

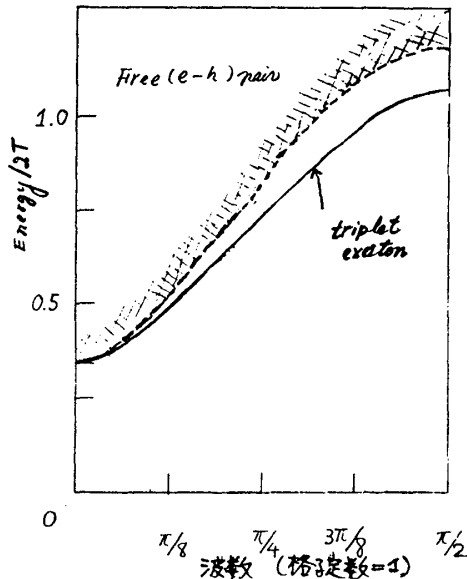
Title	一次元パイエルス-ハバード系の光物性(VII. 電荷移動と構造相転移,強結合電子・格子系の動的物性,科研費研究会報告)
Author(s)	那須, 奎一郎
Citation	物性研究 (1982), 38(2): A89-A91
Issue Date	1982-05-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/90581
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

ギ-は U のみの函数として表わされ、その形は CDW と全く同じである。従って $U=S$ の境界線が現われるのである。つまり、この相互作用の働きは両相で対称ではない。この実線と相境界線が合流する点 O は臨界点と呼ばれるがこの場合頂点 T と一致しており、これは一次元 PPM の不安定性の持長を示している。

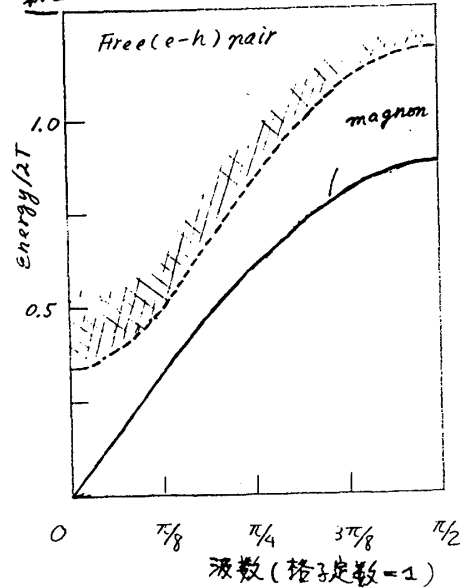
II) 揺ぎの役割

さて平均場からの揺ぎが果たす役割について考えよう。揺ぎの効果というのは結局平均場の基底状態に電子-正孔対が励起されている状態と混ぜ合せてよりエネルギーを下げる事である。従って、励起状態の中でも、電子と正孔が束縛合っている状態の中の最低状態が最も安定化に寄与すると考えられる。

第2図 CDW, $U=S=2T$

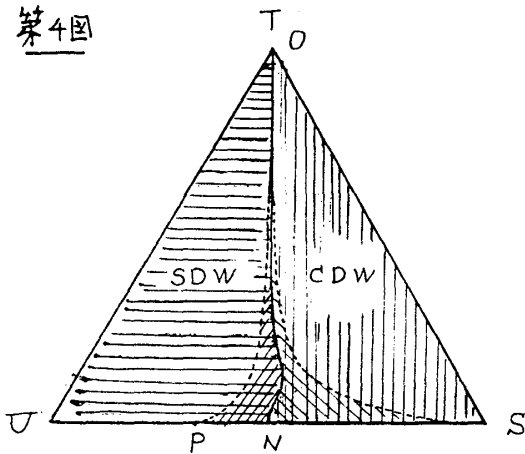


第3図 SDW, $U=S=2T$



そこで、我々は、この最低励起状態を RPA で求めた。CDW では一つの格子点に相互にスピンの反対をむいた二個の電子があり、閉殻構造を作っているので、どこからの励起はスピンの励起があるなしにかかわらず電荷移動励起となる。従って最低状態は電荷移動型三重項励起となり、その分散の典型的な例は第2図の如きものとなる。エネルギーはギンアと同じ程度である。SDW では周知の如く最低励起状態は Magnon であり、そのエネルギーは Zero から始まり音響型分散を持つ(第3図)。これらの励起状態の外に自由電子-正孔対励起(第2,3図の---の上の部分)によるエネルギーの下りをも加えて全系のエネルギーを求めて両相で比較して相図を求めると第4図のようになり中心部分で SDW が CDW と侵食する事となる。侵食の原因はマグノン励起によるエネルギーの下りである。

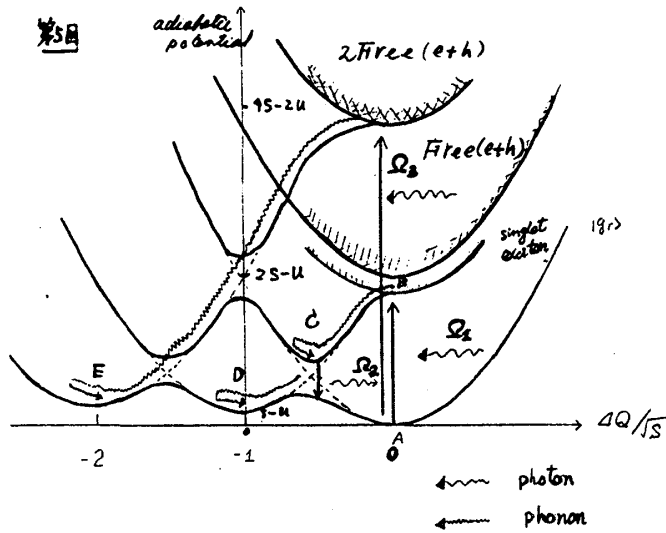
第4図



III) 光学的素励起とその緩和

ここでは相図の底辺近傍にある CDW 相に属する光学的素励起とその格子緩和状態(発光の始状態)について考える。

格子変位が結晶の奇数番サイトで正、偶数番サイトで負のポテンシャルを与えるとする。電子は主に偶数番サイトにのみ二個存在する。光励起により電子が1個奇数番サイトに上げられるが、このエネルギーは $D \equiv (2S-U)$ で $2S$ はポテンシャル差から

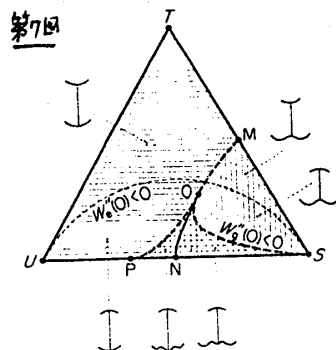
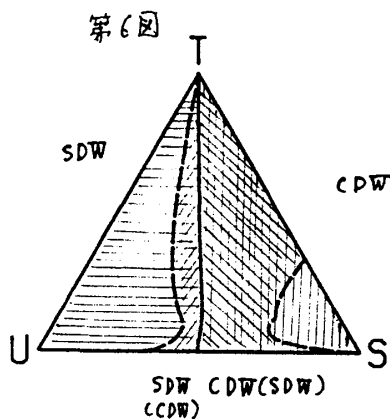


- U は終状態で行方がない事からくる。
 このようにして作られた電子と正孔は各々の
 波動函数が T の効果でわずかに反対 site に参
 み出す事により引力を及ぼし合い電荷移動型
 一重項励起子となる。この励起子の相対運動
 の波動函数は反対称であり、重心運動のバン
 ド中は T/D (Super Transfer) 程度となる。
 これは電子や正孔が動く時には site E →
 飛びこさなければならぬ差である。この励
 起子は Peierls 型格子変形と結晶の一部で元
 (SDW or PPH) へ戻す様な格子変位と結合

定数が S 程度の強い相互作用とするので、格子緩和の途中で自由励起子から自己束縛励起子へと変化
 する。T と S が同程度ならば励起子のポテンシャル面と基底状態のそれとは交差するので、その近傍で
 断熱ポテンシャルの極小点 (C) が現れる。従って光 (Ω_1) で Franck-Condon 的に A から B へ
 第 5 図に示してある様に励起された系は C 点に緩和して、断熱的にはそこから Ω_2 の光を放出して
 A 点へ戻る。しかし、非断熱効果があれば励起子の一部分は交差点を素通りして、ソリトンの準安定
 状態へ緩和する (D 点)。二光子で励起を行なった場合は Peierls 変形が一部で逆転したソリトンの準
 安定状態へ緩和する (E 点)。 [第 5 図で横軸は局所的な Peierls 型変形量、0 は結晶全体で Peierls
 変形が起っている事を示し、-1 は結晶の一部で Peierls 変形が消失した事を示し、-2 は結晶の一部
 で Peierls 変形が逆転した事を示す。]

IV) クラスタ計算

- 次元結晶では何等かの近似を行なわなければ計算は不可能であるが、有限系であれば厳密な計
 算が可能である。最近、滝本²⁾は N=4 のリングでの相図を示し第 6 図に示す結果を得た。これは N=2
 の場合³⁾(第 7 図) とは T 点の近くの様子が全く異なりむしろ第 4 図に近い。- の底辺の様子は
 N=2r+2 と N=2r の場合 N=∞ の場合は全く共通である。



文献

- 1) K. Nasu and Y. Toyozawa:
Tech. Rep. ISSP Ser. A, No. 1197 (1982)
- 2) J. Takimoto: Master Thesis (Tokyo. Uni.
1982).
- 3) Y. Toyozawa: J. Phys. Soc. Jpn. 50 (1981) 1861.