# 一次元電荷密度波のピン止め機構と非線形電気伝導度

北大・理　松川 宏，高山 一

一次元電子―格子系においては，波数$Q=2k_F$（$k_F$；フェルミ波数）の格子変位と，同じ波数の電荷密度波（CDW）とが共存した，Peierls 状態が生じる。このときフェルミ面にエネルギーギャップが開き，他にフェルミ面と重なるバンドが無い場合，系は絶縁体となる。フェルミ波数$k_F$は物質のバンド構造で決まり，逆格子ベクトルの波数$2\pi/a$（$a$は一次元方向の格子間隔）の有理数倍である場合（整合CDW）とそうでない場合（不整合CDW）とがある。ここでは後者の不整合CDWを考える。この場合，系のエネルギーは結晶の格子点とCDWの相対的位置によらない。言い換えれば，このCDWは並進対称性をもち，エネルギーの供給なしに一次元方向に運動できる。実際，Fröhlich はBCS理論の出る前に，この機構―1電子描像では絶縁体だが，巨視的に凝縮したCDWが運動する―が超伝導現象を説明すると考えた。しかし，現実の結晶中に存在する不純物ポテンシャルにより，この超伝導は実現されない。即ち，CDWは不純物ポテンシャルにより"ピン止め"を受け，このピン止めに打ち勝つためのあるしきい値$E_T$以上の電場のもとでのみ，CDWの並進運動が可能となる。超伝導でこそなかったが，電荷を伴う，巨視的に凝縮した相の運動として興味深い問題で，実際，$NbSe_3$，$TaS_3$他の擬一次元物質で，種々の非線形，(準)非平衡現象が観測されている。以下に，不純物ポテンシャルのある系での不整合CDWに関して我々の行なった計算機実験の結果を報告する。[1)]

Peierls 状態での電荷密度$\rho(x,t)$は

$$\rho(x,t) = \bar{\rho} + \rho_c\cos(Qx+\phi(x,t)) \qquad (1)$$

で与えられる。$\bar{\rho}$，$\rho_c$はそれぞれ平均密度，及びCDWの振幅であり，位相$\phi(x,t)$が運動を含めたCDWの状態の詳細を記述する。ここで問題にするのはCDWの巨視的な凝縮相の振舞いであるから，$\phi(x,t)$は時間的・空間的にゆっくり変化するものとして，これを古典的な物理量として取扱う。$\phi(x,t)$，即ちCDWの変形及び運動に伴うエネルギーは，適当なスケール変換をすれば[2)]

$$\mathcal{H} \propto \int_0^L dx\left[\frac{1}{2}\left\{\frac{1}{u^2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)^2+\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)^2\right\}+n_i\varepsilon_i\sum_j^{imp}\cos(Qx_j\phi(x_j))\delta(x-x_j)-n_i^2\varepsilon_f\phi(x)\right] \qquad (2)$$

で与えられる。$u$，$n_i$はそれぞれCDWの特性速度と不純物濃度。オ2項は位置$x_j$の不純物によるポテンシャルエネルギー，オ3項は電場によるエネルギーを表わす（$\varepsilon_i$，$\varepsilon_f$は規格化された不純物ポテンシャル，及び電場の大きさ）。(2)式から導かれる$\phi(x,t)$に対する運動方程式は

$$\Gamma^2\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2}+\frac{\partial\phi}{\partial t}\right) = \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + n_i\varepsilon_i\sum_j^{imp}\sin(Qx_j+\phi(x_j))\delta(x-x_j)+n_i^2\varepsilon_f \qquad (3)$$

但し，ここで現象論的な抵抗力$-\gamma(\partial\phi/\partial t)$を導入し，かつ$\gamma t\to t$の変換を行った（$\Gamma$

$\equiv \gamma/u$)。(2),(3)式で与えられる問題の特徴は，不純物ポテンシャルの位置がランダムであり，かつ，ポテンシャルが（非線形）周期関数であること，及び注目する現象も，しきい値電場を伴う非線形伝導現象であることで，言わば，ランダム系における非線形問題である。このことから直ちに，そのエネルギーがほぼ等しい，多数の準安定状態と非線形励起（ソリトン）の存在[3]，及びそれらに伴う特徴的な運動等が予想される。我々は，連続媒質について与えられた(2),(3)式を離散型の問題に書き直し，パラメーター $\varepsilon_i$，$\varepsilon_f$，$n_i$，$\Gamma$ 等を，ほぼ $NbSe_3$ に対応すると考える値に設定し，先ずモンテカルロ法で，しきい値電場 $\varepsilon_f^t$ 以下の電場のもとでの基底状態を探し，その状態から出発して $\varepsilon_f$ を $\varepsilon_f^t$ 以上にあげたときの $\phi(x,t)$，即ちCDWの運動を，(3)式を分子動力学法で解くことにより，解析した。得られた結果を以下に列記する。

i) 予想されたように，$\varepsilon_f < \varepsilon_f^t$ の電場のもとで，複数個の準安定状態が得られた（モンテカルロ法における初期条件や，低エネルギー状態の探し方の違いによって）。特に $\varepsilon_f < \varepsilon_f^t$ の範囲で電場を上げ下げさせると，状態は必ずしももとの配置に戻らないことが多い。即ち，空間の一部の領域の $\phi(x)$ がもとの値から $2\pi$ ―(2),(3)式の不純物ポテンシャルは $2\pi$ の周期関数― だけずれたままになった状態が得られ，その境界は $2\pi$ ―ソリトン（反ソリトン）になっている。このような準安定状態の存在が，この種の系の電流―電圧特性で観測されている履歴現象，長時間緩和を伴う現象の原因と考えられる。

ii) しきい値電場 $\varepsilon_f^t$ を伴う非線形電気伝導度，及びこれに伴う単一の基本周波数をもつ "narrow band noise" が得られた。特に前者についてはサンプルの大きさ，不純物の分布の仕方に依らない結果が得られている。詳細までは実験曲線と一致するには至っていないが，'不純物によるCDWのピン止め，及び $\varepsilon_f^t$ 以上でCDWの巨視的な並進運動の出現' の描像が確証されたと考えている。

iii) $\varepsilon_f > \varepsilon_f^t$ での $\phi(x,t)$ の時間変化を具体的に調べることにより，低電場側（$1 < \varepsilon_f/\varepsilon_f^t \leq 2$）ではi)に記した $\phi(x)$ の領域構造が，動的に生じていること，即ち，$\phi(x,t)$ が一様に増加するのではなく，局所的に $\phi(x)$ が $2\pi$ 大きい領域の出現，その生長（ソリトンと反ソリトンの運動）の過程の繰り返しで全体的な $\phi(x,t)$ の増大―CDWの並進―が起っていること，を見い出した。これに伴って，この場合の電流のスペクトルには高次調和項が顕著になる。

iv) ピン止めがはずされてCDWが運動を始めた場合，定常状態の $\phi(x,t)$ のプロファイルに達するまでに，有限時間を要する。これはCDWの慣性によるものではなく，印加電場に対応したプロファイルまでに $\phi(x,t)$ が変形するに要する時間で，具体的には "narrow band noise" の振巾の緩和過程として観測される。

1) H. Matsukawa and H. Takayama, to appear in Solid State Commun.

2) H. Fukuyama and P.A. Lee, Phys. Rev. B17, 535 (1978).

3) P.B. Littlewood and T.M. Rice, Phys. Rev. Lett. 48, 44 (1982).