

## 2成分 Soliton 系の統計力学

東北大・理 宮下 崇, 佐々木一夫, 都築俊夫

Hamiltonian density <sup>1), 2)</sup>

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} |\Psi_t|^2 + \frac{1}{2} |\Psi_x|^2 + V(|\Psi|, \phi) \quad , \quad \Psi(x, t) = |\Psi(x, t)| e^{i\phi(x, t)}$$

$$V(|\Psi|, \phi) = \frac{1}{4} (\tau - |\Psi|^2)^2 + \frac{1}{4} \kappa |\Psi|^2 \sin^2 \phi \quad , \quad \kappa > 0 : \text{parameter}$$

よって記述される系の非線形励起の古典統計力学への効果を Transfer Integral 法を用いて、低温展開の意味で厳密に、すべての  $\kappa$  について解析的に求めた。その結果、

$\kappa = 1$  で生ずる系の異常ゆらぎが比熱、相関関数などに影響を及ぼすことがわかった。

この Model は、 $\kappa \rightarrow 0+$  の極限で Sine-Gordon model に、また  $\kappa \rightarrow \infty$  の極限で  $\phi^4$  model に帰着し、 $\kappa = 1$  で両 model の性質が Crossover するという特徴をもつ。

$V(|\Psi|, \phi)$  は  $\Psi(x, t) = \pm 1$  に 2 つの縮退した minimum を持つので、

$\Psi(x, t) = \xi(x, t) + i\eta(x, t)$  と書いて、 $V$  の minimum をつなぐ Kink 解を求めると、解析的に、次の 3 Class が存在することがわかり、生成エネルギー、線形安定性も議論できる。<sup>1), 2)</sup>

Class	1	2	3
Kink 解 $S = \gamma(x - vt)$ $\gamma = (1 - v^2)^{\frac{1}{2}}$	$\xi_1(s) = \text{th} \frac{1}{\sqrt{2}} s$ $\eta_1(s) = 0$	$\xi_2(s) = \text{th} \sqrt{\frac{\kappa}{2}} s$ $\eta_2(s) = \sqrt{1 - \kappa} \text{sech} \sqrt{\frac{\kappa}{2}} s$	$\xi_3(s) = 1 - \frac{3}{2} \text{sech}^2 \frac{s}{2\sqrt{2}}$ $\eta_3(s) = \frac{3}{2} \text{sech} \frac{s}{2\sqrt{2}} \cdot \text{th} \frac{s}{2\sqrt{2}}$ for $\kappa = \frac{1}{4}$
存在領域	all $\kappa > 0$	$0 < \kappa < 1$	$0 < \kappa < 1$
軌跡	$\eta = 0, -1 \leq \xi \leq 1$ : 直線	$\xi^2 + \frac{\eta^2}{1 - \kappa} = 1$ : 半楕円	$(\xi + \frac{1}{4})^2 + \eta^2 = (\frac{3}{4})^2$ : 円 for $\kappa = \frac{1}{4}$
生成エネルギー	$E_1(v) = \gamma \cdot \frac{2\sqrt{2}}{3}$	$E_2(v) = \gamma \cdot \sqrt{2\kappa} (1 - \frac{1}{3}\kappa)$	$E_3(v) = \gamma \cdot \frac{9}{8} \sqrt{2}$ for $\kappa = \frac{1}{4}$
線形安定性	$\kappa > 1$ で安定, $0 < \kappa < 1$ で不安定 ( $\eta$ 方向の内部振動 mode の振動数 $\omega_1 = \sqrt{\frac{\kappa - 1}{2}}$ )	$0 < \kappa < 1$ で安定	不安定
特徴	$\phi^4$ 型 Topological Kink $\kappa = 1$ でゆらぎの mode が soft 化する (異常ゆらぎ)	Sine-Gordon 型 Topological Kink	Non-topological Kink $\kappa = \frac{1}{4}$ では数値的に求まる。 $E_3(v) = E_1(v) + E_2(v)$

$\kappa > 1$  では Class 1 Kink が安定に存在するのに対し、 $0 < \kappa < 1$  では Class 1 Kink は不安定でその代わりに Class 2 Kink が出現し、安定に存在する。この意味で  $\kappa = 1$  を Bifurcation Point と呼ぶことにする。<sup>1), 2)</sup>

また、 $\kappa = 1$  で Class 1 Kink, Class 2 Kink の生成エネルギーは滑らかにつながれる。

この系の古典統計力学を Transfer Integral 法を用いて調べると、連続体近似のもとで次の 2次元 Schrödinger-like 固有値方程式を得る。<sup>1), 2)</sup>

$$\left\{ -\frac{1}{2\tilde{m}} \left( \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \right) + \tilde{V}(\xi, \eta) \right\} \Phi_n(\xi, \eta) = \tilde{\epsilon}_n \Phi_n(\xi, \eta)$$

$$\tilde{V}(\xi, \eta) = \left\{ 1 - (\xi^2 + \eta^2) \right\}^2 + \kappa \eta^2, \quad \tilde{m} = \frac{1}{4} \beta^2, \quad \beta = \frac{1}{\hbar}$$

この固有値方程式の基底状態の固有値:  $\tilde{\epsilon}_0$ 、第1励起状態の固有値:  $\tilde{\epsilon}_1$  を用いると、系の熱力学諸関数、静的相関関数が求まる。(単位系を適当に選んで無次元化してある。)

我々は、上記の固有値方程式を変数分離<sup>1), 2)</sup> 低温条件 ( $\sqrt{\kappa} \gg 1$ ) のもとで、求める固有値  $\tilde{\epsilon}_0, \tilde{\epsilon}_1$  を、

$$\begin{aligned} \tilde{\epsilon}_0 &= \tilde{\epsilon}_0^{(0)} - t_0, & \tilde{\epsilon}_0^{(0)} &: \text{展開 parameter } \frac{1}{\sqrt{\kappa}} \sim T \text{ のみでべき展開可能な部分 (Phonon 部分)} \\ \tilde{\epsilon}_1 &= \tilde{\epsilon}_1^{(0)} + t_1, & t_0, t_1 &: \tilde{\epsilon}_0^{(0)} \text{ 以外の指数関数的に小さい部分 (Kink 部分)} \end{aligned}$$

とに分けて、1成分 Soliton 系の場合と同様に、Modified W.K.B. 法<sup>5)</sup>、Green 関数法<sup>6)</sup> を用いて、 $\tilde{\epsilon}_0, \tilde{\epsilon}_1$  の低温における漸近形を求め、次の結果を得た。

(1) Free energy density :  $F = F_P + F_K$

$$F_P = \frac{2}{\beta l} \ln \frac{\beta \hbar}{l} + \frac{1}{4} \tilde{\epsilon}_0^{(0)}, \quad \tilde{\epsilon}_0^{(0)} = 2 \left( \sqrt{2} + \sqrt{\frac{\kappa}{2}} \right) \left( \frac{1}{\beta} \right) - \frac{2 + \sqrt{\kappa}}{1 + \sqrt{\kappa}} \cdot \left( \frac{1}{\beta} \right)^2 + O\left( \left( \frac{1}{\beta} \right)^3 \right) : \text{Phonon 部分}$$

$l$ : lattice parameter       $\hbar$ : 無次元化した Planck const.

$$F_K = -\frac{1}{4} t_0 : \text{Kink 部分}$$

(A)  $0 < \kappa < 1, (1-\kappa)^2 \beta \gg 1$

$$t_0 = \frac{8}{\sqrt{\kappa}} \left[ \frac{2}{3} \frac{\kappa^2 (1 + \sqrt{\kappa})^3 (3 - \kappa)}{1 - \sqrt{\kappa}} \right]^{\frac{1}{2}} [\beta E_2(\omega)]^{-\frac{1}{2}} e^{-[\beta E_2(\omega)]} \left[ 1 - \frac{(8\kappa^2 + 16\kappa\sqrt{\kappa} - 37\kappa + 7)(3 - \kappa)}{24(1 - \kappa)^2} [\beta E_2(\omega)]^{-1} + O([\beta E_2(\omega)]^{-2}) \right]$$

$E_2(\omega) = \sqrt{2\kappa} (1 - \frac{1}{3}\kappa)$  :  $0 < \kappa < 1$  で安定に存在する Class 2 Kink の静止生成エネルギー

(B)  $\kappa = 1$  : Bifurcation point

$$t_0 = 16 \left( \frac{2}{3} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{\kappa}} \Gamma\left(\frac{1}{4}\right) [\beta E_{1,2}(\omega)]^{-\frac{1}{4}} e^{-[\beta E_{1,2}(\omega)]} \left[ 1 - \frac{4}{\sqrt{3}} \pi \cdot \frac{1}{\{\Gamma(\frac{1}{4})\}^2} [\beta E_{1,2}(\omega)]^{-\frac{1}{2}} + O([\beta E_{1,2}(\omega)]^{-1}) \right]$$

$E_{1,2}(\omega) = \frac{2\sqrt{2}}{3}$  :  $\kappa = 1$  で縮退する Class 1, 2 Kink の静止生成エネルギー

(C)  $\kappa > 1, (\kappa - 1)^2 \beta \gg 1$

$$t_0 = \frac{16}{\sqrt{\kappa}} \left[ \frac{2}{3} \frac{\sqrt{\kappa} + 1}{\sqrt{\kappa} - 1} \right]^{\frac{1}{2}} [\beta E_1(\omega)]^{-\frac{1}{2}} e^{-[\beta E_1(\omega)]} \left[ 1 - \frac{7(1\kappa^2 + 60\kappa\sqrt{\kappa} - 130\kappa - 84\sqrt{\kappa} + 119)}{72(\kappa - 1)^2} [\beta E_1(\omega)]^{-1} + O([\beta E_1(\omega)]^{-2}) \right]$$

$E_1(\omega) = \frac{2\sqrt{2}}{3}$  :  $\kappa > 1$  で安定に存在する Class 1 Kink の静止生成エネルギー

(2)  $\xi$ - $\xi$  Correlation length :  $\lambda$

$$\lambda = \frac{4}{\beta(\tilde{\epsilon}_1 - \tilde{\epsilon}_0)} = \frac{4}{\beta(t_1 + t_0)}$$

今の計算精度では  $t_1 = t_0$ 、即ち、 $\tilde{\epsilon}_0, \tilde{\epsilon}_1$  は  $\tilde{\epsilon}_0^{(0)}$  を中心として対称に分離する。

$F_K$  の表式で  $\kappa \rightarrow 0+$ , but  $\beta\sqrt{2\kappa} \gg 1$  とすると Sine-Gordon model の. また,  $\kappa \rightarrow \infty$  とすると  $\phi^4$  model の結果と一致することがわかる.<sup>6)</sup> 自由エネルギー密度の表式から  $\kappa$  に比熱が求まる. 主な結論をまとめると.

① この系の低温における古典統計力学には, Phonon と Topological Kink が効き, Trullinger, et al.<sup>1), 2), 3)</sup> が主張するよう. 未知の Non-topological Kink の効果は存在しないことがわかる. この結果は, 1成分 Soliton 系の理論<sup>4)</sup> の自然な拡張であり, 物理的にも理解しやすい.

②  $F_K$  の表式の主要項の温度依存性をみると,  $\kappa \neq 1$  では,  $F_K \sim \beta^{-\frac{1}{2}} e^{-\beta E^{(0)}}$  で, 1成分 Soliton 系の結果<sup>4)</sup> と同じ温度依存性を示すのに対し,  $\kappa = 1$  なる Bifurcation point では,  $F_K \sim \beta^{-\frac{1}{4}} e^{-\beta E^{(0)}}$  と, prefactor のべきが変化していることが注目される.

これは,  $\kappa = 1$  で Kink のまわりのゆらぎの mode の 1 が soft 化していることを反映していると解釈される.

即ち, Kink Gas Phenomenology の立場<sup>4)</sup> で考えると.

$$F_K \sim \beta^{-\frac{1}{2}} e^{-\beta E^{(0)}} = \beta^{-\frac{3}{2}} e^{-\beta(E^{(0)} + \Sigma)} \quad , \quad \Sigma = -\frac{\ln \beta}{\beta} \quad \text{for } \kappa \neq 1$$

$$F_K \sim \beta^{-\frac{1}{4}} e^{-\beta E^{(0)}} = \beta^{-\frac{3}{2}} e^{-\beta(E^{(0)} + \Sigma^*)} \quad , \quad \Sigma^* = -\frac{5}{4} \frac{\ln \beta}{\beta} \quad \text{for } \kappa = 1$$

$E^{(0)} + \Sigma$ ,  $E^{(0)} + \Sigma^*$  : Kink の有効生成エネルギー

$\Sigma$ ,  $\Sigma^*$  : 熱的ゆらぎによる Kink の自己エネルギー

とかけ,  $\kappa = 1$  では, ゆらぎが異常に大きくなるために, Kink の有効生成エネルギーが小さくなった ( $0 > \Sigma > \Sigma^*$ ) と理解される.

③ 1成分 Soliton 系の理論<sup>6)</sup> と同様に, Kink 初起に起因する Schottky 型の異常比熱がこの系でも存在する.

さらに  $\kappa = 1$  では異常ゆらぎのために異常比熱がさらに拡大される.

## References

- 1) S.E. Trullinger and R.M. DeLeonardis, Phys. Rev. B22 (1980), 5522
- 2) K.R. Subbaswamy and S.E. Trullinger, Physica 2D (1981), 379
- 3) S. Ohta and K. Nakamura, J. Phys. C 14 (1981), L427
- 4) J.F. Currie et. al., Phys. Rev. B22 (1980), 477
- 5) K. Sasaki, to appear in Prog. Theor. Phys. 67 #2 (1982)
- 6) K. Sasaki and T. Tsuzuki, to appear in Solid State Commun.