

# Новый динамический механизм рождения топологических зарядов в соизмеримой одномерной волне зарядовой плотности вблизи контакта с нормальным металлом

А. С. Рожавский, Ю. В. Першин, А. С. Ковалев

*Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины,  
Украина, 310164, г. Харьков, пр. Ленина, 47  
E-mail: rozhavsky@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 11 июля 1997 г., после переработки 3 августа 1997 г.

Исследована динамика конверсии электронов проводимости в топологические солитоны соизмеримости волны зарядовой плотности (ВЗП) во внешнем электрическом поле. Обнаружен и объяснен новый механизм возникновения нелинейного тока ВЗП вблизи контакта с металлом. Нелинейный ток обусловлен рождением солитонов проводимости движущимся профилем параметра порядка, образующимся в процессе конверсии электронов в коллективные возбуждения фазы ВЗП. Зависимость тока от поля пороговая и не имеет аналогов среди объемных механизмов нелинейности тока ВЗП.

Досліджено динаміку конверсії електронів провідності в топологічні солітони спільномірності хвилі зарядової густини (ХЗГ) у зовнішньому електричному полі. Виявлено і пояснено новий механізм виникнення нелінійного струму ХЗГ поблизу контакту з металом. Нелінійний струм обумовлено народженням солітонів провідності рухомим профілем параметра порядку, який утворюється у процесі конверсії електронів в колективні збудження фази ХЗГ. Залежність струму від поля порогова і не має аналогів серед об'ємних механізмів нелінійності струму ХЗГ.

PACS: 72.15.Nj, 73.20.Mf

## Введение

Хорошо известно, что ряд квазиодномерных металлов при понижении температуры переходит в диэлектрическую фазу Пайерлса–Фрелиха, сопровождающуюся возникновением решеточной сверхструктуры вдоль направления одномерности с периодом  $\pi/k_F$ . Модуль статической деформации решетки создает щель  $2\Delta$  в одноэлектронном спектре, а фаза параметра порядка  $\Delta \exp(i\phi)$  является электрически активной и обуславливает коллективный отклик пайерлсовского диэлектрика (ПД) на внешнее поле. Ее деформации называют волнами зарядовой плотности (ВЗП).

Изучение квазиодномерных проводников с ВЗП в первую очередь интересно тем, что они демонстрируют нелинейную электропроводность в достаточно слабых электрических полях (см., например, обзоры [1,2]). Нелинейная

проводимость носит пороговый характер и всегда объяснялась процессами, происходящими в объеме проводника. Существует два теоретических подхода к этому явлению: классический и квантовый [1,2]. Оба основаны на представлении о переносе заряда в ВЗП коллективной модой — фазой параметра порядка Пайерлса–Фрелиха, когда флуктуации заряда  $\delta\rho$  и ток  $j$  ВЗП даются для одной цепочки соотношениями Фрелиха (см., например, [1]):

$$\delta\rho = \frac{e}{\pi} \frac{\partial\phi}{\partial x}, \quad j = -\frac{e}{\pi} \frac{\partial\phi}{\partial t}, \quad (1)$$

где  $x$  — направление одномерности.

Практически всегда ВЗП на одной цепочке описывается уравнением синус-Гордон (СГ). Солитоны СГ играют роль носителей заряда.

В классической модели нелинейность электропроводности имеет вид [1]

$$j \sim \sqrt{E^2 - E_T^2}, \quad E > E_T, \quad (2)$$

пороговое поле  $E_T$  связано с массивным членом в уравнении СГ.

Квантовая модель связывает нелинейность с туннельным рождением электрическим полем солитон-антисолитонных ( $s\bar{s}$ ) пар и ток равен [2]:

$$j \sim (E - E_T) \exp\left(-\frac{E_0}{E - E_T}\right), \quad E > E_T. \quad (3)$$

Пороговое поле  $E_T$  определяется кулоновским взаимодействием солитона и антисолитона.

Современное состояние эксперимента не позволяет, однако, выбрать какую-либо из моделей, поэтому в настоящее время оба подхода равноправны, а, возможно, дополняют друг друга.

В последнее время стало ясно, что важную роль в проводимости ВЗП играют контактные явления на границе ВЗП–нормальный металл, где происходит конверсия тока электронов проводимости в коллективный ток ВЗП. Качественно необходимость существования канала конверсии обусловлена неустойчивостью свободного электрона или дырки в квазиодномерной пайерлсовской решетке относительно автолокализации с образованием коллективного заряда [3,4]. Этот канал обуславливает конечную проводимость через М–ВЗП границу при температурах  $T \ll \Delta$ , когда обычный одноэлектронный ток экспоненциально подавлен ( $\sim \exp(-\Delta/T)$ ) (см., например, [5]).

Заранее не очевидно, не возникает ли дополнительная нелинейность в канале конверсии. В настоящей работе исследован этот вопрос и показано, что в рамках упрощенной одномерной модели конверсии возникает нелинейная проводимость, структура которой отличается от (1) и (2), а именно

$$j \sim \frac{\sqrt{E - E_T} E}{A + \sqrt{E - E_T}}, \quad (4)$$

где  $E_T$ , как и в классической модели определяется массивным членом в уравнении СГ.

Исследование динамики процесса конверсии начато в работах [6,7]. В [6] предложен инстантонный механизм перехода свободных зарядов с уровня химического потенциала на границе М–ВЗП в конденсат ПД (валентную зону) с образованием коллективного заряда (профиля фазы ВЗП), локализованного у границы на расстояниях порядка  $\xi_0 = \hbar V_F / \Delta$ . В конденсат всегда переходят два электрона, что, с

точки зрения внешней по отношению к ПД границы, напоминает процесс андреевского рассеяния. В отличие от сверхпроводника, в котором единственным параметром, определяющим пространственную и временную динамику параметра порядка, является  $\Delta$ , в ПД существует три хорошо определенных масштаба времени [2,3,6,7]:

– время формирования квазичастичного спектра  $\tau_s \sim \hbar / \Delta$ ;

– время деформации модуля параметра порядка  $\tau_\Delta \sim \bar{\omega}^{-1}$ , где  $\bar{\omega}$  – порядка дебаевской частоты,  $\bar{\omega} \ll \Delta$ ;

– время эволюции фазы параметра порядка  $\tau_\phi \gg \tau_\Delta \gg \tau_s$ , позволяющие сформулировать и последовательно решить задачу о трансформации заряда электронов через границу. А именно, за время  $\tau_s$  формируется квазичастичный уровень на флуктуации щели (на инстантоне); за время  $\tau_\Delta$  происходит сама флуктуация, связанный уровень поглощается валентной зоной и формируется начальное условие для задачи об эволюции фазы от границы  $x = 0$  в область  $x > 0$   $\delta\phi = \phi(x = \infty) - \phi(x = 0) = 2\pi$ , отвечающее заряду  $2e$  (см. (1)); за времена  $\tau_\phi$  из начального условия вырабатывается устойчиво движущийся профиль ВЗП [7].

В работе [7] нами исследовалась эволюция начального условия в кластере ближайших цепочек, несущих несоизмеримую ВЗП. Роль массивного члена в уравнении СГ играло межцепочечное взаимодействие вида  $\sin(\phi_i - \phi_{i+1})$ . В уравнении для соизмеримой ВЗП на каждой цепочке дополнительно появляется слагаемое  $\sin(M\phi_i)$ , где  $M$  – целое число [1,2]. Соответственно топологический солитон имеет асимптотику  $\delta\phi = \phi(x = \infty) - \phi(x = -\infty) = 2\pi/M$ . Такой солитон является устойчивым носителем дробного заряда  $2e/M$  в ВЗП [2]. Представляет безусловный интерес изучение эволюции начального условия  $\delta\phi = 2\pi$  в  $M$  солитонов и исследование их динамики в электрическом поле. В данной работе поставлена и решена такая задача для одной цепочки.

В работе [7] задачу Коши для ВЗП удалось свести к точно интегрируемой и решить методом обратной задачи рассеяния. При учете внешнего электрического поля в правой части уравнения СГ точная интегрируемость нарушается и исследование проведено численно. Выяснилось, что в электрическом поле  $s\bar{s}$ -пары рождаются с интенсивностью, обратно пропорциональной времени  $\bar{\tau}$  (14), что и определяет ток (4).

По нашему мнению, природа нелинейности (4) такова: начальный профиль ВЗП у границы имеет энергию порядка  $\Delta$ , что намного превышает статическую энергию топологического солитона, несущего заряд  $2e/M$ . При движении от границы из высокоэнергетического начального профиля фазы за время  $\tau_0$  рождаются нелинейные деформации в области движущегося фронта, которые за время порядка  $\sqrt{2d/(E - E_T)}$ , где  $d$  — ширина солитона, превращаются в топологические солитоны с асимптотикой  $\delta\varphi = 2\pi/M$  или антисолитоны с  $\delta\varphi = -2\pi/M$  (в зависимости от направления электрического поля), движущиеся за фронтом вдоль или против поля. Соответственно полное время рождения устойчивого топологического заряда  $\pm 2e/M$  есть  $\bar{\tau} = \tau_0 + \sqrt{2d/(E - E_T)}$ . Частота рождения  $\bar{\tau}^{-1}$  определяет число рожденных зарядов, т.е. нелинейную проводимость (4).

Заметим, что похожий динамический эффект множественного рождения доменных стенок движущейся доменной границей обсуждался в [8].

### Модель и численный анализ

Пусть ВЗП занимает полуось  $x \geq 0$ . Лагранжиан ВЗП в поле равен (см., например, [2])

$$L = \frac{1}{\pi\hbar V_F} \left\{ \frac{\Delta^2}{\omega^2} \left( \frac{\partial\varphi}{\partial t} \right)^2 - \frac{\hbar^2 V_F^2}{4} \left( \frac{\partial\varphi}{\partial x} \right)^2 + \frac{\Delta^2}{\omega^2} \frac{2}{M^2} \omega_0^2 \cos M\varphi + \frac{e}{\pi} \hbar V_F E (\varphi - \varphi_0) \right\}, \quad (5)$$

где  $\omega_0$  — частота соизмеримости. Здесь  $\varphi_0$  есть фаза при  $x \rightarrow \pm\infty$ . Такая форма записи последнего слагаемого в (5) учитывает то, что электрическое поле действует на ВЗП лишь в области, где  $|\partial\varphi/\partial x| \neq 0$ .

В ненулевом поле  $E$  величина  $\varphi_0$  перенормируется, что видно из уравнения движения, которое мы приводим в безразмерных единицах

$$\tau = \omega_0 t \sqrt{2/M}, \quad y = x \left( \frac{\hbar V_F \bar{\omega}}{2\Delta\omega_0} \sqrt{M/2} \right), \quad (6)$$

для переменной  $\chi = \varphi - \varphi_0$ .

Уравнение движения имеет вид

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial \tau^2} - \frac{\partial^2 \chi}{\partial y^2} + \sin M(\chi + \varphi_0) = \varepsilon, \quad (7)$$

где

$$\varepsilon = \frac{e}{2\pi} \hbar V_F \frac{M\bar{\omega}^2}{\Delta^2\omega_0^2} E \quad (8)$$

и  $\varphi_0 = \arcsin \varepsilon$ .

Уравнение (7) дополняется начальными и граничными условиями, соответствующими вышеописанной иерархии времен в задаче конверсии:

$$\frac{\partial \chi}{\partial \tau} \Big|_{\tau=0} = 0, \quad (9a)$$

$$\chi(\tau=0) = -2\pi\theta(\bar{\xi}_0 - y) - \varphi_0(\varepsilon), \quad (9b)$$

$$\chi(y=0) = -2\pi - \varphi_0(\varepsilon), \quad (9b)$$

где  $\bar{\xi}_0$  — длина когерентности  $\bar{\xi}_0 = \hbar V_F / \Delta$  в безразмерных переменных (6),  $\bar{\xi}_0 \ll 1$ ;  $\theta(y)$  — функция Хевисайда.

Заметим, что малый масштаб изменения начального условия  $\bar{\xi}_0 \ll 1$  формально не может появиться при решении чисто фазовой задачи с лагранжианом (5), так как последний отвечает длинноволновому приближению  $|\varphi'| \ll \bar{\xi}_0^{-1}$  [2]. Как обсуждалось выше (см. также [7]), такое начальное условие является результатом сшивки инстантонного решения [6], сформированного за время  $\tau_\Delta$ , с длинноволновым описанием, справедливым при  $\tau \geq \tau_\Delta$ .

Уравнение (7) с краевыми условиями (9) решалось численно методом конечных разностей. Разностное уравнение, соответствующее уравнению (7), имеет вид

$$\frac{\chi_{i+1,k} + \chi_{i-1,k} - 2\chi_{i,k}}{(\Delta\tau)^2} - \frac{\chi_{i,k+1} + \chi_{i,k-1} - 2\chi_{i,k}}{(\Delta y)^2} + \sin M(\chi + \varphi_0) = \varepsilon, \quad (10)$$

где  $\Delta\tau$  — шаг по времени,  $\Delta y$  — шаг по координате,  $\chi_{i,k} = \chi(\Delta\tau i, \Delta y k)$ . Уравнение (10) решалось с различными значениями  $\Delta\tau$ ,  $\Delta y$ ,  $M$  и различными начальными условиями (9). Типичные решения построены с  $M = 3$  (рис. 1–3), число узлов  $k = 10\,000$ . Оказалось, что изменение начальных условий (9) слабо сказывается на характере решения уравнения (7).

В слабом тормозящем поле  $|\varepsilon| \ll 0,1$  (рис. 1) начальный профиль, движущийся против поля, через некоторое время теряет устойчивость и просто дробится на солитоны соизмеримости. Последние тормозятся, затем меняют направление движения на противоположное и в конце концов собираются вблизи  $x = 0$ . Наблюдается

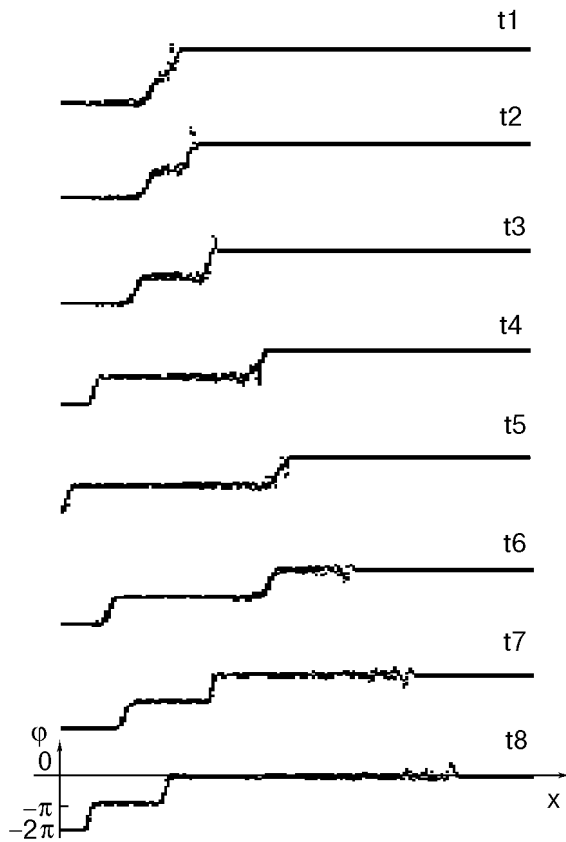


Рис. 1. Эволюция начального условия в тормозящем поле,  $\epsilon = -0,05$ ,  $M = 2$ :  $t_1 < t_2 < t_3 < t_4 < t_5 < t_6 < t_7 < t_8$ .

излучение, движущееся с максимальной скоростью. При увеличении поля в дополнение к этому эффекту наблюдается рождение зарядов полем (рис. 2).

В ускоряющем поле оказалось, что при  $\epsilon < 0,1$  начальное условие тривиально распадается со временем на топологические солитоны, а поле лишь сказывается на времени образования солитонов и их скорости. Перед профилем наблюдалось движение излучения с максимально возможной скоростью. При  $\epsilon > 0,1$  наблюдается рождение зарядов полем (рис. 3). Нечто подобное отмечалось в работе [9] при численном анализе движения джозефсоновских вихрей в системе с диссипацией. Отличие, однако, в том, что мы видим не бесконечное число рожденных зарядов, а конечное, число которых зависит от поля (рис. 4). Зависимость времени рождения зарядов от поля приведена на рис. 5, она хорошо аппроксимируется законом  $\bar{\tau} = A + B/\sqrt{\epsilon - \epsilon_T}$ .

Изменение полярности рожденных зарядов при перемене знака поля однозначно указывает на то, что механизмом их образования является поляризация: при  $\epsilon > 0$  солитон движется вдоль

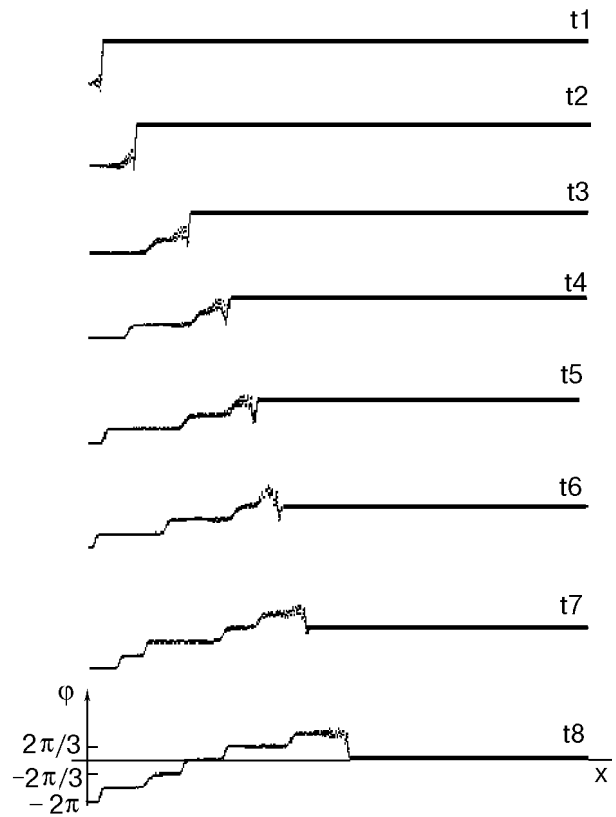


Рис. 2. Эволюция начального условия в тормозящем поле,  $\epsilon = -0,3$ ,  $M = 3$ . С течением времени из начального условия ( $t_1$ ) происходит рождение солитонов ВЗП с асимптотикой  $2\pi/3$ .  $t_1 < t_2 < t_3 < t_4 < t_5 < t_6 < t_7 < t_8$ .

поля, а антисолитон против поля; при  $\epsilon < 0$  и  $\bar{\tau}$  меняются местами.

Время образования свободных носителей заряда оценим следующим образом.

Пусть за время  $\tau_0$  нелинейные флуктуации в движущемся с практически предельной скоростью профиле ВЗП рожают деформацию фронта с  $\delta\phi = 0$ . В отсутствие поля такой процесс не приводит к рождению зарядов, так как такая деформация движется вместе с фронтом, а не поляризуется.

При наличии поля  $\epsilon > 0$  будем считать, что передний фронт рожденной деформации продолжает двигаться вместе с фронтом ВЗП с предельной скоростью, а задний начинает тормозиться полем и в конце концов превращается в солитон с  $\delta\phi_s = 2\pi/M$ , который в дальнейшем изменяет направление движения на противоположное. Уравнения движения переднего  $x_+$  и заднего  $x_-$  фронтов деформации имеют вид

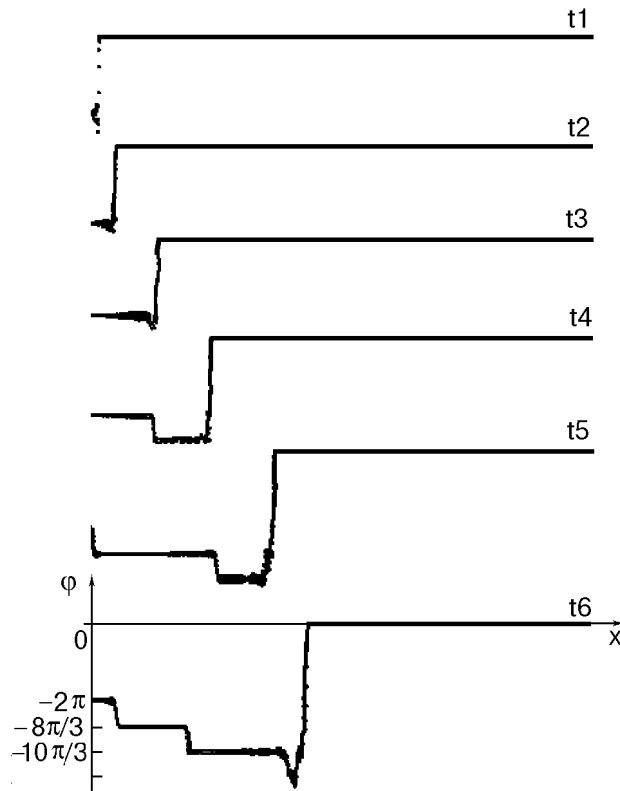


Рис. 3. Эволюция начального условия в ускоряющем поле,  $\varepsilon = 0,3$ ,  $M = 3$ . С течением времени из начального условия ( $t_1$ ) происходит рождение солитонов ВЗП с асимптотикой  $2\pi/3$ .  $t_1 < t_2 < t_3 < t_4 < t_5 < t_6$ .

$$\begin{aligned} (+): x_+ &= C_0(\tau - \tau_0) + x_0, \\ (-): x_- &= \frac{(\varepsilon - \varepsilon_T)\tau^2}{2} + \lambda\tau + C, \end{aligned} \quad (11)$$

где  $C_0$  — максимальная скорость в системе;  $\varepsilon_T$  — пороговое поле, а постоянные  $\lambda$  и  $C$  определяются из условий

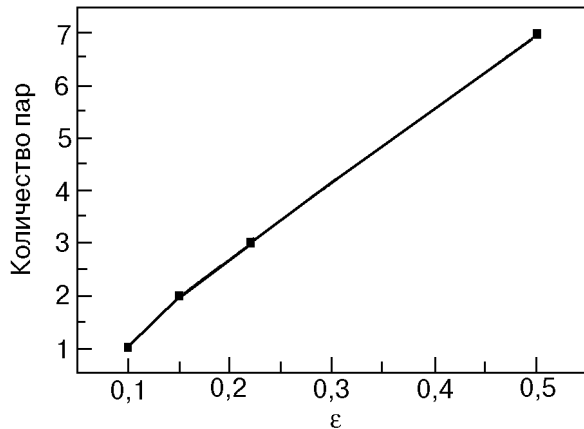


Рис. 4. Зависимость количества рожденных топологических зарядов от поля,  $M = 3$ ,  $\varepsilon > 0$ .

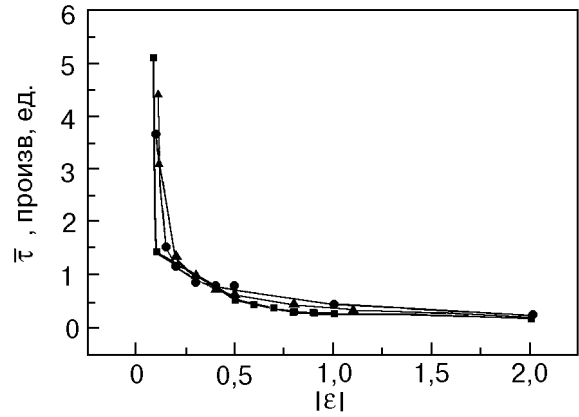


Рис. 5. Зависимость времени рождения топологических зарядов от поля  $|\varepsilon|$ : (■) — численный метод,  $\varepsilon > 0$ ; (●) — численный метод,  $\varepsilon < 0$ ; (▲) — формула (14).

$$x_+(\tau_0) = x_0, \quad \left. \frac{\partial x_-}{\partial \tau} \right|_{\tau = \tau_0} = C_0. \quad (12)$$

Как только поле  $\varepsilon - \varepsilon_T$  разведет за время  $\bar{\tau}$  центры  $x_+$  и  $x_-$  на расстояние порядка ширины кинка  $d$ , мы увидим задний профиль рожденной деформации, движущийся как свободный заряд, т.е.

$$d = x_+ - x_- = \left\{ -\frac{\bar{\tau}^2}{2} + \tau_0 \bar{\tau} - \frac{\tau_0^2}{2} \right\} (\varepsilon - \varepsilon_T). \quad (13)$$

Из (13) получим

$$\bar{\tau} = \tau_0 + \sqrt{2d/(\varepsilon - \varepsilon_T)}, \quad (14)$$

что и наблюдается в численном эксперименте (рис. 5). Величина  $\bar{\tau}^{-1}(\varepsilon)$  определяет интенсивность образования свободных зарядов, т.е. ток (4).

Таким образом, в работе обнаружен и объяснен новый механизм формирования нелинейного тока ВЗП в области вблизи границы с нормальным проводником. Этот механизм является дополнительным к уже известным, изученным в безграничной ВЗП.

1. *Electronic Properties of Inorganic Quasi One-Dimensional Compounds*, P. Monceau (ed.), Riedel, Company, Dordrecht (1985), Parts 1 and 2; *Density Waves in Solids*, G. Grüner (ed.), Addison-Wesley, Reading, Massachusetts (1994).
2. И. В. Криве, А. С. Рожавский, И. О. Кулик, *ФНТ* **12**, 635 (1986).
3. С. А. Бразовский, *ЖЭТФ* **51**, 342 (1980).
4. S. Brazovskii and S. Matveenko, *J. Phys. I (Paris)* **2**, 725 (1992).
5. B. Rejaei and G. E. Bauer, *Phys. Rev.* **B54**, 8487 (1996).
6. И. В. Криве, А. С. Рожавский, В. А. Рубаков, *Письма в ЖЭТФ* **46**, 99 (1987).

- 
7. A. S. Kovalev, Yu. V. Pershin, and A. S. Rozhavsky, *Phys. Rev.* **B53**, 16227 (1996); *ФНТ* **22**, 322 (1996).
  8. В. Г. Барьяхтар, Б. И. Иванов, М. В. Четкин, *УФН* **146**, 417 (1986).
  9. K. Nakagama, Y. Onodera, T. Nakamura, and R. Sato, *J. Appl. Phys.* **45**, 4095 (1974).

**A novel dynamic mechanism of topological charge creation in a commensurate charge density wave near the contact with a normal metal**

A. S. Rozhavsky, Yu. V. Pershin,  
and A. S. Kovalev

The dynamics of conversion of the conduction electrons into topological solitons of Charge Density

Wave (CDW) in external electric field is investigated. A novel mechanism of initiation of nonlinear CDW current in the vicinity of the CDW-normal metal interface is revealed and explained. The nonlinear current is produced by the charge creation by the moving profile of CDW. The latter is organized in the course of conversion of conduction electrons into collective CDW-excitations. The obtained field dependence of nonlinear current is a threshold one and has no analogues amongst the bulk mechanisms of CDW nonlinearity.