

が分かった。acoustic phonon はソリトンの拡散に大きな影響を持つと考えられており、その解明が今後の課題である。

15. Electron Correlations in Polyacetylene

米 満 賢 治

擬一次元系物質が示す性質は非常に多様である。その性質は、少数の重要なパラメーター即ち電子のバンド巾、電子・格子相互作用、電子間相互作用などの競合や協力によって説明される。一次元系物質では低温でパイエルズ転移がおこり、基底状態が縮退していればキンク的な励起(ソリトン)が生じる。ポリアセチレンにおけるソリトンは、初めSSHモデルなどで、電子・格子相互作用のみを考えた一体問題の範囲内で研究されてきた。しかし、現実には電子相関が無視できないことも、ENDORや光吸収などの実験でわかってきた。赤外吸収やラマン散乱の実験で、ソリトンまわりの振動モードが観測されていて、ソリトンの性質について重要な情報を与えている。これらの振動モードに対する電子相関の効果をHartree-Fock近似で調べた。大まかに言って、同サイト間の斥力と隣接サイト間の斥力は振動モードに対しても逆方向に作用する。荷電ソリトンの振動モードとスピンソリトンのそれは電子間相互作用に対して逆方向に変化する。ソリトンなどの結合交替欠陥付近ではよくないと考えられるこの近似を越えるため、さらに2次までの摂動計算も静的解とともに行った。電子相関が弱いところではHF近似は定性的によく、ゆらぎを無視したため相関を過大評価していることが示された。

16. Revisit to 2D Ising Models with Frustration and with Arbitrary Boundary Conditions

知 久 哲 彦

有限系の2次元イジングモデルを周期的境界条件のもとで、厳密にとり扱った。すなわち、

- ① 周期的境界条件のもとでの分配関数における境界の効果を正確にとり入れた。
- ② 周期的境界条件を拡張し、その一般化条件のもとで分配関数を厳密に計算し、熱力学的極

限からのずれをその漸近形から議論した(正方格子)。

- ③ ②における一般化条件は、解がコンパクトに書けるためのローカルな概念(完全正方格子)と同値であることを示し、それとともに格子の分類、および物理量との対応を示した。
- ④ ローカルにフラストレーションのある系を設定し、この厳密解を求め、リエントラント現象の存在を示し、その消失とパラメーター依存性を議論する。

18. 磁場中ペンローズ格子の電子構造

畠山哲夫

準結晶の原子構造は、結晶ともランダム系とも異なることから、その電子状態も双方における電子状態とは異なったエキゾチックな性質を持つと期待され、数多くの理論的研究が行われている。特に1次元準結晶については研究が活発に行われ、準周期に由来する特異な電子構造が報告されてきた。2次元の準結晶であるペンローズ格子上の電子状態に関する報告は、まだ緒についたばかりで、シミュレーション的考察が主流である。

さて私は、一様な磁場をかけたペンローズ格子の1電子状態のエネルギースペクトルを強結合近似を用いて数値的に求め、次の結果を得た。

- (1) 状態密度は磁場中でもエネルギー0を中心に鏡映対称を持ち、しかもエネルギー0の所に幅0の鋭いピークをもつ。このピークを構成する状態は、外場の無いときと同様、原点を中心にある幅のサークル状に完全に局在した“ring state”である。
- (2) エネルギー準位は、周期系のランダウ準位に類似した準位に集積する傾向を示す。
- (3) エネルギースペクトルを磁場の強さに対して描いた形状は自己相似の構造を持ち、その周期は準周期的である。

文 献

- 1) T. Hatakeyama and H. Kamimura: Solid State Commun., 62 (1987), in press.