

松川宏, 高山一

- 4) 岡: レオロジー —生物レオロジー— (1974) 裳華房
- 5) M. Toda: J. Phys. Soc. Japan **23** (1967) 501.
- 6) T. Young: Trans. Roy. Soc. London **98** (1808) 164.
- 7) 吉村: 脈波判読の実際 (1968) 中外医学社
- 8) A. Sakanishi, M. Hasegawa: Rep. Prog. Polymer Phys. Japan **26** (1983) 639.
- 9) R. Hirota, K. Suzuki: Proc. IEEE **61** (1973) 1483.
- 10) 渡辺: 数理科学 No 203 (1980) 13

## 不整合電荷密度波におけるソリトン

北大・理 松川 宏, 高山 一

一次元電子系においては, その特異なバンド構造のため波数  $Q = 2k_F$  ( $k_F$ : フェルミ波数) の摂動に対してフェルミ面が不安定となり, ギャップを生じる。電子系のこの性質を反映して一次元電子—格子系では, 格子変位と結合して電子密度が波数  $Q$  で空間的に波うつ電荷密度波 (CDW) 状態が可能となる。<sup>1-3)</sup> ここでは電子密度  $\rho$  は次のように表わされる。

$$\rho = \bar{\rho} + \rho_c \cos(Qx + \phi) \quad (1)$$

ここで  $\bar{\rho}$ ,  $\rho_c$  はそれぞれ平均電子密度及び CDW の振幅で,  $\phi$  は CDW の位相であり, 理想結晶中の基底状態では一定となる。しかし, 現実の結晶中には必ず何らかの欠陥が存在し, CDW はそのような欠陥との相互作用により, 空間的な歪みを生じる。この歪みは  $\phi$  の空間変化として表わされる。又, CDW は電荷を担うため, 電荷によって力を受け運動する事ができるが, この運動は又,  $\phi$  の時間変化として表わされる。

このような CDW はその波長

$$\lambda = 2\pi / Q$$

と, もとの格子の格子定数  $a$  との関係において, 次の 3 つの相に分類される。

1. commensurate (整合) 相:  $\lambda / a = m / n$  ( $m, n$ : 整数) の関係があるときで, この相では CDW と格子の相互作用が重要であり, それを考慮することにより位相  $\phi$  に対するハミルト

ニアンは Sine-Gordon 型となり、ソリトン型励起が存在する。<sup>4, 5)</sup>

2. incommensurate (不整合) 相:  $\lambda$  と  $a$  の間に 1 のような関係が存在せず、格子との相互作用が無視できる場合。

3. discommensurate 相:  $\lambda$  と  $a$  の関係は 2 と同じであるが、CDW の歪みのエネルギー損失に比べ格子との相互作用によるエネルギー利得の方が大きいため、CDW は歪んで commensurate な領域をつくり、これが規則的に並んだソリトン (ソリトン格子) によって結ばれている。

ここでは、結晶中にランダムに分布する不純物と相互作用している incommensurate CDW を考える。このようなランダム系においても、1 や 2 の場合のようにソリトンが現れるのかをみてみよう。ハミルトニアンは位相  $\phi$  によって次のように表される。<sup>6)</sup>

$$\mathcal{H} = \int_0^L dx \left\{ \frac{1}{2n_i} [v^{-2} \dot{\phi}^2 + (\nabla \phi)^2] - n_i \varepsilon_f \phi + \sum_j^{\text{imp}} \varepsilon_i \cos(Qx_j + \phi(x_j)) \delta(x - x_j) \right\} \quad (2)$$

ここで  $L$ ,  $n_i$  は系の大きさ及び不純物濃度であり、 $v$  はフェーズン速度<sup>7)</sup> と呼ばれる CDW に特徴的な速度、又  $\varepsilon_i$ ,  $\varepsilon_f$  はそれぞれ不純物ポテンシャル及び電場の強さを示すパラメーターである。右辺各項はそれぞれ、CDW の運動、弾性、不純物及び電場との相互作用のエネルギーを表わし、不純物との相互作用として  $\delta$ -関数型のポテンシャルが電子密度と結合しているものを考えている ( $x_j$  は不純物の位置を示し、 $\sum_j^{\text{imp}}$  はすべての不純物について和をとることを意味する)。(2) のハミルトニアンの特徴を一言でいえば、ランダムな非線型系といえる。 $x_j$  がランダムであるため不純物ポテンシャルエネルギーを最小にする位相の値はランダムとなる。 $\varepsilon_f = 0$  の基底状態では、位相  $\phi$  は弾性エネルギーと不純物ポテンシャルエネルギーの兼ね合いから決定されるある配置におちつく。この状態に、ある有限な電場  $\varepsilon_f^{\text{th}}$  より弱い電場をかけると、位相はその電場での安定状態に再配置するが、不純物ポテンシャルによりピン止めされ運動することができない。 $\varepsilon_f > \varepsilon_f^{\text{th}}$  なる電場をかけて初めて電場による力が不純物ポテンシャルからの力に打ち勝ち CDW は運動を始めることができる。この現象は実験的にも種々の準一次元電気伝導体における非線型電気伝導として観測されている。

我々は弾性エネルギーに比べて  $\varepsilon_i$  が小さく (又は  $n_i$  が大きく)、各々の不純物ポテンシャルに対して CDW が歪んでポテンシャルエネルギーを得する事ができず、不純物の集団に対して CDW が徐々に歪んで不純物ポテンシャルエネルギーをかせいでいるような弱いピン止め領域<sup>6)</sup> を扱う。この領域では、ある基底状態からの静的な励起も又、近似的に Sine-Gordon

型のハミルトニアンにより表わされる。<sup>8)</sup> 我々は(2)のハミルトニアンのそれぞれの電場

$$0 \leq \epsilon_f < \epsilon_f^{\text{th}}$$

に対する安定状態をモンテカルロ法により求めた。図1は  $\epsilon_f$  を  $0 \rightarrow 0.2 \rightarrow 0$  と変化させたと

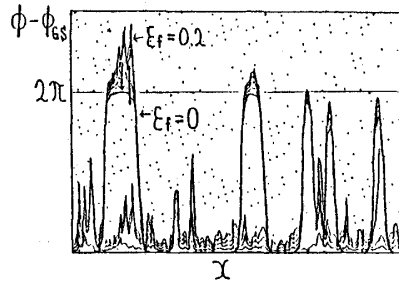


図1

きの位相配置を最初の  $\epsilon_f = 0$  の基底状態からの差として示したものである(横軸は空間座標, 縦軸は位相差, 点は各不純物ポテンシャルに対してもっともエネルギーが高くなる位相の値を示している)。  $\epsilon_f = 0.2$  とすることにより確かに  $2\pi$ -ソリトン型の励起が得られる。ハミルトニアンが位相  $\phi$  に対して  $2\pi$  の周期性をもつため, 基底状態が無限に縮退しており, この  $2\pi$ -ソリトンはとなりあった基底状態をつなぐものとして準安定に存在する。そのため図に示されるように  $\epsilon_f \rightarrow 0$  に戻した後も, このソリトンは残る。

次に, 基底状態の1つから出発して, (2)から導かれる運動方程式により,  $\epsilon_f > \epsilon_f^{\text{th}}$  なる電場をかけたときの位相の運動を追ってみる(このとき摩擦力を導入した)。図2は

$$J \equiv \frac{1}{\pi L} \int_0^L dx \cdot \dot{\phi}$$

で定義される current  $J$  の時間平均に対する伝導度

$$\sigma(\epsilon_f) \equiv \bar{J} / \epsilon_f$$

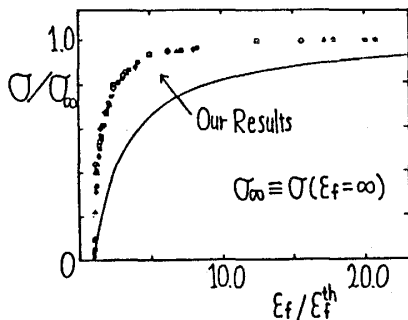


図2

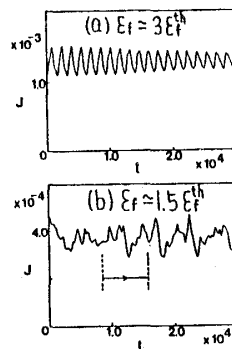


図3

を示したもので、 $\epsilon_f^{\text{th}}$ からの伝導度の急激な増加がみられる（実線はこのモデルで表わされると考えられる物質に対する実験結果を示す）。定電場における $J$ を時間 $t$ に対して表わしたのが図3である。高電場（ $\epsilon_f \simeq 3\epsilon_f^{\text{th}}$ ）においては、明らかな振動部分がみられるがその周期はちょうど位相の平均値（空間平均）が $2\pi$ 増加するのに要する時間と一致する。低電場（ $\epsilon_f \simeq 1.5\epsilon_f^{\text{th}}$ ）においても、同様な振動が得られるが、その様相はかなり複雑である。この差は、位相の運動の機構が低電場（ $\epsilon_f^{\text{th}} < \epsilon_f \leq 2\epsilon_f^{\text{th}}$ ）と高電場（ $\epsilon_f \geq 2\epsilon_f^{\text{th}}$ ）で違うことによる。図4に図3の低電場に対応する位相配置の時間変化を示す（時間間隔は図3(b)中の矢印に示さ

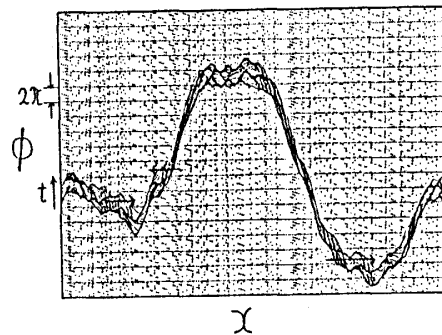


図4

れている）。位相は電場からの力を受け増加していくが、その運動の様子は空間的にかなり不均一で、矢印で示されるような kink (antikink) の運動が観察される。これは次のように理解される。系が弱いピン止め領域にあるため、位相が不純物ポテンシャルの集団から受ける実効的なピン止めの力は空間的にゆらいでいる。ここに低電場がかかると、ピン止めの強い領域(A)では位相 $\phi$ は動きだすことができないが、ピン止めの弱い領域(B)では $\phi$ は動きだし $2\pi$ 近く増加し、Aとの左右の境界に kink-antikink のペアを生成する。この kink は電場とBからの弾性力によりAの内部に向かって運動し、Aの領域の位相を端から増加させてゆく。そして逆方向から同様に運動してきた antikink と衝突して消滅し、このとき全体の位相が $2\pi$ 増加する。低電場においては、このサイクルを繰り返すことにより系の位相は運動していくと考えられる。一方、高電場ではピン止めの力の空間的な不均一さは電場によって隠されてしまい、位相の運動は空間的にほとんど一様なものとなる。このように低電場においては、位相の時間発展は kink の運動によることが明らかになったが、これに対する解析的理論はまだない。

まとめると、ランダム系である弱いピン止め領域にある不整合電荷密度波のモデル(2)においても、ソリトンが重要な役割を担っていることがわかった。ランダム系におけるソリトンの研究は今後、物性物理におけるソリトンの概念を拡張するものと期待される。

松川宏, 高山一

References

- 1) 鹿兒島誠一編著「一次元電気伝導体」(裳華房)
- 2) H. Fukuyama and H. Tayayama, in '*Electronic Properties of Inorganic Quasi One Dimensional Compounds*' ed. by P. Monceau (D. Reidel Publishing Company)
- 3) Proc. of Intern. Symp. on Nonlinear Transport and Related Phenomena in Inorganic Quasi One-Dimensional Conductors, Hokkaido Univ., Sapporo, 1983.
- 4) M. J. Rice, A. R. Bishop, J. A. Krumhansl and S. E. Trullinger: *Phys. Rev. Lett.* **36** (1976) 432.
- 5) 伊土政幸: *日本物理学会誌* **36** (1981) 826.
- 6) H. Fukuyama: *J. Phys. Soc. Jpn.* **41** (1976) 513.  
H. Fukuyama and P. A. Lee: *Phys. Rev.* **B17** (1978) 535.
- 7) P. A. Lee, T. M. Rice and P. W. Anderson: *Solid State Commun.* **14** (1974) 703.
- 8) P. B. Littlewood and T. M. Rice: *Phys. Rev. Lett.* **48** (1982) 44.

なお、この仕事について詳しくは次をごらん下さい。

H. Takayama and H. Matsukawa in Ref. 3)

H. Matsukawa and H. Takayama to be published