

# 電荷密度波の運動に伴う非線形電気伝導

京大基研, 北大理\* 高山一, 松川宏\*

$NbSe_3$  などの擬1次元導体と呼ばれる一連の物質において、波数  $Q=2k_F$  (注: フェルミ波数) の格子変位と、同じ波数をもつ電荷密度波 (CDW) とが共存した、パイエルス状態がある転移温度以下で出現する。波数ベクトルは擬1次元方向を向き、これをx軸にとれば  $CDW \rho(x)$  は

$$\rho(x) = \rho_0 + \rho_1 \cos\{Qx + \phi(x)\} \quad (1)$$

と表わされる ( $\rho_0, \rho_1$  は平均電荷密度と CDW の振幅)。パイエルス転移を起したバンドのフェルミ準位にはギャップが働き、1電子的には絶縁体状態になる。しかし、外からかかる電場  $E$  を増大させて行くと、あるしきい値電場  $E_T$  を越した途端、電気伝導度が増加し始め、十分  $E$  を大きくするとパイエルス転移を起さなかったとしたときの大きさ程度まで伝導度が回復する。関連する実験事実を総合すると<sup>1)</sup>、この非線形電気伝導現象は、相転移で生じた巨視的な凝縮体であるところの CDW が全体として並進運動することによるものと理解される。即ち、 $E < E_T$  では CDW は不純物などにピン止めされ、直流伝導には寄与しないが、 $E > E_T$  では電場の力がピン止め力を上回るためピン止めがはずれ (ディピニング)、CDW が動き出し、直流伝導に寄与する。

不純物は物質中で不規則に分布している。個々の不純物ポテンシャルが強いと CDW の波の打ち方、数学的には(1)式の位相因子  $\phi(x)$  の値は、各不純物ポテンシャルエネルギーを最も得するよう決まる (強いピン止め)。従って CDW (の位相) の空間相関長さ  $\xi_0$  は平均不純物間距離  $d_{imp}$  となる。不純物ポテンシャルが弱いときは多数の不純物による効果が含まれて CDW に対してピン止め力を発揮する (弱いピン止め)。その機構は福山-Lee-Rice (以下 FLR) によって明らかにされたが<sup>2)</sup>、この場合の  $\xi_0$  ( $\equiv \xi_{FLR}$ ) も  $d_{imp}$  よりはるかに大きいものの有限である。従って、CDW のディピニング機構として、 $\xi_0$  程度の大きさをもつ CDW の部分がピン止め力の弱いところから順次動き始める過程が予想されるが、それでは非線形伝導度  $\sigma(E)$  の  $E_T$  における急激な立ち上りを説明できない。実験事実は  $E_T$  において巨視的 (試料とほぼ同じ) サイズの CDW が一塊りとなって動き始めることを示唆する。これを CDW の動的相関と呼べば、電場によるディピニング機構には、不純物による不規則性に打ち勝って動的相関が成長していく過程と言える。パイエルス相としての長距離秩序は CDW の振幅  $\rho_1$  が担っているため、秩序相における動的な '秩序化過程' とも言えよう。

標記の研究課題において、以上のような CDW のディピニング機構の解明は最も基本的な問題の一つである。この他に、運動中の CDW に伴う '狭いバンドのノイズ' や、電場を上げ下げしたり、向きを逆転したとき見られる履歴現象など興味深い問題が多い。我々は FLR 理論に基づく計算機実験を中心として、CDW の運動に伴う非線形電気伝導現象に関する研究を進めている。以下にこれまでに得られた成果を要約する。

FLR理論では、不純物を含む擬1次元導体中のCDWの基底状態、および並進運動を  
含めた励起状態などを、時間変化も含めた(1)式の位相因子 $\phi(r,t)$ で記述する。振幅 $\rho$ の  
変調は高い励起エネルギー $\varepsilon$ に伴うので考えない。 $\phi(r,t)$ を用いると、D次元のCDW系  
のハミルトニアンは次式で与えられる:

$$A = \int d^D x \left\{ \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{u^2} \left( \frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 + (\nabla \phi)^2 \right] + b \varepsilon_i \sum_j \cos(Qx + \phi) \delta(r - R_j) - b \varepsilon_f n_i \phi \right\} \quad (2)$$

但し、エネルギーと長さに適当なスケール変換が施されている ( $u$ はCDWの位相速度、  
 $n_i$ は不純物の濃度、 $b \equiv n_i^{2D-1}$ )。時間的、空間的にゆっくり変化する $\phi(r,t)$ が問題の  
対象であるので、CDWを古典力学に従う連続媒質と見なせる。その弾性エネルギー( $\nabla \phi$ )  
はCDWの凝縮エネルギーそのものである(擬1次元導体としての異方性はこの項に現  
れぬが、連続媒質近似においては、方向に依存する長さのスケール変換で等方的な系に  
還元できる)。また項は弾性エネルギーと競合するピン止めポテンシャルで、 $\varepsilon_i$ はその大  
さき、 $R_j$ は不純物の位置を表わす。最終項はCDWと電場 $E$ とのカップリングである( $\varepsilon_f$   
は $E$ を規格化したもの)。(2)式から導かれる $\phi(r,t)$ に対する運動方程式は

$$\hbar^2 \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) = \nabla^2 \phi + b \varepsilon_i \sum_j \sin(Qx + \phi) \delta(r - R_j) + b \varepsilon_f n_i, \quad (3)$$

但し、現象論的にマサツカ $-\hbar(\partial \phi / \partial t)$ を導入し、 $\hbar \rightarrow \hbar t \rightarrow t$ の変換を行ってある( $\Gamma \equiv$   
 $\hbar / \hbar$ )。(3)式の解が求まれば、CDWの分極 $P$ とCDWが運ぶ電流 $J_{CDW}$ は

$$P = -\frac{e}{\pi V} \int x \frac{\partial \phi}{\partial x} d^D x, \quad J_{CDW} = \frac{e}{\pi V} \int \frac{\partial \phi}{\partial t} d^D x \quad (4)$$

で与えられる( $V$ は系の体積)。計算機実験では、まずモンテカルロ法で(2)式の最低エネ  
ルギー状態( $E=0$ での)を探し、次にこの状態に電場 $E$ を加えて(3)式を分子動力学法で  
解く。パラメータ $\Gamma$ は、実験事実に基づいて、CDWの運動が過制動領域に入っているように選  
ぶ。また凝縮体の準巨視的な挙動をみるので温度効果は陽には考えない(実験で見られる  
 $E_T$ の温度変化は(2),(3)式中のパラメータの温度依存性によると考える)。この手でピン止  
め強度 $\varepsilon_i$ が異なる幾つかの1, 2次元CDW系についてシミュレーションを行った。3次  
元CDW系が実在の擬1次元導体に対応するのだが、計算がかなり大型になる。現在、準  
備的計算を進めている。

CDWが担う、規格化した非線形伝導度 $\tilde{\sigma}(x) \equiv \sigma(E) / \sigma(\infty)$ と規格化した電場 $x \equiv$   
 $E / E_T$ でプロットした結果を図1に示す。小さい電場 $E_T$ で鋭い立ち上がりを見せる $\sigma(E)$   
がシミュレーションでも再現されている。点線が $NbSe_3$ の実験結果、実線はCDWを一つ  
の剛体(粒子)と見なしたとき算出される $\tilde{\sigma}(x)$ である。1粒子(0次元)模型、1次元  
、2次元CDW系の順に実験結果に近づいており、CDWの運動においてその内部自由度  
のダイナミクスが重要であることを示唆している。1次元CDWについては、弱いピン  
止め系( $\varepsilon_i \lesssim 10$ )の $\tilde{\sigma}(x)$ はユニバーサルな曲線に乗り、ピン止めが強くなるとそれ

り下にずれるが、この振舞いは後述する  
大きいEでの漸近評価と一致している。  
二次元系の $\sigma(x)$ は $\varepsilon_i$ によらず簡単な曲  
線 $1-\frac{1}{x}$ には一致しているが、偶然で  
あるのかどうかまだ解っていない。

前述の‘動的秩序化過程’の豆方から  
すると、 $E_T$ 近傍の $\sigma(E)$ の振舞いは興味  
深い。Fisher<sup>3)</sup>はこれを動的臨界現象  
としてとらえ、 $\sigma(E)$ などの $E-E_T$ に関  
する臨界指数を論じている ( $E > E_T$ が秩  
序相)。 $\nu_{CDW} \propto J_{CDW} \propto [(E-E_T)/E_T]^5$   
とすると、 $D=0$  (1粒子模型) で $\nu=1/2$ 、  
平均場近似では $\nu=3/2$ 、現実の3次元系  
ではその間の値になるものと予想される。  
我々のこれまでの計算機実験は臨界指数  
を評価する程の精度は無いが、粗く見積  
ると $D=1$ で $1/2 < \nu < 1$ 、 $D=2$ で $\nu \sim 1$   
である。実験的にも $E_T$ 近傍では履歴現象  
などが微妙に知くため、正確な $E_T$ 値お  
ぼろの決定はむづかしいようである。

Eが十分大きくなると、CDWは過制動  
を受けながらほぼ等速で並進する。不  
純物と衝突をくり返すが、その際位相  
モード (phason) を放出・吸収しなが  
ら運動量を失う。現象論的なマツカ  
ド付であれば伝導度は $\sigma(\infty) = (eb/\pi \nu^2) (\varepsilon_f/E)$   
となるが、 $\sigma(E)$ の $\sigma(\infty)$ からのず  
れはこのようなCDWの内部変動に伴  
う散逸のためと考えられる。実際  
 $\phi(x,t) = \nu_{CDW} t + \phi(x,t)$  において(5)式  
をペン止めポテンシアルに代入して振  
動的に解くと<sup>4)</sup>

$$\delta\sigma(E) \equiv 1 - \frac{\sigma(E)}{\sigma(\infty)} \cong C \varepsilon_i^2 \varepsilon_f^{(D-4)/2} \cong C' x^{(D-4)/2} \quad (5)$$

を得る ( $C'$ は $\varepsilon_i$ によらず定数)。 (5)式  
の次元依存性は phason 状態密度の違  
いによる。弱い (強い) ペン止めのと  
き $\varepsilon_f$ は $\varepsilon_i^{4/(4-D)}$  ( $\varepsilon_i$ ) に比例するから  
、係数 $C'$ は $\varepsilon_i$ によらず ( $\varepsilon_i^{D/2}$  に比例する)  
。図1の計算機実験の結果はこの漸近  
評価をよく再現している。直流電場E  
に加えて交流電場を印加すると、種  
々の直流-交流干渉現象が見られる。  
超伝導 Josephson 接合で見られる  
ac-dc干渉現象と類似しているが、右  
典論散下LR理論でこの現象がどう説  
明できるかを調べる目的で、我々は  
ペン止めポテンシアルの高次振動理  
を取り込む計算を行う。その詳細を  
検討中である。尚、弱いペン止め領  
域の1次元CDW系における‘狭いバ  
ンドのノイズ’に関する計算機実験  
も行ったが、詳細は既に公表してい  
る論文<sup>5)</sup>を参照されたい。

次に、 $E < E_T$ におけるCDWのペン  
止め状態について調べた結果を述べ  
る。CDWの母

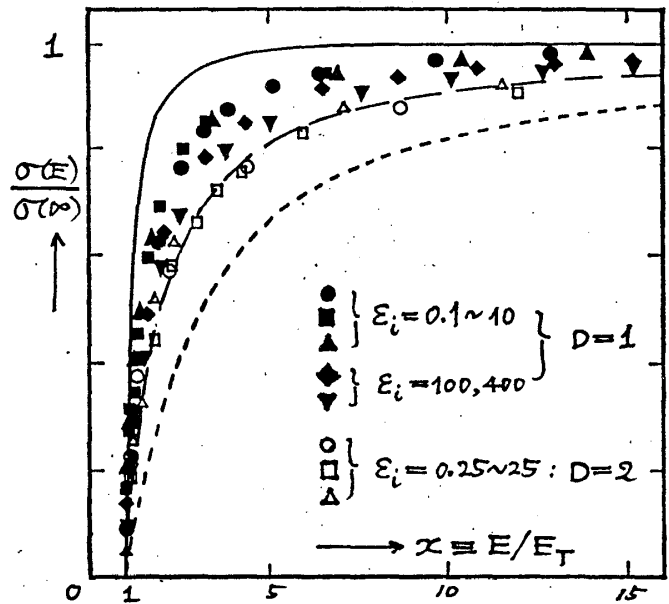


図1 CDW系の非線形電気伝導度。実線は  
正弦ポテンシアル中の1粒子模型の結果、破  
線は $1-\frac{1}{x}$ の曲線、点線は $NbSe_3$ の実験結果。

定なピン止め配置はCDWの弾性エネルギーと不純物によるピン止めエネルギーの競合で決まる。従って、CDWのピン止め現象には、競合する相互作用が共存する不規則系に固有な性質を伴う。それはエネルギー的にほぼ縮退した準安定状態が多数存在すること、関連した種々の履歴現象が期待される。我々の計算機実験においても、一つの系の $E=0$ の状態と言っても、そこへの到達の仕方によって異なる配置 $\phi(x)$ が出現する。具体的な実験と対応できる一例が $P-E$ 曲線である。試料にばらまかれた弱いピン止め不純物に加えて両端に強いピン止めセンターを置いた1次元試料において計算機実験で得られたデータを図2に示した(試料のコンタクト部分が強いピン止めセンターになっていると考えられる)。 $E=0$ での一つの安定配置に $E_T$ 以下の電場をかけるといったときの $E$ が、 $E$ が小さいうちは $\phi(x)$ は局所的にわずかに変化するだけで、分極 $P$ もほとんど変化しない。 $E$ がある程度大きくなると、比較的ピン止めが弱い部分が $2\pi$ の整数倍ずれた配置に止まる。隣接する、ピン止めが強い部分がこれを支えているためである。この過程がくり返されていって、 $E_T$ の近傍では $\phi(x)$ の配置は $E=0$ のもの比べて、系のサイズにわたって大きく変っている。この変化は $E_T$ の近傍で急激で、 $P$ の変化率(分極率)も $E_T$ に向けて増大している。これが‘動的秩序相’への臨界現象と見なせるが、ここで臨界指数を決める程はデータの精度は良くない。 $E_T$ 直前で電場を減少させ、逆向き電場の $E_T$ まで変化させると図2の履歴ループを得る。この結果は最近 $K_{0.3}MoO_3$ で観測されたもの<sup>6)</sup>と定性的に良く一致している。

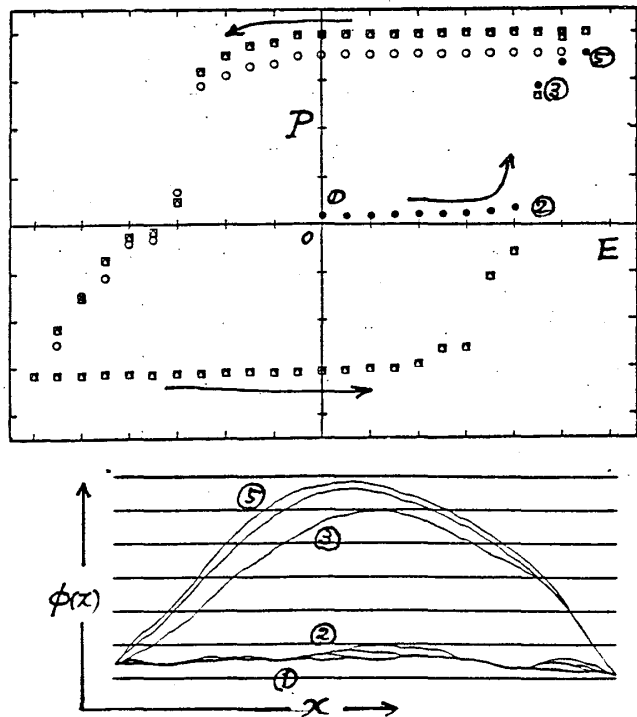


図2 1次元CDW系の $P-E$ 履歴曲線と対応する位相 $\phi(x)$ のパターン。

以上のより、FLR理論に基づく計算機実験は観測される実験事実を定性的に良く再現していると言える。今後は、定量的な比較と同時に、現象の裏に秘蔵、基本的メカニズムを明らかにしていきたい。

1) "Charge Density Waves in Solids" Budapest会議の会議録 (Lect. Note in Phys. Vol. 217).  
 2) H. Fukuyama & P.A. Lee; Phys. Rev. B17, 535 (78), P.A. Lee & T.M. Rice; ibid. B19, 3970 (79)  
 3) D.S. Fisher; Phys. Rev. B31, 1396 (85). 4) L. Sneddon et al; Phys. Rev. Lett. 59, 292 (82)  
 5) H. Matsukawa & H.T.; Solid State Commun. 52, 283 (84) 6) L. Mihaly et al; preprint.