

の理由のため単結晶の育成は不可能なので、次善の試料として良好な一軸配向試料の合成方法を研究している。

### ポリアセチレンの金属転移

東大・理 和田 靖

針 谷 喜久雄

ソリトンの励起をもつ古典的物質にポリアセチレンがある。それを不純物で数%ドーピングすると金属転移を示す。その機構についてはまだ定説がない。最近、金属に匹敵する高伝導度の試料も作られるようになって、その解明は重要になった。

試料内の不純物配位には規則性があるとの指摘もあるが、我々はこれがランダムだと仮定して議論する。不純物としてそれが存在するサイトでの電子順位が乱されるサイト型と、その附近での電子移動を乱すボンド型をとり上げるが、金属転移に関係するのは主にサイト型である。

はじめにポリアセチレンを連続体とするTLM模型に不純物効果を加えたものをCPAを用いて解いた。電子数は準位数の半分で、格子の共役性を表すオーダーパラメタは一定とする。不純物濃度とそのポテンシャル強度を変数とする相図を求めると金属相が得られたが、濃度強度共に大きい領域にあった。

CPAの有効さは小さな体系を数値的に解いて比較することで確かめられた。100サイトの系に100種類の不純物分布をとって平均した。数値的方法は電子数が不純物濃度によって決まる場合にも適用できる。実験試料はこの種のもので、不純物がなければオーダーパラメタはソリトン格子になる。小さな系での結果からエネルギーギャップを求める方法は自明ではないが、それを最も自然に定義すると実験に対応する濃度と強度の領域でギャップが零になることが示された。これが金属転移であるが、その大きな特徴はオーダーパラメタが零にならず残っていることである。

### 電場下の荷電ソリトン

東邦大・理 小野 嘉之

ポリアセチレン中のソリトンには2種類の荷電ソリトンと1種類の中性ソリトンが知られている。荷電ソリトンは電場によって加速できることを利用して、Domain Wallとしてのソリトンのダイナミクスを数値計算によって調べた。

ポリアセチレンのソリトンは電子格子相互作用の結果生じる格子歪の二量体化構造のキックとしての特性と、それが電子系の自由度と絡んで複雑な内部構造を持つという特性とがあり、ダイナミクスを調べる際も、動いているソリトンにおいて、この2つの自由度がどのように絡み合っている

のかが興味ある問題である。

本研究では、ポリアセチレンに対して一般に受けいられているSSHモデルに、電場（時間に依存するベクトルポテンシャルによって導入）を加えて、初期に静止していたソリトンを動かした。その結果、ソリトン電荷と二量体化パターンの運動を、何の仮定も無しに自己無撞着に可視化する事に成功した。データの解析の結果、ソリトンは加える電場の強さによらない速度の上限を持つこと。また、電子エネルギーや格子の弾性エネルギーが時間的に固有の振動を示すこと、その振動がキックの幅の振動に関連していることなどが判明した。

同じ計算方法で、ポリアセチレンの光励起のダイナミックスやソリトンの衝突過程なども扱うことが出来るので、今後の進展が期待される。

尚、この研究は寺井章氏（東大・理）、桑原真人君（東邦大大学院）との共同研究である。

### KDP, CDPの分域凍結のダイナミックス

広大・理 出口 潔

一般に、強誘電体結晶が相転移して強誘電相に入ると、自発分極が反対方向を向いた2種類の分域からなる強誘電的分域構造が現れる。この分域境界（分域壁）は外部電場によって容易に移動し強誘電相における誘電率を増加させる。

それぞれKDP, CDPと省略される強誘電体結晶の強誘電相における低周波誘電率は、この分域壁の運動のために $10^8$ にも及ぶ極めて大きな値を示し、相転移温度 $T_c$ の30Kほど低温( $T_0$ )で急激に減少する。これらの結晶の複素誘電率を10Hz~1GHzの周波数領域で調べた結果、分域壁の運動に起因する2種類の緩和型分散を見出した。分散の緩和時間は、Vogel-Fulcher則に良く従い、 $T_0$ に向かって著しく長くなる。この結果は、分域壁の運動が $T_0$ 付近ではほぼ停止していること（分域凍結）を示している。

KDPの分域壁は自発歪の反転を伴って移動するために、分域凍結は結晶の弾性的性質にも大きな影響を与える。圧電共振法で測定された弾性定数 $C_{66}^E$ は、 $T_c \sim T_0$ の温度領域で非常に小さく、 $T_0$ 付近で急激に増加する。この挙動は、本研究会で論議されたマルテンサイト転移における弾性的性質（鈴木先生）や超弾性定数の理論（山田先生）と共通の土台で理解できると思われる。

なお、当研究は広大・中村英二教授及び海上保安大・倉本和興氏と共に現在進めているものである。