Письма в ЖЭТФ, том 43, вып. 8, стр. 395 –398 *25 апреля 1986 г.*

ДРЕЙФОВАЯ СКОРОСТЬ ДЛЯ АКУСТИЧЕСКИХ ПОЛЯРОНОВ В ОДНОМЕРНЫХ ПРОВОДНИКАХ

А.А.Гоголин

Вычислена дрейфовая скорость $v_0(E)$ для акустического полярона с сильной связью в одномерной полимерной цепочке. Рассмотрены предельные случаи низких и высоких температур. В зависимости $v_0(E)$ имеется характерное насыщение в сильных полях вблизи скорости звука s. Такое поведение дрейфовой скорости наблюдалось недавно в полидиацетилене PDA [5].

Основными носителями тока в одномерных полимерных цепях являются поляроны [1, 2], образующиеся за счет сильного взаимодействия электронов с одномерными акустическими фононами [3]. Деформационное взаимодействие, линейное по фононным координатам Q_k, в единицах $m = \hbar = s = 1$ описывается гамильтонианом:

$$H = \sum_k Q_k\left(V_k e^{ikx} + \frac{1}{2}k^2 Q_{-k}\right) - \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad V_k = Dk(2M_1)^{-1/2} = k(\alpha\omega_1)^{1/2}. \quad (1)$$

Здесь m – масса электрона, s – скорость звука, D – деформационный потенциал, M_1 – масса элементарной ячейки, $\omega_1 = 2s/a$ (a – постоянная решетки). Безразмерная константа сильной связи $\alpha = D^2/2M_1\omega_1 \gg 1$ в случае полиацетилена $(CH)_X$ равна 4 ($D = 3$ эВ, $s = 10^6$ см/с, $a = 1{,}4$ Å, $M_1 = 13$ ат. ед. [4]), а в случае полидиацетилена PDA она равна 12 ($D = 3{,}7$ эВ, $s = 3{,}6\cdot10^5$ см/с, $a = 4{,}9$ Å, $M_1 = 420$ ат. ед. [5]).

Спектр $\epsilon(p)$ для акустического полярона с сильной связью при скорости $v \sim 1$ определяется классическим минимумом H в движущейся со скоростью v системе отсчета [6]:

$$\epsilon = J + pv, \quad p = M^* v, \qquad J = J_1 + J_2, \quad (2)$$

где J_1, J_2 и M^* определяются волновой функцией основного состояния $\psi_0(x)$ для электрона в поляронной яме:

$$2J_1 = \int dx(\partial\psi_0/\partial x)^2, \quad 2J_2 = w(v^2-1)^{-1}, \quad M^* = w(1-v^2)^{-2}, \quad w = 2\alpha\int dx\,\psi_0^4(x). \quad (3)$$

Уровни электрона в яме $\tilde{\epsilon}_n$ и его волновые функции $\psi_n(\xi)$ в безразмерных единицах введенных через перенормированную константу связи $\tilde{\alpha} = \alpha(1-v^2)^{-1} = 1$, имеют вид[7-13]

$$\psi_0(\xi) = (\sqrt{2}\operatorname{ch}\xi)^{-1}, \quad \tilde{\epsilon}_0 = -1, \quad \psi_{\tilde{q}}(\xi) = e^{i\tilde{q}\xi}(\operatorname{th}\xi - i\tilde{q})/(1-i\tilde{q}), \quad \tilde{\epsilon}_{\tilde{q}} = \tilde{q}^2. \tag{4}$$

Здесь $\psi_0(\xi)$ – волновая функция основного состояния Рашба – Холстейна [7, 8], $\psi_{\tilde{q}}(\xi)$ – волновые функции непрерывного спектра, где $\xi = x/\tilde{\alpha}$, а энергия $\epsilon_{\tilde{q}}$ измеряется в единицах $\tilde{\alpha}^2 ms^2$.

Величины $J = -\tilde{\alpha}^2/6$ и $M^* = -2\partial J/\partial v^2$ [9] определяют спектр полярона $\epsilon(p)$ и его асимптотическое поведение на больших импульсах $p \gg \alpha^2$:

$$\epsilon(p) \approx p\left(1 - \frac{3}{4}(2\alpha^2/3p)^{1/3}\right), \qquad v(p) \approx 1 - \frac{1}{2}(2\alpha^2/3p)^{1/3}. \tag{5}$$

Поэтому выход на асимптотическое значение $v = 1$ при $p \to \infty$ происходит в этом случае гораздо медленнее, чем, например, для пьезополярона [6].

Для вычисления подвижности μ воспользуемся общим методом Воловика и Эдельштейна [14] для пьезополярона с сильной связью. Этот метод использовался также для вычисления подвижности обычного полярона [14, 15]. Другой способ вывода уравнений для μ в случае обычного полярона был предложен Мельниковым и Воловиком [16]. При $v \sim 1$ перейдем в движущуюся со скоростью v систему отсчета, что приводит к допплеровскому сдвигу фононных частот $\omega_k = |k| \to \tilde{\omega}_k = \omega_k - kv$. Воспользуемся затем общим формализмом [14], основанным на преобразованиях Боголюбова – Тябликова [17] и Ли – Лоу – Пайнса[18]. Подвижность μ при температурах фононного термостата $T \ll \alpha^2$ описывается уравнением Фоккера – Планка (ФП) :

$$eE\,\partial f/\partial p = \frac{\partial}{\partial p}\left(Af + B(\partial f/\partial p)\right), \; A = Bv/T. \tag{6}$$

Коэффициент B выражается через амплитуду двухфононного рассеяния $W_{kk'}$ и планковские числа заполнения фононов N_k [14-16]:

$$B = \pi \sum_{k,k'} N_k(N_{k'} + 1)|W_{kk'}|^2 (k-k')^2 \delta(\tilde{\omega}_k - \tilde{\omega}_{k'}), \; \tilde{\omega}_k = \omega_k - kv. \tag{7}$$

Величины $W_{kk'}$ удовлетворяют уравнению для рассеяния фононов на тяжелой частице [14-16] с учетом допплеровского сдвига (7):

$$W_{kk'} = V_{kk'} - \sum_{k''} V_{kk''} D_{k'k''} W_{k''k'}, \quad D_{kk'} = 2\tilde{\omega}_{k'}/(\tilde{\omega}_k^2 - \tilde{\omega}_{k'}^2 + i\delta), \tag{8}$$

$$\begin{aligned}(\tilde{\omega}_k \tilde{\omega}_{-k'})^{1/2} V_{kk'} &= \sum_q v_{0q}(k) v_{q0}(-k')(\epsilon_0 - \epsilon_q)^{-1}, \; v_{0q}(k) = V_k \int dx \psi_0^*(x) e^{ikx} \psi_q(x) = \\ &= \frac{i\pi 2^{-1/2} \tilde{k} V_k}{(1-i\tilde{q})\operatorname{ch}\left(\frac{\pi}{2}(\tilde{k}+\tilde{q})\right)}.\end{aligned} \tag{9}$$

Поле $E \sim E_0 \sim \alpha^2/el \ll \alpha^2/e\tilde{a}$, где $\tilde{a} \sim \alpha^{-1}$ – размер полярона, а $l \sim T^2/Bv$ – длина его свободного пробега. Поэтому оно не вызывает возбуждения электрона в яме и лишь разгоняет полярон до скоростей $v \sim 1$, не приводя к его разрушению. Большая энергия полярона $\epsilon \sim \sim \alpha^2 \gg v/l$ улучшает критерии применимости кинетического уравнения [6]. Условие $T \ll \alpha^2$ обеспечивает малость тепловых фононных импульсов $k \sim T \ll p \sim \epsilon$, необходимую для справедливости ФП разложения [6].

При низких температурах $T \ll \alpha$ уравнение [8] решается с помощью общего метода [14] путем разложения по $k, k' \sim T \ll k'' \sim \alpha$ и использования известных тождеств для $V_{kk'}$ [14, 17]. Окончательные выражения для $W_{kk'}$ и B:

$$W_{kk'} = V_k V_{-k'} kk'(M^*)^{-1} (\tilde{\omega}_k \tilde{\omega}_{-k'})^{-3/2}, \quad B = B_0(T) A_0 \varphi_0(v), \quad B_0(T) = T^5/\alpha^2, \tag{10}$$

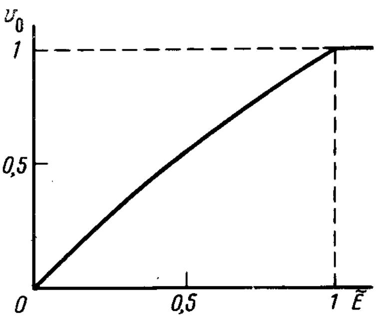
$$A_0 = \frac{3}{5}\ (2\pi)^3,\ \varphi_0(v) = \varphi(v) + \varphi(-v),\ \varphi(v) = \frac{15}{\pi^4}\ (1+v)^3\chi_0 \int_0^\infty \frac{k^2 dk \exp(k(\chi_0 - 1))}{\operatorname{sh} k \operatorname{sh} k\chi_0}, \quad \chi_0 = \frac{1-v}{1+v}. \tag{11}$$

Общее решение $f(p)$ для уравнения ФП (6) и выражение для дрейфовой скорости $v_0(E)$ имеют вид

$$\ln f(p) = -T^{-1}\epsilon(p) + eE\int_0^p dp' B(p'),\quad v_0 = C_0^{-1}\int dp v(p) f(p),\ C_0 = \int dp f(p). \tag{12}$$

Из него следует, что при $T \ll \epsilon$ и $E \sim E_0 = A_0 B_0(T)/eT$ величина v_0 определяется экстремумом $\ln f(p)$ и удовлетворяет уравнению

$$v_0\varphi_0(v_0) = \widetilde{E},\ \widetilde{E} = E/E_0,\quad E_0 = A_0 B_0(T)/eT. \tag{13}$$



Зависимость дрейфовой скорости акустического полярона v_0 от поля $\widetilde{E} = E/E_0$ при низких температурах

График зависимости $v_0(\widetilde{E})$ изображен на рисунке. При $\widetilde{E} < 1$ зависимость $v_0(\widetilde{E})$ почти линейна и определяет подвижность $\mu = s/E_0$, а при $\widetilde{E} \gtrsim 1$ величина $v_0(\widetilde{E}) = 1$ постоянна. Это следует из выражения (12) для v_0, в котором при $\widetilde{E} \geqslant 1$ возникает расходимость интегралов по p при $p \to \infty$. В реальных системах она обрезается вблизи бриллюэновского импульса $k_0 \sim a^{-1} \gg \alpha^2$, так что $v_0(\widetilde{E}) \approx v(k_0) < 1$ (5) и может не достигать 1. При $E \gg 1$ импульс $p \approx k_0$ и система не описывается уже континуальной моделью, поэтому наши результаты в этой области полей носят лишь качественный характер. Отметим, что при $\widetilde{E} \gg 1$ полярон начинает чувствовать конечность ширины зоны и величина $v_0(\widetilde{E})$ может начать уменьшаться [19].

В области более высоких температур $\alpha \ll T \ll \alpha^2$ интегральный член в уравнении (8) мал по параметру $\alpha/T \ll 1$ и поэтому $W_{kk'} = V_{kk'}$. В этом случае $B_0(T) = T^2\alpha$, $A_0 = 1{,}14$, $\varphi_0(v) = (1-v)$ при $(1-v) \gtrsim \alpha/T$. Из уравнений (12), (13) при этом следует, что $v_0(\widetilde{E}) = 1$ при всех $\widetilde{E} > \alpha/T = \widetilde{E}_1$. Отметим, что и в этом случае характерные $p \approx k_0$, поскольку в интегралах (12) возникает расходимость на больших p. В такой ситуации

$$v_0(\widetilde{E}) \approx v(k_0) < 1 \text{ при } \widetilde{E} \gtrsim \widetilde{E}_1 \text{ и } (1-v) \gtrsim \alpha/T.$$

Такой эффект наблюдался недавно Донованом и Уилсоном в PDA [5] при комнатной температуре. В этих экспериментах было обнаружено примерное постоянство величины $v_0 = 0{,}715$ в широком интервале полей $E \sim 1 - 10^4$ В/см. Наша оценка поля $E_1 \sim s(\alpha ms)^2/e\hbar \sim 10$ В/см при $\alpha \sim 10$, $s \sim 10^5$ см/с и $m \sim 0{,}1 m_0$ (m_0 – масса свободного электрона) [5] согласуется с этими результатами. Величина $v_0 = 0{,}715$ [5] дает при этом согласно формуле (5) при $p = k_0$ весьма разумное значение $k_0 = 0{,}8$ от стандартной величины π/a.

В заключение отметим, что некоторые качественные оценки подвижности μ в слабых полях при малых скоростях $v \ll 1$ были сделаны недавно Шюттлером и Холстейном [12]. В области слабых полей их оценки согласуются с нашими результатами. Попытка вычисления зависимости $v_0(E)$ в области сильных полей была предпринята Уилсоном [11]. Однако, из-за ряда произвольных допущений и отдельных неточностей правильное выражение для этой величины в [11] получено не было.

Автор выражает благодарность С.А.Бразовскому, Г.Е.Воловику и Э.И.Рашба за полезное обсуждение результатов работы.

Литература

1. *Su W.P., Schrieffer J.R., Heeger A.J.* Phys. Rev. Lett., 1979, **42,** 1698; Phys. Rev., 1980, **B22,** 2099.
2. *Бразовский С.А.* ЖЭТФ, 1980, **78,** 677; *Бразовский С.А., Кирова Н.Н.* Письма в ЖЭТФ, 1981, **33,** 6.
3. *Moses D., Denenstein A., Pron A., Heeger A.J., MacDiarmid A.G.* Solid State Comm., 1980, **36,** 219.
4. *Mele E.J., Rice M.J.* Phys. Rev. Lett., 1980, **45,** 926.
5. *Donovan K.J., Wilson E.G.* J. Phys. C, 1985, **18,** L51; Phil. Mag., **1981, B44,** 9, 31.
6. *Воловик Г.Е., Эдельштейн В.М.* ЖЭТФ, 1974, **67,** 273.
7. *Рашба Э.И.* Оптика и спектроскопия, 1957, **2,** 88.
8. *Holstein T.* Ann. Phys., 1959, **8,** 325, 343.
9. *Whitfield G., Shaw P.B.* Phys. Rev., 1976, **B14,** 3346.
10. *Давыдов А.С.* УФН, 1982, **138,** 603.
11. *Wilson E.G.* J. Phys. C, 1983, **16,** 6739.
12. *Schüttler H.B., Holstein T.* Phys. Rev. Lett., 1983, **51,** 2337.
13. *Мельников В.И.* ЖЭТФ, 1977, **72,** 2345.
14. *Воловик Г.Е., Эдельштейн В.М.* ЖЭТФ, 1973, **65,** 1947.
15. *Воловик Г.Е., Мельников В.И., Эдельштейн В.М.* Письма в ЖЭТФ, 1973, **18,** 138.
16. *Мельников В.И., Воловик Г.Е.* ЖЭТФ, 1973, **65,** 1637.
17. *Боголюбов Н.Н.* Укр. матем. журнал, 1950, **2,** 3; *Тябликов С.В.* ЖЭТФ, 1951, **21,** 377.
18. *Lee T.D., Low F.E., Pines D.* Phys. Rev., 1953, **90,** 297.
19. *Гоголин А.А.* Письма в ЖЭТФ, 1980, **32,** 30; ЖЭТФ, 1985, **88,** 2063.

Институт теоретической физики им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
20 марта 1986 г.