

电荷密度波经典模型的分析

李连钢 阮永丰[†]

(天津大学理学院, 天津 300072)

(2005 年 5 月 17 日收到, 2005 年 6 月 16 日收到修改稿)

从 Grüner 的非线性方程出发, 克服了原作者略去二阶微分项所带来的理论缺陷. 依据稳定周期解的结果, 推出了单段 CDW 的启动电场的阈值和各分段的滑行速度与外场成正比的关系, 揭示出单段 CDW 遵循欧姆定律是 Grüner 非线性方程的固有性质. 并将此结果用于多分段模型, 最终导出 CDW 非线性电导的指数律和阈值, 它们与实验公式一致, 同时也说明了窄带噪声的来源. 还就多分段的串联问题, 提出了“弹性连接”机理的内力处理方法, 得到了更为理想的结果.

关键词: CDW, 非线性电导, 指数律, 强作用杂质, 弱作用杂质, 弹性连接

PACC: 7145L

1. 引言

电荷密度波 (charge density wave, CDW) 是存在于低维材料中的一种电子周期调制现象, 是一种具有独特导电特性的电子输运现象. 人们曾经认为电荷密度波在无公度状态下可以无耗散地自由滑动而成为超导^[1], 因而在一段时间内引起了理论研究者的广泛兴趣. 虽然实际上由于杂质的“钉扎”作用, 使得 CDW 并不能成为超导输运机理^[2], 但有关 CDW 的起因和相关机理, 仍继续是理论物理工作者感兴趣的课题^[3-6]. 而且, 即使直到今天, 在人们广泛研究的高温超导材料中, 经常可以观测到 CDW 的现象^[7,8]. 电荷密度波的这些奇妙的现象, 自然吸引了很多研究者的兴趣^[9-11].

最早有关 CDW 的实验研究始于 Monceau 等对 NdSe₃ 的研究^[12,13]. 后来 Fleming 等人^[14]曾总结实验结果, 给出了电荷密度波电导率的经验公式

$$\alpha(E, T) = \sigma_a(T) + \sigma_b(T) \left(1 - \frac{E_T}{E}\right) e^{-\frac{E_1}{E-E_T}} \quad (1)$$

式中第一项为线性电导率, 是普通电导项, 第二项为非线性电导率, 产生于 CDW 的输运结果. E_1 为参量. 这个经验公式有两个主要特点, 一是存在着阈值 E_T , 二是存在一个指数因子的作用. 只有当电场 E

大于阈值 E_T 时, 指数项才出现. 同时还将出现“窄带噪声”, 噪声的基频 f_1 与非线性电流强度 J_{DC} 成正比关系, 即有

$$f_1 \propto J_{DC}. \quad (2)$$

后来的理论工作者都试图对 (1) (2) 式给出解释. Grüner 及其合作者最先提出单粒子经典模型^[15]. 根据 CDW 的导电特性与 Josephson 结的直流特性相似的事实, 他们将电荷密度波当作一个刚性的整体, 在外场驱动下, 它处于具有杂质的周期钉扎势场中运动, 并受到周围热浴的摩擦力作用, 其运动方程为

$$\frac{d^2\phi}{dt^2} + \Gamma \frac{d\phi}{dt} + \sin\phi = \frac{E}{E_0}, \quad (3)$$

其中 $E_0 = (\lambda/2\pi) (\hbar m\omega_0^2/e)$ 是常数, $\Gamma = (\omega_0\tau)^{-1}$ 为摩擦系数. 这是一个典型的非线性微分方程, 没有解析解. 他们假设摩擦力极大, 二阶导数项可以忽略, 积分求解得到

$$\sigma_{DC} = \sigma_0 \sqrt{E^2 - E_0^2}. \quad (4)$$

这里不仅得出了域场 E_0 , 而且在高场区域时, 其 1/2 方次律与指数律也极近似.

Grüner 理论与经验公式的符合程度为以后若干年中各种改进的精确理论所不能逾越, 它的唯一困难是 σ_{DC} 的导数在阈值条件下发散, 与实验有本质差别. 我们认为这是由于求解过程中忽略二阶导数

[†] E-mail: ruanyf@tju.edu.cn

项的近似处理造成的,而非(3)式本身所具有的困难.

Grüner 理论处理的是单段情况.对于多段问题,Portis^[16]假定 CDW 受到强作用和弱作用两类杂质的影响.强作用杂质随机分布,将 CDW 分割为小段,每一小段又被钉扎.弱作用杂质均匀分布,等效于一个阇场.强作用导出指数因子.这样得出的公式与经验公式完全相同.Portis 理论的不足之处是对每个分段服从欧姆律的假定没有说明理由,更重要的是,人们对速度不同的各个分段如何形成串联电流难以理解.对于多段串联的机理,Portis^[16]根本未做交待.早先曾经有 FLR (Fukuyama, Lee, Rice)^[3-5]提出过弹性连接的概念,但未做细化.Qjani^[6]引入了弹性势能项来具体地体现这种弹性连接的机理,其结果不仅使模型变得复杂,并且其结论只有在 $\alpha = 1$ 时才与实验符合(详见以下讨论),这在理论上存在一定的缺陷.

本文以(3)式为出发点,提出描述 CDW 的经典方程(单粒子)在 $E > E_s$ 时的解是一个大于零的周期解.在这种情况下,电荷密度波的整体运动速度与电场 E 成线性关系,即每段电荷密度波自然地服从欧姆定律.本文对多分段的串联问题,提出了“弹性连接”机理的内力处理方法,这种方法无需在方程中“添加”弹性连接项,所得结果也不存在如同 Qjani 的结果中那样的必须 $\alpha = 1$ 的限制.

2. 单粒子运动方程的解

2.1. 单粒子运动方程平庸解

首先来看方程(3)的平庸解,并通过分析平庸解得出一些有用的结论.令 ϕ 为常数,即可得到 ϕ 的平庸解(图1).数值如下:

$$\phi_1 = \sin^{-1} \frac{E}{E_0},$$

$$\phi_{2n-1} = (2n-1)\pi + \phi_1,$$

$$\phi_{2n} = (2n-1)\pi - \phi_1.$$

2.2. 单粒子方程解的分析

将(3)式改写为

$$\frac{1}{2} \frac{d}{d\phi} \left[\left(\frac{d\phi}{dt} \right)^2 \right] + \Gamma \left(\frac{d\phi}{dt} \right) + \sin\phi = \frac{E}{E_0}. \quad (5)$$

在 0 到 ϕ_j 区间对 ϕ 积分得

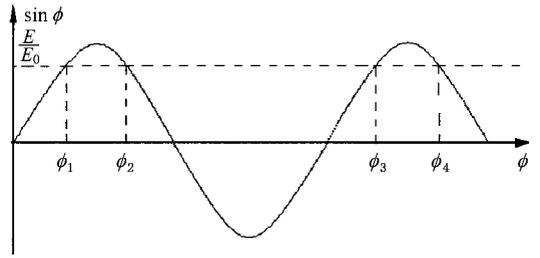


图1 $\phi_1, \phi_2, \phi_3, \phi_4$ 是方程的平庸解(图中曲线代表正弦的钉扎势场)

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \left(\frac{d\phi}{dt} \right)_j^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{d\phi}{dt} \right)_0^2 + \int_0^{\phi_j} \sin\phi d\phi \\ & = \int_0^{\phi_j} \left(\frac{E}{E_0} - \Gamma \frac{d\phi}{dt} \right) d\phi. \end{aligned} \quad (6)$$

若定义阇场 E_s 是使粒子以 0 速度由 $\phi = 0$ 开始,又以零速度到达 ϕ_2 则有

$$1 - \cos\phi_2 = \frac{E_s}{E_0} \phi_2 - \int_0^{\phi_2} \Gamma \frac{d\phi}{dt} d\phi. \quad (7)$$

设 $\Gamma = 0$, 可解出

$$\phi_2 \approx 0.74\pi, E_s = 0.72E_0.$$

当 Γ 增加时, E_s 增加, ϕ_2 减小, 当 ϕ_2 减小到 $\frac{\pi}{2}$ 时,

$\phi_2 = \phi_1, E_s = E_0$. 在此情况下, $\frac{E_s}{E_0} - \sin\phi$ 恒为正. 作

为一个被动力 $\Gamma \frac{d\phi}{dt}$ 永远不能超过主动力 $\frac{E_s}{E_0} - \sin\phi$,

因此粒子将不可能停止于 $\phi_2 = \phi_1$. 因此按定义无论 Γ 多大 E_s 决不能等于 E_0 , 与上面结合可定出

$$0.72E_0 < E_s < E_0.$$

方程(3)在 E 小于阇场 E_s 时, $t \rightarrow \infty$, 它只有静止状态解. 只有当 E 大于阇场 E_s 时, 方程才能有稳定持续运动形式的解.

我们通过数值计算方法, 可以看到当 $E \geq E_s$ 时, 方程的稳定解是一个大于零的周期解, 图2给出了

$E > E_s$ 时, 方程(3)的 $\frac{d\phi}{dt} - \phi$ 数值解曲线.

用 $\left(\frac{d\phi}{dt} \right)_{\min}$ 代表 $\frac{d\phi}{dt} - \phi$ 的周期函数的极小值, 当

$E \geq E_s$ 时, 有 $\left(\frac{d\phi}{dt} \right)_{\min} > 0$, 电荷密度波整体将以速度

$\left(\frac{d\phi}{dt} \right)_{\min}$ 滑动, $\left(\frac{d\phi}{dt} \right)_{\min}$ 即是恒定速度. 而当 $E = E_s$

时, $\left(\frac{d\phi}{dt} \right)_{\min} = 0$, 电荷密度波将受最小速度的牵制,

整体将不会滑动,恒定速度为 0,其内部只存在着各部分之间的相对振动.

弹性形变,其中直流分量,即平均速度

$$\left(\frac{d\phi}{dt}\right)_a = \frac{1}{\Gamma} \frac{E_s}{E_0} \quad (11)$$

转化为固定形变而失去对电流的贡献.谐波分量则形成驻波,产生窄带噪声.其基波波长就是 CDW 的波长 λ .只有单粒子模型中的稳定速度 $\left(\frac{d\phi}{dt}\right)_c$ 导致分段的整体运动,成为滑行电流.

依照 Portis 假定电荷密度波受到强作用和弱作用两类杂质的作用,强作用杂质按

$$P(l_i) = \frac{1}{l_i} e^{-l_i/l_i} \quad (12)$$

随机分布,将电荷密度波分为小分段.每一小分段的末端被一强作用杂质扎住.因每一个强作用杂质钉扎相同,对 l_i 分段单位长度的钉扎势为 $\frac{l_i}{l_i} \sin\phi$.弱作用杂质均匀分布,对单位长度 CDW 钉扎势为一个常数,可以等效为一个负场强 E_T .这样得到第 l_i 分段电荷密度波的运动方程

$$\frac{d^2\phi}{dt^2} + \Gamma \frac{d\phi}{dt} + \frac{l_i}{l_i} \sin\phi = \frac{1}{E_0}(E - E_T). \quad (13)$$

依照上节的分析,此段 CDW 有一域场 E_i ,

$$(E_T + 0.72 \frac{l_i}{l_i} E_0) < E_i < (E_T + \frac{l_i}{l_i} E_0), \quad (14)$$

和整体滑行速度

$$\left(\frac{d\phi}{dt}\right)_{c,i} = \frac{1}{\Gamma E_0}(E - E_i), \quad (15)$$

其中 E_i 可表为

$$E_i = E_T + \frac{l_i}{l_i} \mu E_0, \quad (16)$$

其中 $0.72 < \mu < 1$ 为一确定的常数,因 Γ 实际上很大,可近似取 $\mu = 1$.

(14) 式和 (15) 式表明,由于各分段长度不同,在一定外场作用下,有的分段能启动,有的不能启动.对启动的诸小段分段,整体滑行速度也各不相同.但由于各分段是串联的,两分段速度不同,则在界面上形成压缩或拉伸形变,使速度快的受到附加阻力,使速度慢的受到附加推力,直到两分段以相同速度滑行.对于 CDW 的整体来说,这种分段之间不同产生的形变弹性力属于内力.所以问题归结为整个 CDW 在那些启动分段的力的总和作用下的运动.这样,全部的 CDW 组成了一个由“弹性连接”串联的系统.这种理论上的处理是 Portis, Qjani 的文章中没有提

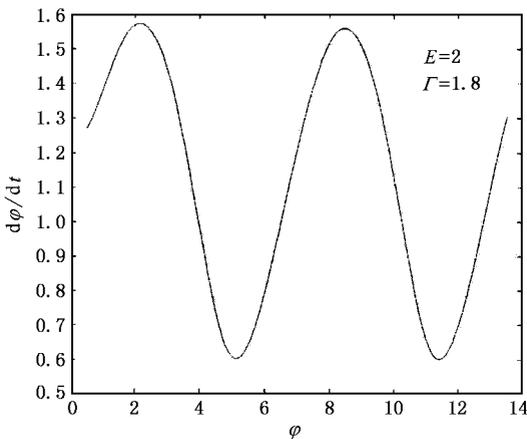


图2 $\frac{d\phi}{dt} - \phi$ 曲线

我们知道,在稳定解情况下 $\frac{d\phi}{dt} - \phi$ 曲线是以 2π 为周期.将方程 (5) 从 0 至 2π 对 ϕ 积分,这里讨论的是方程的稳定解,所以有

$$\oint d\left[\left(\frac{d\phi}{dt}\right)^2\right] = 0.$$

最后,对方程 (3) 积分就得

$$\frac{E}{E_0} = \frac{\Gamma}{2\pi} \oint \frac{d\phi}{dt} d\phi. \quad (8)$$

令 $E = E_s$, 此时 $\frac{d\phi}{dt}$ 改为 $\left(\frac{d\phi}{dt}\right)_a$, 下标 a 表示 $\frac{d\phi}{dt}$ 是周期性变化的函数,代入 (8) 式,得

$$\frac{E_s}{E_0} = \frac{\Gamma}{2\pi} \oint \left(\frac{d\phi}{dt}\right)_a d\phi. \quad (9)$$

当 $E > E_s$ 时从 (8) 式中减去 (9) 式

$$\frac{E - E_s}{E_0} = \frac{\Gamma}{2\pi} \oint \left[\frac{d\phi}{dt} - \left(\frac{d\phi}{dt}\right)_a \right] d\phi$$

令 $\frac{d\phi}{dt} = \left(\frac{d\phi}{dt}\right)_c + \left(\frac{d\phi}{dt}\right)_a$, 显见, $\left(\frac{d\phi}{dt}\right)_c$ 为恒定速度,且由下式决定:

$$\left(\frac{d\phi}{dt}\right)_c = \frac{E - E_s}{\Gamma E_0}. \quad (10)$$

3. 多分段模型的应用

现将上面结论推广到多分段(多粒子)的情形,由于周期速度随 ϕ 是周期变化的,所以在电荷密度波中的不同位置将有不同的速度.这就形成电荷密度波内部之间的相对运动.这种相对运动必将引起

出的.

由(16)式,当外场为 E 时,只有那些长度为

$$l_i \geq l_E = l_i \frac{\mu E_0}{E - E_T} \quad (17)$$

的分段才能启动,于是有

$$\int_0^\infty \left\{ \frac{d^2 \phi}{dt^2} + \Gamma \frac{d\phi}{dt} \right\} l_i P(l_i) \frac{dl_i}{l_i} \\ = \int_{l_E}^\infty \left\{ \frac{l_i}{E_0} (E - E_T) - l_i \sin \phi \right\} P(l_i) \frac{dl_i}{l_i} \quad (18)$$

完成上式的积分运算,得到

$$\frac{d^2 \phi}{dt^2} + \Gamma \frac{d\phi}{dt} + e^{-\frac{\mu E_0}{E - E_T}} \sin \phi \\ = \frac{E - E_T}{E_0} \left(\frac{\mu E_0}{E - E_T} + 1 \right) e^{-\frac{\mu E_0}{E - E_T}}. \quad (19)$$

上式与(13)(14)式比较,并代入(16)式,可得多段 CDW 的滑行速度为

$$\left(\frac{d\phi}{dt} \right)_{c,CDW} = \frac{1}{\Gamma E_0} (E - E_T) e^{-\frac{\mu E_0}{E - E_T}}, \quad (20)$$

于是电导率为

$$\sigma_{DC} = \frac{nev_{CDW}}{E} = \sigma_0 \left(1 - \frac{E_T}{E} \right) e^{-\frac{\mu E_0}{E - E_T}}. \quad (21)$$

同时可得窄带噪声的基频为

$$f_1 = \frac{v_{CDW}}{\lambda} = \frac{Q}{2\pi ne} J_{DC}, \quad (22)$$

这与实验公式(1)(2)完全一致.

4. 讨 论

Grüner 及其合作者提出了 CDW 的经典方程(3)式^[15]. 本文依据(3)式的数值解结果,提出在 $E > E_S$ 时(3)式的解是一个大于零的周期解,由此得出,CDW 的单粒子运动是由周期变化速度和恒定速度叠加而成. 恒定速度形成每段 CDW 整体滑动,周期变化速度形成其内部的相对振动,并且导出恒定速度与电场的关系为

$$v = \frac{E - E_S}{\Gamma E_0}.$$

这样,对各分段 CDW 的速度与电场之间关系遵循欧姆定律,给出了自然的解释,而不是 Portis 理论的人

为假设. 我们将这些结果应用到多分段模型,得到了非线性电导的指数因子,结果令人满意. 可以看到,在最终结果中,阈值等于弱作用杂质等效的负场强,这一点和 Portis 的结论是一致的,并且周期变化的速度成为窄带噪声的来源. 本文还建立了各分段串联的“弹性连接”机理,将各个分段之间的串联矛盾,转变为分段之间的内力处理,将所有的 CDW 看作一个弹性连接的系统,然后进行积分,这样既克服了原先的矛盾,也得到了令人满意的结果.

本文的要点是提出了 Grüner 等人的描述 CDW 的经典方程(单粒子)在 $E > E_S$ 时的解是一个大于零的周期解,既然钉扎势 $\sin \phi$ 是个周期函数,从布洛赫定理来讲,粒子的运动方程具有周期性解就不难理解了.

本文对多分段的串联问题,提出了“弹性连接”机理的内力处理方法,这种方法无需在方程中另外添加弹性连接项,所得结果也不存在 Qjani 的结果中那样的必须 $\alpha = 1$ 的限制. Qjani^[6]是通过在方程中人为地添加弹性势能项来具体地体现 FLR 的弹性连接的概念. 在 Qjani 文章中,给出的电流密度的结果是

$$J_{CDW}(E) = J_0 \left(\frac{E}{E_T} - 1 \right)^\alpha,$$

其中的 α 是一个参数,与杂质的浓度有关. 由此推出的电导是

$$\sigma_{CDW}(E) = \sigma_0 \left(\frac{E_T}{E} \right) \left(\frac{E}{E_T} - 1 \right)^\alpha. \quad (23)$$

Qjani 在原文中指出,当 E 很大时, $\sigma_{CDW}(E)$ 具有趋于饱和极限的趋势,认为与实验的情况是基本符合的^[6]. 但是,我们看(23)式,实际上当 $\alpha > 1$ 时它的极限是发散的,而 $\alpha < 1$ 时极限为 0,这两种情况都与实验结果相左,只有 $\alpha = 1$ 时(23)式的极限才为一个有限数值,才与实验符合. 但是 α 作为一个与杂质的浓度有关的参数,限制 $\alpha = 1$,难于给出合理的物理解释. 而本文中(21)式,当电场 E 趋于无穷大时, σ_{DC} 的极限在数学上是严格成立的. 并且,我们给出的公式与 Fleming 和 Grimes 给出的经验公式完全符合,这种结果是非常理想的.

- [1] Frohlich H 1954 *Proc. R. Soc. London A* **223** 296 (in Chinese] 冯 天、王楠林、陈兆甲等 2002 物理学报 **51** 2113]
- [2] Lee P A , Rice T M , Anderson P W 1974 *Solid State Commun.* **14** 703 [11] Wang J F , Xiong R , Yu H *et al* 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 895 (in Chinese] 王俊峰、熊 锐、余 恒等 2004 物理学报 **53** 895]
- [3] Fukuyama H 1976 *J. Phys. Soc. Jpn.* **41** 513 [12] Monceau P , Ong N P , Portis A M , Meerschaut A , Rouxel J 1976 *Phys. Rev. Lett.* **37** 602
- [4] Fukuyama H , Lee P A 1978 *Phys. Rev. B* **17** 535 [13] Ong N P , Monceau P 1977 *Phys. Rev. B* **16** 3443
- [5] Lee P A , Rice T M 1978 *Phys. Rev. B* **19** 3970 [14] Fleming R M 1980 *Phys. Rev. B* **22** 5606
- [6] Qjani M , Arbaoui A , Ayadi A *et al* 1998 *Synthetic Metals* **96** 137 [15] Grüner G , Zawadowski A , Chaikin P M 1981 *Phys. Rev. Lett.* **46** 511
- [7] Jaiswal D , Tulapurkar A A , Ramakrishnan S *et al* 2002 *Physica B* **312** 142 [16] Portis A M 1982 *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **81** 59
- [8] Seibold G , Varlamov S 2003 *Physica C* **388** 309
- [9] White S R , Scalapino D J 2004 *Phys. Rev. B* **70** 220506
- [10] Feng T , Wang N L , Chen Z J *et al* 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2113

Analysis of the classic model of the charge density wave

Li Lian-Gang Ruan Yong-Feng[†]

(School of Science , Tianjin University , Tianjin 300072 , China)

(Received 17 May 2005 ; revised manuscript received 16 June 2005)

Abstract

The nonlinear differential equation for charge density wave (CDW) proposed by Grüner is analyzed in this paper. According to a periodic solution of the equation suggested in this paper at first , it follows naturally that the sliding of CDW obeys the Ohm's law. Many results such as the threshold of starting field and sliding velocity of a single segment are also derived , and the defect of neglecting the first term in the equation is avoided. Applying the result to the model of multiple segments of the CDW , the exponential law of the conductivity and the threshold of applied field , as well as the " narrow-band " noise are obtained simply , which are consistent with the experimental formula. To describe the connection of a multiple segment of CDW system , the mechanism of " elastic connection " is treated as an internal force , which clarifies the vagueness in primary Portis model.

Keywords : CDW , nonlinear conductivity , exponential law , strong impurity , weak impurity , elastic connection

PACC : 7145L

[†] E-mail : ruanyf@tju.edu.cn