References

1) A. Matsuda and T. Kawakami, Phys. Rev. Lett. **51**. 694 (1983)
2) A. Matsuda and S. Uehara, Appl. Phys. Lett. **41**, 770 (1982)
3) Halbritter, Z. Phys. **238**, 466 (1970)
4) J. Nitta, A. Matsuda and T. Kawakami, J. Appl. Phys. to be published in April issue (1984)
5) D. N. McLaughlin and A. C. Scott, Phys. Rev. **A18**, 1652 (1978)
6) J. Nitta, A. Matsuda and T. Kawakami, Appl. Phys. Lett. to be published
7) 松田, 川上 物理学会秋の分科会予稿集 13p-C-2 275 (1983)

固体の熱膨張とソリトン

京大・工　宗像豊哲

従来固体の熱膨張は系の自由エネルギー $F(T, V)$ を温度 T と体積 V の関数として求め状態方程式 $P=-\partial F/\partial V$ に基づいて議論されてきた。我々は熱膨張の動的側面を考察し，非線形格子波の変調と熱膨張の密切な関係を明示した。

A. Modulation と averaged Lagrangian

次の Hamiltonian $\mathcal{H}$ をもつ一次元格子系を考える。

$$\mathcal{H}=\frac{M}{2}\sum_n \dot{u}_n^2+f\sum_n[r_n^2/2-p r_n^3/3h_0+q r_n^4/4h_0^2],\quad r_n=u_n-u_{n-1} \tag{1}$$

ここに u_n は n-th atom の平衡位置からの変位であり，$p>0$，$q>0$ は非線形性を規定するパラメータである。変調の問題を考える為に u_n を

$$u_n=\sum_{m=-\infty}^{\infty}\psi_m e^{im\theta},\quad \theta=knh_0-\omega(k)t,$$

$$\omega(k)=2\sqrt{f/M}\sin\left(\frac{kh_0}{2}\right) \tag{2}$$

と展開する。（h_0；$T=0$ での格子間隔） 次の3つの仮定

① 基本モードの振巾 $\psi_{\pm 1}$ は order $\varepsilon\,(\ll 1)$

② ψ_m は slowly varying;

$$\frac{\partial}{\partial x}\sim\frac{\partial}{\partial t}\sim O(\varepsilon)$$

③ $\psi_m\,(m\neq\pm 1)$ は $\psi_{\pm 1}$ により断熱的にきまる。

の下に (2) を Lagrangian 及び (1) に代入することにより，系の averaged Lagrangian 及び Hamiltonian $\overline{\mathscr{L}}$ 及び $\overline{\mathscr{H}}$ を ψ_m の functional として書き下す事が出来る。但し

$$\overline{A}(x,t)\equiv\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}d\theta\,A(x,t;\theta)\ 。$$

ε の lowest order で次の変分方程式を $\overline{\mathscr{L}}$ から得る。

$$\psi_{0,xx}=\frac{8p}{h_0^2}\sin^2\left(\frac{kh_0}{2}\right)|\psi_1|^2_{,x}\quad 但し\ \psi_{,x}=\frac{\partial\psi}{\partial x}\tag{3}$$

$$\begin{aligned}&-\psi_{1,tt}+2i\,\omega(k)\psi_{1,t}+2i\,h_0(f/M)\sin(kh_0)\psi_{1,x}\\&+(f/M)h_0^2\cos(kh_0)\psi_{1,xx}+2p\,\omega^2(k)\psi_1\psi_{0,x}\\&-4ip\sin(kh_0)\,\omega^2(k)\psi_{-1}\psi_2/h_0\\&-12q\,\omega^2(k)\sin^2(kh_0/2)\psi_1^2\psi_{-1}/h_0^2=0\end{aligned}\tag{4}$$

$$\psi_2=-(ip/h_0)\cot(kh_0/2)\psi_1^2\tag{5}$$

$$\psi_m=0\quad(|m|\geq 3)\tag{6}$$

自由端の境界条件より (3) は

$$\psi_{0,x}=\frac{8p}{h_0^2}\sin^2\left(\frac{kh_0}{2}\right)|\psi_1|^2\tag{3$'$}$$

となる。座標系

$$\xi=x-\lambda t\ \left(\lambda=\frac{d\omega}{dk}=\text{ group velocity }\right),\ t$$

に移行すると (3)～(6) は nonlinear Schrödinger 方程式

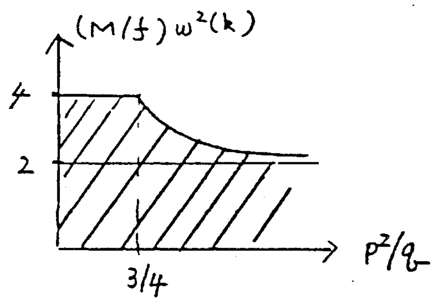
$$i\,\psi_{1,t}+\frac{\omega''}{2}\psi_{1,\xi\xi}+Q(k)\,|\psi_1|^2\psi_1=0 \tag{7}$$

に帰着する。但し

$$Q(k)=-2\left[\,2p^2\left(1-3\sin^2\left(\frac{kh_0}{2}\right)\right)+3\,q\,\sin^2\left(\frac{kh_0}{2}\right)\right]\omega(k)/h_0^2$$

$$\equiv-\omega(k)K(k)$$

$K(k)>0$ の領域で NLS eq. (7) はソリトン解をもつことが知られている。（下図参照）



斜線部分で $K(k)>0$.

B．Envelope ソリトンと熱膨張

NLS eq. (7) の one-soliton 解 ψ_1^{sol} は次の形をもつ。

$$\psi_1^{\mathrm{sol}}=A\,\mathrm{sech}\,\{A\widetilde{Q}(k)(\xi-\xi_0)\}\,e^{iA^2|Q(k)|t/2} \tag{8}$$

但し

$$\widetilde{Q}(k)\equiv\sqrt{Q(k)/\omega''(k)}\text{。}$$

(8) で表わされる励起に対応するエネルギー $E^{\mathrm{sol}}(A)$ と lattice の伸び $\Gamma^{\mathrm{sol}}(A)$ は次式で与えられる。

$$E^{\mathrm{sol}}(A)=[\,4f|A|/h_0\widetilde{Q}(k)]\times[\,4\sin^2\left(\frac{kh_0}{2}\right)+g(k)\,|A|^2] \tag{9}$$

但し，$g(k)$ は p，q，k の函数。

$$\Gamma^{\mathrm{sol}}(A)\equiv\int\psi_{0,x}^{\mathrm{sol}}\,dx=16\,p\sin^2\left(\frac{kh_0}{2}\right)\,|A|/[\,h_0^2\widetilde{Q}(k)] \tag{10}$$

宗像豊哲

次の手順に従って熱膨張率δを求める。

① first Brillouin zone を巾εの segment k_i ($i=1, 2, \cdots, 2\pi/h_0\varepsilon$) に分ける。各 k_i は

$$\varepsilon/(2\pi/L)=\frac{\varepsilon L}{2\pi}$$

ケの自由度を持つ。但しLは$T=0$での格子長さ。この自由度は又，各々 $2\pi/\varepsilon$程度の空間的拡がりを持った$\varepsilon L/2\pi$ ケのソリトンが格子上に分布すると解釈する事が出来る。

② 各 segment k_i からの熱膨張への寄与$\Delta L(k_i)$は

$$\Delta L(k_i)=\frac{\varepsilon L}{2\pi}\langle \Gamma^{\mathrm{sol}}(A_{k_i})\rangle$$

で求める。

③ total expausion は

$$\Delta L=\sum_{k_i}\Delta L(k_i)=\varepsilon^{-1}\int_{\mathrm{FBZ}}\mathrm{d}k\,\Delta L(k_i)\equiv L\delta$$

④ thermal average $\langle\ \rangle$ は

$$\langle f(A_k)\rangle\equiv\frac{1}{k_{\mathrm{B}}T}\int_0^\infty \mathrm{d}E^{\mathrm{sol}}f(A_k)\,\mathrm{e}^{-E^{\mathrm{sol}}/k_{\mathrm{B}}T}\quad (f\text{ は任意の函数})$$

で定義する。

以上から我々は$T\to 0$で exact な膨張率を得ると同時に高温領域においてもδ_{exact}と同じ傾向をもつδを得た。(以上の議論の詳細及び reductive perturbation 法との比較については文献1を参照)

C. Envelope ソリトンの相互作用の効果

ソリトンの相互作用の効果を調べる為に (2) 式を拡張して次の展開を行う。

$$u_n=\sum_{i=1}^{I}\sum_{m_i=-\infty}^{\infty}\psi_m^{(i)}\mathrm{e}^{\,i m_i\theta_i},\quad \theta_i=k_i x-\omega(k_i)t \tag{11}$$

このとき averaged Hamiltonian $\overline{\mathscr{H}}$ に対して

$$\begin{aligned}\overline{\mathscr{H}}&=\sum_{i=1}^{I}\overline{\mathscr{H}}(\psi_1^{(i)})+\overline{\mathscr{H}}_{\mathrm{interaction}}\\ \overline{\mathscr{H}}_{\mathrm{interaction}}&=\frac{48f}{h_0^3}[3q-2p^2]\sum_{i\neq j}\sin^2\left(\frac{k_j h_0}{2}\right)\sin^2\left(\frac{k_j h_0}{2}\right)\\ &\quad\times\int\mathrm{d}x\,|\psi_1^{(i)}|^2|\psi_1^{(j)}|^2\end{aligned}\tag{12}$$

を得る。$\overline{\mathcal{H}}_{\mathrm{interaction}}$ は Envelope ソリトンの2体相互作用を表わしている。B.におけると同様の手順で δ を計算すると δ_{exact} にみられるsaturation効果（高温になると δ の増加率がにぶる）が一層顕著に再現されることがわかった。

D．変位－変位 相関関数

以上の envelope ソリトンの描像に基づいて格子系の変位－変位相関関数

$$S^{\mathrm{DD}}(\kappa\,;\Omega) \equiv \sum_{n-n'} \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{-i\kappa[x_n - x_{n'}] + i\Omega(t-t')} \langle u_n(t)\, u_{n'}(t') \rangle \tag{13}$$

を求めることが出来る。

$$\Omega_{\mathrm{P}} = \omega(\kappa) + \Delta \quad (\Delta > 0)$$

における peak [shifted damped phonon] と small κ, Ω の領域でのみ寄与をもつ熱膨張波の伝播から生じる central part の2つの部分から $S^{\mathrm{DD}}(\kappa\,;\Omega)$ がなりたつ事がわかった。（§C, D の内容は Journal に発表予定。）

参 考 文 献

1) T. Munakata and A. Igarashi; J. Phys. Soc. Japan (1984) 2月号

1次元 ϕ^4— Solition の Dynamics

東大・理 小 形 正 男

Krumhansl-Srieffer の論文によって，非線形1次元系における Soliton の統計力学上の役割が非常に重要であることが認識されて既に久しい。彼らは ϕ^4 系の静的及び動的性質に対する soliton (domain wall) の寄与を調べた。[1]

一方，分子動力学の computer simulation により，この soliton の役割は確認された。それと同時に，soliton が Brown 運動をしていることが判った。[2,3] この Brown 運動は soliton と熱励起された phonon との間の衝突によるとして，Wada-Schrieffer によって調べられた。[4] 我々は，さらに進んで，完全可積分ではない ϕ^4 系における soliton と phonon の間の運動量交換