек, кроме центральной. Подставив теперь (33) в (32), мы найдем уравнение движения солитона:

$$M\ddot{x}_s + 2\nu_b \sigma_{Nl} \Gamma \dot{x} = A j_{ext} / \sigma_{0l}, \tag{34}$$

где

$$M = (m^*/2m) \int (\varphi')^2 dx, \quad A = \int \varphi'(\sigma_{0l}/\sigma_l) dx,$$
$$\Gamma = \int \varphi' \left[(f + b\varphi')/\sigma_l + \gamma \varphi'/(2\nu_b \sigma_{Nl}) \right] dx.$$

Усредним затем уравнение (33) по координате x и подставим в него скорость солитонов, найденную из (34) в пределе малых частот, когда можно отбросить слагаемое с эффективной массой. Считая, что линейная концентрация невзаимодействующих солитонов на цепочке равна n_s , мы получим связь между средним полем и током, определяющими проводимость кристалла с солитонами:

$$\overline{E} = \frac{j_{ext}}{\sigma_{0l}} \left[1 - n_s \left(\int \frac{\delta \sigma}{\sigma_l} dx + \frac{A}{\Gamma} \int \frac{f + b\varphi'}{\sigma_l} dx \right) \right],$$
(35)

где $\delta \sigma = \sigma_l - \sigma_{0l}$. Выражение в круглых скобках описывает вклад солитона в уменьшение сопротивления кристалла, причем второе слагаемое описывает вклад от дрейфа солитонов, а первое — от локального увеличения проводимости, связанного с увеличением концентрации квазичастиц вследствие экранирования заряда солитона и сдвига химического потенциала.

При вычислении вклада солитонов в линейную проводимость можно пренебречь влиянием внешнего поля на форму солитона и во все интегралы в формулах (34), (35) следует подставить решения для неподвижного солитона. В модели с одной цепочкой и в случае, когда нет металлического островка в середине солитона (либо если есть маленький островок), уравнения для фазы и уравнение Пуассона, описывающие статический солитон, могут быть получены из (29) и (30), если опустить переменные, относящиеся к соседним цепочкам. Для случая, когда число ближайших цепочек равно 4, получим

$$\frac{d\mu}{dx} = -4\sin\varphi, \quad \frac{1}{2}\frac{d\varphi}{dx} = -4\zeta\phi - TN_Q \operatorname{sh}\frac{\mu}{T}.$$
(36)

Решения (36) имеют простой вид в двух предельных случаях: при T = 0, когда влиянием квазичастиц можно пренебречь:

$$\varphi = 4 \arctan\left[\exp\left(\sqrt{32\zeta}x\right)\right],\,$$

и при более высоких температурах $N_Q \gg \zeta$, когда справедливо приближение квазинейтральности:

$$\varphi = 2 \operatorname{arcctg} \left[\sqrt{1 + 2/N_Q T^2} \operatorname{sh}(8N_Q x) \right].$$

Подставив эти выражения в (35), мы получим удельное сопротивление образца с невзаимодейсвующими солитонами в упомянутых выше пределах и в предположении достаточно низких температур $N_Q T^2 \ll 1$. Возвращаясь к размерным единицам, получим

$$\rho = \frac{1}{\sigma_{0l}} (1 - n_s) \begin{cases} a_1 / \sqrt{N_Q} + b_1 T / t_\perp & \text{при } N_Q \ll \zeta, \\ (a_2 / \sqrt{\zeta} + b_2 T / t_\perp) \ln \left[t_\perp / T \sqrt{\zeta} \right] & \text{при } N_Q \gg \zeta, \end{cases}$$
(37)

где коэффициенты *a* и *b* порядка единицы, a их точная величина зависит от структуры проводника, например, от числа ближайших соседей. Слагаемые с коэффициентами *a*, которые описывают вклад солитона в проводимость из-за сдвига химического потенциала, как это видно из (37), в обойх предельных случаях значительно превышают вклад от переноса заряда за счет дрейфа солитона, описываемый слагаемыми с *b*. Малая подвижность солитона связана с тем, что сила, действующая на солитон при протекании тока, уменьшается из-за резкого уменьшения электрического поля в основной области солитона, где имеется большой сдвиг химического потенциала и увеличение локальной плотности квазичастиц. Поэтому в силу, тянущую солитон, основной вклад дают большие расстояния от центра, где сдвиг химического потенциала мал и электрическое поле, приложенное к образцу, не заэкранировано квазичастицами. При этом вклад в фактор Г, определяющий трение солитона, дает вся область возмущения фазы в солитоне. Отметим, что главный вклад в трение определяется первым слагаемым в Г, которое описывает диссипацию, вызванную перераспределением зарядов в центре солитона при его движении.

Отметим, что пиннингующие примеси также могут дать вклад в увеличение линейной проводимости, который подобен вкладу солитона в проводимость, определяемому сдвигом химического потенциала и не связанному с дрейфом. Как было установлено в [16, 17], вокруг центра сильного пиннинга также возникает сдвиг химического потенциала, уменьшение которого при удалении от центра пиннинга имеет такой же характер, как и в солитоне. Действительно, как хорошо известно, центр пиннинга описывается добавлением к первому из уравнений (36) слагаемого вида $v_Q \delta (x - x') \sin (Qx + \varphi)$, где безразмерный примесный потенциал $v_Q = 2V_Q \Delta/\lambda t_{\perp} v$ выражается через компоненту Фурье примесного потенциала V_Q , соответствующую волновому вектору волны зарядовой плотности Q (см. [14]). Из решения уравнений (36) с δ -функцией мы получим, что центр пиннинга создает локальное возмущение фазы со значительным сдвигом химического потенциала, который уменьшается на расстояниях порядка солитонной длины. Например, в пределе $T \rightarrow 0$ значение фазы φ_i и химического потенциала μ_i возле примеси определяется из соотношения

$$2|\mu_i| = \sqrt{8}/\zeta \sin{(\varphi_i/2)} = v_Q \sin{(Qx_i + \varphi_i)}.$$

Отсюда следует, что пиннинг приводит к большому сдвигу μ_i , сравнимому с Δ при величине примесного потенциала V порядка энергии Ферми, т.е. при величине порядка характерных атомных энергий. Отметим, что формальное решение в рамках модели с δ -функцией приводит к скачку потенциала на примеси, однако это обстоятельство не должно смущать, поскольку оно означает быстрое изменение потенциала на малых длинах порядка радиуса экранирования Томаса-Ферми. Отметим также, что исследование в рамках трехмерной модели, учитывающей много цепочек, показывает, что на больших расстояниях от примеси, где сдвиг химического потенциала становится малым, возмущение уменьшается довольно медленно, по степенному закону, такое медленное уменьшение может приводить к коллективному пиннингу.

Значительный сдвиг химического потенциала на центре пиннинга приведет к такому же вкладу в сопротивление, как вклад с коэффициентами a в (37), но с заменой концентрации солитонов n_s на линейную концентрацию центров пиннинга n_p . Так как при понижении температуры плотность солитонов $n_s \propto \exp(-E_s/T)$, она быстро уменьшается вследствие термоактивационного характера зависимости и значительного увеличения энергии солитона при понижении температуры [16, 17]. Поэтому следует ожидать, что влияние центров пиннинга на проводимость при низких температурах будет значительно больше, чем влияние солитонов.

Таким образом, проведенные расчеты свидетельствуют против использующейся во многих работах идеи о том, что дрейф солитонов может объяснить увеличение линейной проводимости вдоль цепочек по сравнению с термоактивационной проводимостью, в которой энергия активации близка к Δ . Как мы видим, вклад дрейфа солитонов очень мал. Значительно большее уменьшение проводимости вдоль цепочек возникает из-за возмущения химического потенциала около центров пиннинга. При этом, как следует из наших расчетов, такое увеличение продольной проводимости не должно сопровождаться увеличением поперечной проводимости, как это и наблюдается в экспериментах. Длина области с увеличенной проводимостью определяется солитонной длиной l_s , которая увеличивается при понижении температуры и имеет макроскопические размеры, а в поперечном направлении возмущение уменьшается на расстояниях порядка расстояния между цепочками. Поэтому в направлении, параллельном цепочкам, области с повышенной проводимостью начнут перекрываться уже при малых линейных концентрациях центров пиннинга $n_p \sim 1/l_s$, что приведет к значительному увеличению проводимости вдоль цепочек по сравнению с обычной термоактивационной зависимостью с постоянной энергий активации. Решение задачи о проводимости в случае достаточно большой концентрации центров пиннинга с заметным перекрытием областей с повышенной плотностью квазичастиц весьма сложно и требует отдельного рассмотрения. Можно ожидать, что в этом случае большую роль будут играть метастабильные состояния с различным пространственным распределением фазы между центрами пиннинга.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Хорошо известно, что эффекты, связанные с дальнодействующим кулоновским взаимодействием и его экранированием, определяют статические и динамические свойства неоднородных возмущений волны зарядовой плотности при относительно высоких температурах. Так, например, линейное экранирование одноэлектронными возбуждениями определяет характерный масштаб длин (жесткость волны зарядовой плотности) [20, 33] и скорость этой волны [31, 32]. Из проведенных выше расчетов следует, что кулоновские эффекты должны учитываться и при описании динамики волн зарядовой плотности при низких температурах, когда электронно-дырочные возбуждения в одно-

родной волне зарядовой плотности практически отсутствуют. В местах неоднородных возмущений волны зарядовой плотности происходит значительный сдвиг химического потенциала от его невозмущенного положения вблизи середины пайерлсовской щели, что сильно влияет на структуру и подвижность нелинейных возмущений волны зарядовой плотности. Мы вывели уравнения, применимые для описания динамики возмущений с большими изменениями фазы и потенциала между соседними цепочками. таких как, например, в 2π -солитонах или около центров пиннинга. В местах подобных возмущений происходит значительное увеличение одночастичной проводимости вдоль проводящих цепочек, а проводимость между цепочками не возрастает. Вычисление скорости движения солитона под действием приложенного к образцу электрического поля показывает, что скорость солитонов слишком мала, для того чтобы их дрейф дал заметный вклад в проводимость при низких температурах. Наблюдаемые отличия температурной зависимости линейной проводимости от той, которую следовало бы ожидать при обычном механизме проводимости за счет электронов и дырок, можно связать со сдвигом химического потенциала и увеличением концентрации квазичастиц около центров пиннинга.

Автор благодарен В. Воннебергеру, Ф. Гляйсбергу, С. В. Зайцеву–Зотову, П. Монсо и В. Я. Покровскому за стимулирующие обсуждения. Автор также благодарит за гостеприимство CRTBT-CNRS (Гренобль, Франция), где была выполнена часть этой работы во время пребывания там автора в рамках программы обмена ИТФ-ENS. Работа поддержана грантом № 95-02-05392 Российского фонда фундаментальных исследований и грантом № 1-018 Межотраслевой научно-технической программы «Физика твердотельных наноструктур».

Литература

- 1. G. Grüner, Density Waves in Solids, Addison-Wesley, Reading (1994).
- 2. Charge Density Waves in Solids, ed. by L. Gor'kov and G. Grüner, Elsevier Science, Amsterdam (1989).
- 3. P. A. Lee and T. M. Rice, Phys. Rev. B 19, 3970 (1979).
- 4. T. Takoshima, M. Ido, K. Tsutsumi, T. Sambongi, S. Honma, K. Yamaya, and Y. Abe, Solid State Commun. 35, 911 (1980).
- 5. С. К. Жилинский, М. Е. Иткис, Ф. Я. Надь, В. Б. Преображенский, ЖЭТФ 85, 362 (1983).
- 6. Jie Yang and N. P. Ong, Phys. Rev. B 44, 1991 (1991).
- 7. G. Kriza, Y. Kim, A. Beleznay, and G. Mihaly, Solid State Commun. 79, 811 (1991).
- 8. F. Ya. Nad' and P. Monceau, Solid State Commun. 87, 13 (1993); Synthetic Metals 70, 1255 (1995).
- 9. J. C. Lasjaunias, K. Biljakovic, and P. Monceau, Phys. Rev. B 53, 7699 (1996).
- 10. А. И. Ларкин, ЖЭТФ 105, 1793 (1994).
- 11. A. Larkin and S. Brazovskii, Solid State Commun. 93, 275 (1995).
- 12. Yu. N. Ovchinnikov, K. Biljakovic, and P. Monceau, Europhys. Lett. 34, 645 (1996).
- 13. W. Wonneberger, Solid State Commun. 97, 891 (1996).
- 14. S. N. Artemenko and A. F. Volkov, in *Charge Density Waves in Solids*, ed. by L. Gor'kov and G. Grüner, Elsevier Science, Amsterdam (1989), Ch. 9.
- 15. A. F. Volkov, Physics Lett. A 182, 433 (1993).
- 16. С. Н. Артеменко, Ф. Гляйсберг, Письма в ЖЭТФ 61, 762 (1995).
- 17. S. N. Artemenko and F. Gleisberg, Phys. Rev. Lett. 75, 497 (1995).

- 18. С. Н. Артеменко, Письма в ЖЭТФ 63, 49 (1996).
- 19. Л. В. Келдыш, ЖЭТФ, 47, 1515 (1964).
- 20. С. Н. Артеменко, А. Ф. Волков, ЖЭТФ 81, 1872 (1981).
- 21. С. Н. Артеменко, ЖЭТФ 79, 162 (1980).
- 22. С. А. Бразовский, Письма в ЖЭТФ 28, 677 (1978); ЖЭТФ 78, 678 (1980).
- 23. W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, Phys. Rev. Lett. 42, 1698 (1979).
- 24. С. Н. Артеменко, В. Я. Покровский, С. В. Зайцев-Зотов, ЖЭТФ 110, 1068 (1996).
- 25. R. H. McKenzie and J. W. Wilkins, Phys. Rev. Lett. 69, 1085 (1992).
- 26. B. Horovitz, J. A. Krumhansl, and E. Domany, Phys. Rev. Lett. 38, 778 (1977).
- 27. С. А. Бразовский, С. И. Матвеенко, ЖЭТФ 99, 887 (1991).
- 28. С. Н. Артеменко, А. Н. Круглов, ФТТ 26, 239 (1984).
- 29. S. N. Artemenko, Synthetic Metals 36, 381 (1990).
- 30. С. Н. Артеменко, А. Ф. Волков, ЖЭТФ 91, 1536 (1984).
- 31. L. Sneddon, Phys. Rev. B 29, 719 (1984).
- 32. P. B. Littlewood, Phys. Rev. B 36, 480 (1987).
- 33. Y. Kurihara, J. Phys. Soc. Jap. 49, 852 (1980).