

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