

Theory of Fluctuation in
the One-Dimensional Electron-Phonon System

— zero point fluctuation and thermal fluctuation —

6 月 20 日 受理

長崎造船大学 北 村 豊 幸
筑波大学物理 堺 英二郎

§ 1. Introduction

TTF-TCNQ における異常なピークが Coleman 達¹⁾ によって観測されて以来、一次元の electron-phonon 系の Peierls transition²⁾ が脚光を浴び、現象論の立場からも、微視的理論の立場からも議論されてきた。³⁾

微視的な取扱いとして、Suzumura-Kurihara⁴⁾ は温度 Green's function を使って、Renormalized random phase approximation (RRPA) の範囲内で Peierls transition を検討した。彼らは vertex correction がある場合とない場合を検討し、前者は Peierls transition が絶対零度で起りうるが、後者は絶対零度でも起こり得ないと結論した。

我々は独自の立場から、RRPA の範囲内で近似の意味をはっきりさせながら、fluctuation の効果を zero-point fluctuation と thermal fluctuation とに分離して考察することを試みたところ、Suzumura-Kurihara と細かい点では異なる結果を得たが、Peierls transition が起こらないということでは一致する結論を得た。更に高温領域では thermal fluctuation が、低温領域では zero-point fluctuation がきき、絶対零度では zero point fluctuation が Peierls transition をこわしていることを示すことができた。これは一次元では zero point fluctuation の効果によって絶対零度においても long range order が生じないという S. Takada の一般論⁵⁾ と一致する。同時に我々は fluctuation の温度依存性を明確にすることができた。

§ 2 において、RRPA の範囲での formulation を示し、electron Green's function を求める。§ 3 では phonon Green's function の self-energy part を計算し、その phonon frequency と momentum の依存性が、それらの領域によって異なっていること

Hamiltonian を次のように与える：

ここで、 ξ_p は free electron energy, a_p^+ と a_p はそれぞれ、電子の生成・消滅演算子、 ω_q , b_q^+ , b_q はそれぞれ phonon の energy, 生成, 消滅演算子, g は電子と phonon の結合定数である。また $\varphi_q = \sqrt{\omega_q/2} (b_q + b_{-q}^+)$ 。

温度 Green's function は次のように与えられる：

$$\mathcal{D}(\mathbf{q}, i\zeta_\ell) = - \int_0^\beta d\tau \langle T \varphi_{\mathbf{q}}(\tau) \varphi_{\mathbf{q}}(0) \rangle e^{i\zeta_\ell \tau} \quad (3)$$

ここで、 $\beta = 1/T$, $\langle \rangle$ は thermal average を意味する。電子の Green's function $\mathcal{G}(\mathbf{p}, i\omega_n)$ に対する self-energy part $\Sigma(\mathbf{p}, i\omega_n)$ は, Renormalized random phase approximation (RRPA) の範囲において

となる。ここで double line は true electron Green's function, double wavy line は true phonon Green's function, K は reciprocal lattice vector である。

今, (4) 式において, $q, i\zeta_\ell \sim 0$ では, phonon が softening に近づくため, p と $i\zeta_\ell$

が0の近傍から来ると考えることができる。そこで electron self-energy partを次のように近似する。

$$\Sigma(\mathbf{p}, i\omega_n) = \Delta^2 \mathcal{G}(\mathbf{p} - \mathbf{K}, i\omega_n) \quad (5)$$

ここで

$$\Delta^2 = - \frac{g^2}{\omega_K} T \sum_{\mathbf{q}, i\zeta_\ell} \mathcal{D}(\mathbf{K} + \mathbf{q}, i\zeta_\ell) \quad (6)$$

次に, phonon self-energy part についても, RRPA の範囲において求めると,

$$\Pi(K+q, i\zeta_\ell) = \begin{array}{c} p, i\omega_n \\ \text{---} \curvearrowright \text{---} \\ K+q-p, i\zeta_\ell - i\omega_n \end{array}$$

となる。

electron Green's function は (5) 式から代数的計算で容易に求めることができる。

$$\mathcal{G}(\mathbf{p}, i\omega_n) = \frac{\sqrt{\xi_p^2 + \omega_n^2} (\sqrt{\xi_p^2 + \omega_n^2 + 4\Delta^2} - \sqrt{\xi_p^2 + \omega_n^2})}{2\Delta^2(i\omega_n - \xi_p)} \quad (8)$$

$$\mathcal{G}(\mathbf{p}-\mathbf{K}, i\omega_n) = \frac{\sqrt{\xi_p^2 + \omega_n^2} (\sqrt{\xi_p^2 + \omega_n^2 + 4\Delta^2} - \sqrt{\xi_p^2 + \omega_n^2})}{2\Delta^2(i\omega_n + \xi_n)} \quad (9)$$

(但し, band は half-filled で $\xi_{\mathbf{p}-\mathbf{K}} = -\xi_{\mathbf{p}}$ とした)。

§ 3. phonon self-energy part の計算

初めに, $\Pi(K, 0)$ を求めてみよう。(7) に (8) と (9) を代入することによって,

$$\Pi(K, 0) = -\frac{2g^2}{\omega_K} T \sum_{p, \omega_n} \frac{1}{(\sqrt{\omega_n^2 + \xi_p^2} + \sqrt{\omega_n^2 + \xi_p^2 + 4\Delta^2})^2} \quad (10)$$

となる。 ω_n の summation を contour 積分に置きかえ、解析接続することにより、(10) 式は

$$\Pi(K, 0) = - \frac{\lambda}{\pi \Delta^4} \int_a^W d\xi \int_a^A dz \tanh \frac{z}{2T} \sqrt{(z^2 - a^2)(A^2 - z^2)} \quad (11)$$

となる。ここで、 λ は電子と phonon の無次元の結合定数、 W はバンド幅である。

$$a \equiv \xi, \quad A \equiv \sqrt{\xi^2 + 4\Delta^2} \quad (12)$$

と定義する。 $\tanh \frac{z}{2T} = 1 - 2f(z)$ とし、(11) 式を二つの部分に分け、それぞれ $\Pi(K, 0)$, $\Pi_t(K, 0)$ とすれば、

$$\Pi_z(K, 0) = - \frac{\lambda}{\pi 4 \Delta^4} \int_0^W d\xi \int_a^A dz (z^2 - a^2)^{1/2} (A^2 - z^2)^{1/2} \quad (13)$$

となる。(13) 式の右辺の z に関する積分は $z^2 = A^2(1 - k^2 u^2)$, $k^2 = 4\Delta^2/A^2$ なる変数変換をほどこせば、楕円積分で表現され、

$$\int_a^A dz (z^2 - a^2)^{1/2} (A^2 - z^2)^{1/2} = \frac{4}{A} \{ I_2(k^2) - I_4(k^2) \} \quad (14)$$

となる。ここで、

$$I_n(k^2) \equiv \int_0^1 \frac{u^n}{(1 - u^2)^{1/2} (1 - k^2 u^2)^{1/2}} du \quad (15)$$

である。さらに

$$\left. \begin{aligned} I_0(k^2) &= F\left(\frac{\pi}{2}, k\right) \\ I_2(k^2) &= \frac{1}{k^2} \left\{ \left(\frac{\pi}{2}, k\right) - E\left(\frac{\pi}{2}, k\right) \right\} \\ I_4(k^2) &= \frac{2(k^2 + 1)}{3k^2} I_2(k^2) - \frac{1}{3k^2} I_0(k^2) \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

なる楕円積分を k^2 について展開すれば

$$\Pi_z(K, 0) \cong - \lambda \log \frac{W}{\Delta} \quad (17)$$

となる。次に $\Pi_t(K, 0)$ の項は、 $T < \Delta < W$ と仮定し、 ξ と z の積分順序を交換して積分すれば、

$$\Pi_t(K, 0) \cong \frac{3}{2} \lambda \zeta(3) \left(\frac{T}{\Delta}\right)^3 \quad (18)$$

となる。ここで $\zeta(3)$ は ζ -関数である。こうして

$$\Pi(K, 0) = -\lambda \ln \frac{W}{\Delta} + \frac{3}{2} \lambda \zeta(3) \left(\frac{T}{\Delta}\right)^3 \quad (19)$$

を得る。

さて次に $\Pi(K+q, 0)$ を求めてみよう。そのためには、 $\Pi(K, 0)$ を求めてあるので、 $\Pi(K+q, 0) - \Pi(K, 0)$ を求めればよい。

$$\begin{aligned} \Pi(K+q, 0) - \Pi(K, 0) &= \frac{\lambda}{\Delta^4} T \sum_{\omega_n} \int_{-W}^W d\xi \left[\frac{(i\omega_n + \xi)(i\omega_n - \xi')}{(\omega_n^2 + \xi^2)^{1/2}(\omega_n^2 + \xi'^2)^{1/2}} \right. \\ &\quad \times \{(\omega_n^2 + \xi^2 + 4\Delta^2)^{1/2} - (\omega_n^2 + \xi^2)^{1/2}\} \{(\omega_n^2 + \xi'^2 + 4\Delta^2)^{1/2} \\ &\quad \left. - (\omega_n^2 + \xi'^2)^{1/2}\} + \{(\omega_n^2 + \xi^2 + 4\Delta^2)^{1/2} - (\omega_n^2 + \xi^2)^{1/2}\} \right] \quad (20) \end{aligned}$$

となる。ここで $\xi' = \xi + 2\eta$, $2\eta = v_F q$ である。 ξ 積分の積分範囲を $(-W, -\eta)$ と $(-\eta, W)$ とに分け、前者の積分変数 ξ を $-\xi + \eta$, 後者の積分変数 ξ を $\xi + \eta$ に変換すれば、対称性のよい次の式を leading term の η/W のオーダーの範囲内で得る。

$$\begin{aligned} \Pi(K+q, 0) - \Pi(K, 0) &\cong \frac{\lambda}{\Delta^4} \int_0^W d\xi T \sum_{\omega_n} \left[- \frac{2(\omega_n^2 + ab)}{(\omega_n^2 + a^2)^{1/2}(\omega_n^2 + b^2)^{1/2}} \right. \\ &\quad \times \{(\omega_n^2 + A^2)^{1/2} - (\omega_n^2 + a^2)^{1/2}\} \{(\omega_n^2 + B^2)^{1/2} - (\omega_n^2 + b^2)^{1/2}\} \\ &\quad \left. + \{(\omega_n^2 + A^2)^{1/2} - (\omega_n^2 + a^2)^{1/2}\}^2 + \{(\omega_n^2 + B^2)^{1/2} - (\omega_n^2 + b^2)^{1/2}\} \right] \quad (21) \end{aligned}$$

ここで、

$$\left. \begin{aligned} a &\equiv \xi - \eta, & A &\equiv \sqrt{(\xi - \eta)^2 + 4\Delta^2}, \\ b &\equiv \xi + \eta, & B &\equiv \sqrt{(\xi + \eta)^2 + 4\Delta^2} \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

こうしておいて、次に ω_n -sum を contour 積分になおし、解析接続することによって

(21) 式は次のようになる。

$$\begin{aligned}
 \Pi(K+q, 0) = & \frac{2\pi}{\pi\Delta^4} \int_0^W d\xi \left[\int_{|a|}^b dz \tanh \frac{z}{2T} \frac{(z^2-ab)(A^2-z^2)^{1/2}(B^2-z^2)^{1/2}}{(b^2-z^2)^{1/2}(z^2-a^2)^{1/2}} \right. \\
 & + \int_A^B dz \tanh \frac{z}{2T} \frac{(z^2-ab)(B^2-z^2)^{1/2}(z^2-A^2)^{1/2}}{(z^2-a^2)^{1/2}(z^2-b^2)^{1/2}} \\
 & \left. + 2\eta a \int_{|a|}^A dz \tanh \frac{z}{2T} \sqrt{\frac{A^2-z^2}{z^2-a^2}} - 2\eta b \int_b^B dz \tanh \frac{z}{2T} \sqrt{\frac{B^2-z^2}{z^2-b^2}} \right]
 \end{aligned} \quad (23)$$

ここで、 $|a| < b < A < B$; $W\eta < \Delta^2$ と仮定している。

さて、 $\Pi(K, 0)$ の計算のときと同様に、 $\tanh \frac{z}{2T} = 1 - 2f(z)$ とし、(23) 式を2つの部分、 $\Pi_z(K+q, 0) - \Pi_z(K, 0)$ と $\Pi_t(K+q, 0) - \Pi_t(K, 0)$ に分ける。 $\Pi(K+q, 0) - \Pi_z(K, 0)$ の計算において、 $\eta, T < \Delta < W$ の条件のもとでは、第1項の $\sqrt{(A^2-z^2)(B^2-z^2)}$ は $4\Delta^2$ 、第2項の $(z^2-ab)/\sqrt{(z^2-a^2)(z^2-b^2)}$ は1と、 η^2/Δ^2 のオーダーの範囲内で近似することができる。こうして、

$$\begin{aligned}
 \Pi_z(K+q, 0) - \Pi_z(K, 0) \\
 \cong \frac{2\lambda}{\pi\Delta^4} \int_0^W d\xi \left[\int_{|a|}^b dz \frac{4\Delta^2(z^2-ab)}{\sqrt{(b^2-z^2)(z^2-a^2)}} + \int_A^B dz \sqrt{(B^2-z^2)(z^2-A^2)} \right. \\
 \left. + 2\eta a \int_{|a|}^A dz \sqrt{\frac{A^2-z^2}{z^2-a^2}} - 2\eta b \int_b^B dz \sqrt{\frac{B^2-z^2}{z^2-b^2}} \right]
 \end{aligned} \quad (24)$$

を得る。(24) 式の積分は、 $\Pi_t(K+q, 0) - \Pi_t(K, 0)$ の結果と比較するために、 ξ と z の積分順序を交換しておいた方がよい。(24) 式は楕円積分に帰着され、(16) 式を使って表現することができる。 η^2 についての leading term を求めると、 η^2/Δ^2 のオーダーの範囲で

$$\begin{aligned}
 \Pi_z(K+q, 0) - \Pi_z(K, 0) & \cong \frac{\lambda W^2}{\Delta^4} \eta^2 + 4\lambda \left(\frac{\eta}{\Delta}\right)^2 \ln \frac{\Delta}{\eta} \\
 & = \lambda \left(\frac{\eta}{\Delta}\right)^2 \left[\left(\frac{W}{\Delta}\right)^2 + 4 \ln \frac{\Delta}{\eta} \right]
 \end{aligned} \quad (25)$$

となる。

次に $\Pi_t(K+q, 0) - \Pi_t(K, 0)$ を求めてみよう。 $\eta, T < \Delta < W$ の条件の下では, 上記の近似式以外に, $z > \Delta$ で $f(z) \sim 0$ なることを使えば

$$\Pi_t(K+q, 0) \cong -\frac{16\pi}{\pi\Delta^4} \int_0^W d\xi \int_{|a|}^b dz f(z) \frac{\Delta^2(z^2 - ab)}{\sqrt{(b^2 - z^2)(z^2 - a^2)}} \quad (26)$$

となり, ξ と z の積分順序を交換すれば,

$$\Pi_t(K+q, 0) - \Pi_t(K, 0) \cong -\frac{32\lambda\eta}{\pi\Delta^3} \int_0^\infty dz z f(z) \frac{1}{b'} [I_0(k^2) - 2I_2(k^2)] \quad (27)$$

となる。ここで $a' = z - \eta$, $b' = z + \eta$, $k^2 = (b'^2 - a'^2)/b'^2$ である。 k^2 について展開し, leading term を求めると,

$$\Pi_t(K+q, 0) - \Pi_t(K, 0) \cong -4\lambda \left(\frac{\eta}{\Delta}\right)^2 \ln \frac{T}{\eta} \quad \frac{\eta}{T} < 1 \quad (28)$$

$$\cong 12\zeta(3) \frac{\lambda T^3}{\eta \Delta^2} \quad \frac{\eta}{T} > 1 \quad (29)$$

以上の結果をまとめ, ζ_ℓ と $2\eta = \tilde{\eta}$ の対称性を使うと,

$|\tilde{\eta}|/T, |\zeta_\ell|/T < 1$ の場合

$$\Pi(K+q, i\zeta_\ell) - \Pi(K, 0) = \lambda \left[\left(\frac{W}{\Delta}\right)^2 + \ln \frac{\Delta}{T} \right] \left[\left(\frac{\zeta_\ell}{\Delta}\right)^2 \right] \quad (30)$$

$|\tilde{\eta}|/T, |\zeta_\ell|/T > 1$ の場合

$$\begin{aligned} \Pi(K+q, i\zeta_\ell) - \Pi(K, 0) = \lambda \{ & \left(\frac{W}{\Delta}\right)^2 \left[\left(\frac{\tilde{\eta}}{\Delta}\right)^2 + \left(\frac{\zeta_\ell}{\Delta}\right)^2 \right] + \left(\frac{\tilde{\eta}}{\Delta}\right)^2 \ln \frac{\Delta}{|\tilde{\eta}|} \\ & + \left(\frac{\zeta_\ell}{\Delta}\right)^2 \ln \frac{\Delta}{|\zeta_\ell|} \} \end{aligned} \quad (31)$$

となる。

§ 4. self-consistent equation

今(6)式の ζ_ℓ の sum を contour 積分になおし, 解析接続をする。その結果において,

$\coth \frac{z}{2T} = 1 + 2n(z)$; $n(z)$: Bose 分布関数から, Δ^2 を zero point fluctuation による項 Δ_z^2 と thermal fluctuation による項 Δ_t^2 とに分離する。 Δ_t^2 において $n(z) \cong T/z$ と近似すれば

$$\Delta^2 = \Delta_z^2 + \Delta_t^2 \quad (32)$$

$$\Delta_z^2 = -\frac{\lambda}{\pi} \int_0^\kappa d\tilde{\eta} \int_0^\infty d\zeta \mathcal{D}(K+q, i\zeta) \quad (33)$$

$$\Delta_t^2 = -\lambda T \int_0^\kappa d\tilde{\eta} \mathcal{D}(K+q, 0) \quad (34)$$

となる。ここで κ は phonon wave vector の cut off である。

次に phonon Green's function $\mathcal{D}(K+q, i\zeta_\ell)$ は,

$$\omega_K^2 \mathcal{D}^{-1}(K+q, i\zeta_\ell) \cong -[\zeta_\ell^2 + \lambda \omega_K^2 \{\varepsilon + \frac{1}{\lambda} (\Pi(K+q, i\zeta_\ell) - \Pi(K, 0))\}] \quad (35)$$

となる。ここで

$$\varepsilon \equiv \frac{1}{\lambda} + \frac{1}{\lambda} \Pi(K, 0) \quad (36)$$

と定義する。(33), (34) 式における $\tilde{\eta}$ 積分の主要な寄与は $0 \sim \kappa' = \min(\Delta \exp(-W^2/\Delta^2), \Delta \exp(-\lambda \omega_K^2/\Delta^2))$ の領域であることがわかる。 $\kappa' < \kappa$ であるから, $0 \sim \kappa'$ における $\mathcal{D}(K+q, i\zeta_\ell)$ の振舞いを (30), (31) と (35) 式から求めると次の表のようになる。

$\tilde{\eta}, \zeta_\ell$	$0 \sim T$	$T \sim \kappa'$
$\lambda \mathcal{D}^{-1}(K+q, i\zeta_\ell)$	$\varepsilon + [(\frac{\tilde{\eta}}{\Delta})^2 + (\frac{\zeta_\ell}{\Delta})^2] \ln \frac{\Delta}{T}$	$\varepsilon + (\frac{\tilde{\eta}}{\Delta})^2 \ln \frac{\Delta}{ \tilde{\eta} } + (\frac{\zeta_\ell}{\Delta})^2 \ln \frac{\Delta}{ \zeta_\ell }$

まず (33) 式において Δ_z^2 を表を使って計算することを考えてみよう。

$$\Delta_z^2 \cong -\frac{\lambda}{\pi} \left[\int_0^T d\tilde{\eta} \int_0^T d\xi \mathcal{D}(K+q, i\zeta) \right]$$

$$+ 2 \int_0^T d\xi \int_T^{\kappa'} d\tilde{\eta} \mathcal{D}(K+q, i\xi) + \int_T^{\kappa'} d\tilde{\eta} \int_T^{\kappa'} d\xi \mathcal{D}(K+q, i\xi) \quad (37)$$

において、温度に依存して最も主要な寄与は右辺第3項からくる。それ故

$$\Delta_z^2 \cong \Delta^2 \ln \ln \frac{1}{\epsilon} \quad (38)$$

次に thermal fluctuation による寄与 Δ_t^2 を求めよう。

$$\Delta_t^2 \cong -2\lambda T \left[\int_0^T d\tilde{\eta} \mathcal{D}(K+q, 0) + \int_T^{\kappa'} d\tilde{\eta} \mathcal{D}(K+q, 0) \right] \quad (39)$$

において、主要な寄与は右辺第1項からきて、その結果、

$$\Delta_t^2 = \frac{2\Delta T}{\sqrt{\epsilon \ln \frac{\Delta}{T}}} \tan^{-1} \sqrt{\frac{T^2 \ln \frac{\Delta}{T}}{\Delta^2 \epsilon}} \quad (40)$$

を得る。

§ 5. Concluding Remarks

Suzumura-Kurihara の preprint では phonon Green's function $\mathcal{D}(K+q, i\xi_\ell)$ の振舞いが不明確であるが、我々の結果は表に示されるように、 $\tilde{\eta}$ と ξ_ℓ の範囲によって異なる振舞をしていることを示すことができる。しかし (32), (38) と (40) 式から Peierls transition は RRPA の近似の範囲内では起こらないということは一致する。

次に (32), (38) と (40) 式を使って、zero point fluctuation Δ_z^2 と thermal fluctuation Δ_t^2 の Δ^2 への寄与を検討してみよう。 Δ_t^2 と Δ_z^2 のききかたは温度に依存し、 $T > \Delta / \exp \exp 1$ と $T < \Delta / \exp \exp 1$ との温度領域に分けられ、 Δ_t^2 は前者の温度領域で Δ_z^2 は後者の温度領域で重要な役割をしている。

i) $T > \Delta / \exp \exp 1$: thermal fluctuation の寄与

この温度領域では Δ_t^2 がきき、 Δ_z^2 は重要ではない。従って (32) 式と (40) 式とから

$$\epsilon \sim \left(\frac{T}{\Delta}\right)^2 \left(\ln \frac{\Delta}{T}\right)^{-1} \quad (41)$$

と与えられる。

ii) $T < \Delta / \exp \exp 1$: zero point fluctuation の寄与

この温度領域では、 Δ_z^2 によって決められ Δ_i^2 はきかない。(32) 式と (38) 式によって self-consistent equation が成立するために、 ϵ の振舞いは温度が低下するに従って次のように変化する。

$$\left. \begin{array}{ll} T \sim \Delta / \exp \exp \exp 1 & \epsilon \sim \left(\ln \frac{\Delta}{T} \right)^{-1} \\ \vdots & \\ T \sim \Delta / \underbrace{\exp \exp \cdots \exp 1}_{n+2} & \epsilon \sim \left(\underbrace{\ln \ln \cdots \ln \frac{\Delta}{T}}_n \right)^{-1} \end{array} \right\} \quad (42)$$

(42) 式のように、温度 T は限りなく 0 に近づくことができる。 T が限りなく 0 に近づけば近づく程、 ϵ の 0 への近づき方はますますゆっくりになっていく。究極において Peierls transition は起こらないことがわかる。

Δ の温度依存性は (19) と (36) 式を使って、 $T=0$ における Δ を Δ_0 とすれば、

$$\Delta \cong \Delta_0 \exp(-\epsilon) \quad (43)$$

となる。ここで $\Delta_0 = W \exp\left(\frac{1}{\lambda}\right)$ である。

以上のように、RRPA の範囲内で一次元では絶対零度においても Peierls transition が生じないことが示された。従って Peierls transition が起こるためには、三次元効果が重要である。我々は三次元効果を考慮し、異方性の強い擬一次元電子・フォノン系の問題を現在検討中である。

最後に一次元電子・フォノン系の計算するにあたり、非常に有益な discussion をして下さいました Dr. S. Takada に心から感謝します。

参 考 文 献

- 1) L. B. Coleman, M. J. Cohen, D. J. Sandman, F. G. Yamagishi, A. F. Garito and A. J. Heeger : Solid State Commun. 12 1125 (1973)
- 2) R. E. Peierls : Quantum Theory of Solids (Clarendon Press, Oxford, 1955) Chap. V p. 108
- 3) 例えば、福山秀敏：物性 15 492 (1974) に解説がある。
- 4) preprint
- 5) preprint