非理想ソリトン気体の理論

東北大・理　佐々木一夫，都築俊夫

§1　はじめに

1975年頃から，「素励起としてのソリトン」あるいは「ソリトンの統計力学」についての理論的な研究が進められてきた。[1] 実験的には，$CsNiF_3$ やTMMCなどの1次元磁性体において，熱的に励起されたソリトンの存在を裏付けると考えられるデータが得られている。[2]

ソリトンには，その生成エネルギーに有限のギャップを持つものとそうでないものとがある。素励起としてのソリトンの研究が進んでいるのは前者のほうである。ソリトンのエネルギー・ギャップに比べて温度が十分低い場合には，励起されるソリトンの密度が小さく，ソリトン間の相互作用は無視できるので，理論的な取り扱いは簡単になる。サイン・ゴルドン(SG)モデルなどの典型的なモデルについては，ソリトン間の相互作用を無視する範囲(理想ソリトン気体近似)で，ソリトンの統計力学的な性質がかなり詳しく研究されている。

現実に1次元系とみなされる物質でも，十分に温度を下げると3次元的長距離秩序が出現するので，1次元系に特徴的なソリトンを観測できる温度には下限が存在する。したがって，低温領域で有効な理想ソリトン気体の理論が現実の物質に適用可能か，という問題が生じる。先にあげた $CsNiF_3$ やTMMCについて言えば，ソリトンの観測が可能な温度領域ではソリトン間の相互作用が決して無視できないと考えられる。

本研究では，エネルギー・ギャップを持つソリトンの統計力学におけるソリトン間の相互作用の効果について議論する。ラグランジアン

$$\mathscr{L}=\frac{1}{8}\int dx\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)^2-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)^2-(1-\cos\phi)\right] \tag{1}$$

で記述される1次元SGモデルを考えることにする。ここでは適当に無次元化した単位系を用いている。この単位系では，ソリトンのエネルギー・ギャップおよびソリトン速度の上限がそれぞれ1になる。また，ソリトンの広がりは1のオーダーである。

我々の目的は，ソリトンという素励起を基にしてSGモデル(1)の古典統計学を組み立てることである。その際，転送積分法によって得られた結果[3]が参考になる。この方法では，素励起という概念を導入することなく，モデル(1)の古典統計力学についての厳密な計算を行うことができる。解析的には低温展開と高温展開の最初のいくつかの項が得られており，すべての

温度領域については数値的な計算が行われている。我々がこれから組み立てようとする理論はこの厳密な結果を再現しなければならない。

§2 ソリトン気体の統計力学[3)]

熱的に励起されたソリトンと反ソリトンから成る気体（ソリトン気体と呼ぶ）を考えよう。ここでは Currie らの理想ソリトン気体の理論[4)]を拡張して，ソリトン間の相互作用を取り入れる。ソリトンがN_s個と反ソリトンが$N_{\bar{s}}$個存在する系のエネルギーを

$$E_{N_s,\,N_{\bar{s}}}\ ,$$

その系の位相空間の体積要素を

$$\mathrm{d}\,\Gamma_{N_s,\,N_{\bar{s}}}$$

とする。ソリトンと反ソリトンの化学ポテンシャルをそれぞれμ_sと$\mu_{\bar{s}}$とすると，ソリトン気体の熱力学ポテンシャルΩは次式で与えられる（$\beta=1/T$）。

$$e^{-\beta\Omega}=\sum_{N_s}\sum_{N_{\bar{s}}}\frac{1}{N_s!\,N_{\bar{s}}!}\exp\left[\beta\left(\mu_s N_s+\mu_{\bar{s}}N_{\bar{s}}\right)\right]$$

$$\times\int\mathrm{d}\,\Gamma_{N_s,\,N_{\bar{s}}}\exp\left[-\beta E_{N_s,\,N_{\bar{s}}}\right] \tag{2}$$

ソリトンと反ソリトンの数については外部からの拘束がないので，計算の最後で

$$\mu_s=\mu_{\bar{s}}=0$$

とおく。

Currie らの理想ソリトン気体の理論では，ソリトンのエネルギーとして熱的に励起されているフォノンとの相互作用の効果をくりこんだものを用いる。

$$E^*(p)=E_{10}=E_{01}$$

$$=1+\frac{1}{2}p^2-T\ln 2\beta\hbar+0\left(p^4,\,p^2T,\,T^2\right) \tag{3}$$

ここでpはソリトンの運動量である。式(4)の第3項がくりこみを表わしている。これはソリトンが1個存在するときのフォノンの自由エネルギーとソリトンが存在しないときのそれとの差として計算される。

熱的ゆらぎ（フォノン）が存在しないとき（$T=0$）には，多ソリトン系のエネルギーは個々のソリトンのエネルギーの単純な和として表わされる。熱的ゆらぎが存在する場合にもこの関係が成り立つかどうかは確かめられていないけれども，ここではそれを仮定することにする：

$$E_{N_s, N_{\bar{s}}} = \sum_{i=1}^{N} E^*(p_i)\ ;\ N = N_s + N_{\bar{s}} \tag{4}$$

そしてソリトン間の相互作用の効果は位相体積

$$\mathrm{d}\,\Gamma_{N_s, N_{\bar{s}}}$$

に現われると考える。ここで

$$\mathrm{d}\,\Gamma_i = \mathrm{d}\,p_i\,\mathrm{d}\,q_i\,/\,2\pi\hbar$$

として（q_i はソリトンの座標），位相体積要素を

$$\mathrm{d}\,\Gamma_{N_s, N_{\bar{s}}} = \mathrm{d}\,\Gamma_1\,\mathrm{d}\,\Gamma_2 \cdots \mathrm{d}\,\Gamma_N\,R(1, 2, \cdots, N) \tag{5}$$

と書くと，相互作用の効果はRという因子に含まれる（相互作用がないときには$R=1$）。

理想ソリトン気体のソリトン密度を $n_s^{(0)}$ としよう。非理想ソリトン気体のソリトン密度 n_s と自由エネルギー $F=\Omega\,(\mu_s=\mu_{\bar{s}}=0)$ は $n_s^{(0)}$ のベキ級数の形

$$n_s = n_s^{(0)} + 2\,J_2\,(n_s^{(0)})^2 + \cdots \tag{6}$$

$$F = -LT\,\{\,2n_s^{(0)} + 2\,J_2\,(n_s^{(0)})^2 + \cdots\,\} \tag{7}$$

に表わすことができる（L は系の長さ）。〝第２ビリアル係数〞J_2 はソリトン間の相互作用の最低次の効果を表わす。

J_2 を計算する（具体的な表式は省略）ためには $R(1,2)$ を知る必要がある。そのために，SG方程式の２－ソリトン解から $R(1,2)$ を導くことを考えよう。２つのソリトンの運動量が小さい（$|p_1|, |p_2| \ll 1$）場合のソリトンの重心の軌跡を図１に模式的に示す。ソリトンが互いに近づくと，個々のソリトンの重心を定義するのが困難になる。ここでは，２つのソリトンが〝ぶつかる〞まで，それぞれの重心は一定速度で運動するものと考える。すると図１からわかるように，２つのソリトンは互いに距離 $\Delta(p_1, p_2)$ より近づけないことになる。このように考えると，２体の相互作用の効果を表わす因子として

$$R(1,2)=\theta(|q_1-q_2|-\Delta(p_1,p_2)) \tag{8}$$

を得る（θ は階段関数）。Δ という量は２－ソリトン解から次のように求まる。

$$\Delta(p_1,p_2)=2\ln(2/|p_1-p_2|) \tag{9}$$

式(8)と(9)を用いて〝第２ビリアル係数〟を計算すると次の結果を得る。

$$J_2=-2\ln(4\gamma/T)+0(T) \tag{10}$$

ここで $\gamma=1.781\cdots$ はオイラー定数。

$n_s^{(0)}$ のベキによる展開(6)と(7)が有効なのは，ソリトン密度が小さい低温領域であり，式(10)の J_2 は負となる。したがって，ソリトン間の相互作用によりソリトン密度と自由エネルギーの絶対値が減少することがわかる。

§3　おわりに

前節ではSGモデルのソリトンと反ソリトンからなる気体の統計力学におけるソリトン間の相互作用の効果を，非常に単純化した描像を用いて議論した。式(10)を(7)に代入して得られる自由エネルギーは，転送積分法で得られたSGモデルの自由エネルギーの厳密な表式のうちのある項を正確に再現している。また，前節と同じ考えに基づいてソリトンに微感な量 cos($\phi/2$)の同時刻相関関数をも計算することができて，転送積分法の結果とコンシステントな結果が得られる。

ところで，式(8)を導いたときには $|p|\ll 1$ を仮定していた。p の高次（２次以上）の項を考慮すると，ソリトンの軌跡は図２のようになり，上のような単純な議論はそのままでは使

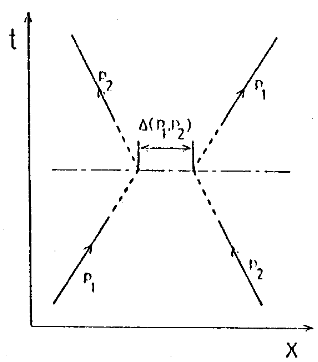

図１

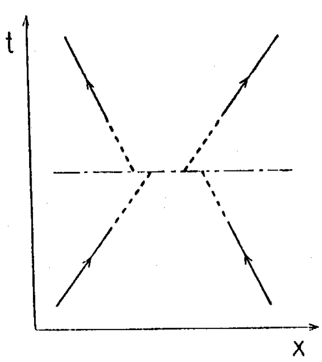

図２

えない。p の高次項は〝第２ビリアル係数〞(10) に対する T の高次（１次以上）の補正項を与える。この T の高次項には，そのほかに，熱的ゆらぎの効果のうち式(3) で取り込みきれないものからの寄与も考えられる。これらの問題の解決にはまだ時間がかかりそうである。

参 考 文 献

1) A. R. Bishop, J. A. Krumhansl and S. E. Trullinger, Physica **1D** (1980), 1.

2) M. Steiner, J. Magn. Magn. Mater. **31–34** (1983), 1277.

3) K. Sasaki, Prog. Theor. Phys. submitted.

4) J. F. Currie, J. A. Krumhansl, A. R. Bishop and S. E. Trullinger, Phys. Rev. **B22** (1980), 447.