

山口大理 原純一郎
物性研 福山秀敏 中野隆

Su, Schrieffer と Heeger (SSH) がポリアセチレンにおけるソリトンの存在を提唱して以来, 1次元電子-格子系のソリトンについて種々の研究がなされて来た。しかしながらそれらの研究は, 電子間の相互作用がない場合^{1)~7)}か, または, 電子間の相互作用が斥力で強い極限の場合⁸⁾に限られていた。ここでは, 電子間の相互作用を考慮に入れ, $1/2$ あるいは $1/3$ つまったバンドを持つ電子-格子系のソリトンについて議論する。

(1) $1/2$ つまったバンドの場合

SSHのハミルトニアンに電子間の相互作用を付け加えたものを, 系のハミルトニアンとしよう。電子間の相互作用が十分弱いとし, 電子場をボゾン表示^{9), 10)}すると, ハミルトニアンは,

$$H = \int dx \left[A_p (\nabla \theta)^2 + A_\sigma (\nabla \phi)^2 + C_p P^2 + C_\sigma M^2 + B_p \cos 2\theta + B_\sigma \cos 2\phi - 2gu \cos \theta \cos \phi + Ku^2 \right] \quad (1)$$

となる。ここで, θ と ϕ は電子場のボゾン表示の際に導入された位相の演算子であり, 局所的な電荷密度 $P(x)$ とスピン密度 $m(x)$ とは,

$$P(x) = \frac{1}{\pi} \nabla \theta(x), \quad m(x) = \frac{1}{2\pi} \nabla \phi(x) \quad (2)$$

の関係で結ばれている。また, P と M はそれぞれ θ と ϕ に正準共役な演算子である。 $u(x)$ は格子のひずみを表し, g と K はそれぞれ電子-格子相互作用の結合定数と弾性定数である。 A_p, A_σ, C_p 及び C_σ は, 電子間の相互作用の強さに依存する定数であり^{11), 12)}, 電子間の相互作用のない時は, $A_p = A_\sigma = v_F/4\pi$, $C_p = C_\sigma = \pi v_F$ (v_F はフェルミ速度)である。一方 B_p と B_σ は, 電子間相互作用の内, ウムクラップ過程と後方散乱の強さを表している(以下, 簡単のため $B_p < 0$, $B_\sigma < 0$ の場合を考える)。見通しをよくする為に古典近似で議論をすすめよう(つまり(1)式において $C_p P^2$ と $C_\sigma M^2$ の項を無視する)。この近似では, 系の安定な状態は,

$$A_p \Delta \theta + B_p \sin 2\theta - gu \sin \theta \cos \phi = 0, \quad (3)$$

$$A_\sigma \Delta \phi + B_\sigma \sin 2\phi - gu \cos \theta \sin \phi = 0, \quad (4)$$

$$Ku - g \cos \phi \cos \theta = 0 \quad (5)$$

の解として与えられ, 基底状態は, $\theta(x), \phi(x)$ とも場所 x に依存せず, $(\theta, \phi) = (m\pi, n\pi)$ である(図1.の黒点に対応)。局所的励起状態であるソリトンは, $x \rightarrow \pm\infty$ において $(\theta, \phi) \rightarrow (m\pi, n\pi)$ となるので, その軌跡を θ - ϕ 平面に投影すると, 図1.の様に基底状態の周を結ぶ曲線として表される。(2)式より, 直線 S は, スピン $S = \pm 1/2$, 電荷 $Q = 0$ の中性ソリトン, 直線 C は, $S = 0$

$Q = \pm e$ の電荷ソリトンに対応している事がわかる。
生成エネルギーは、

$$E_S = 4 \sqrt{A_\sigma \left(\frac{g^2}{K} - 2B_\sigma \right)}, \quad E_C = 4 \sqrt{A_\rho \left(\frac{g^2}{K} - 2B_\rho \right)}$$

となり電子間相互作用により、中性ソリトンと電荷ソリトンの生成エネルギーに差が生じ得る事を示している。直線Pは、 $A_\sigma = A_\rho = A$, $B_\sigma = B_\rho = B$ の場合のホーラロン ($S = \pm 1/2$, $Q = \mp e$) を表しており生成エネルギーは、

$$E_P = 2 \sqrt{2A \left(\frac{g^2}{K} - 4B \right)} \times \left[\sqrt{\lambda^2 + 1} + \frac{1}{\lambda} \ln |\lambda + \sqrt{\lambda^2 + 1}| \right]$$

である ($\lambda = \sqrt{g^2 / (g^2 - 4BK)}$)。この状態は、一般には (つまり $A_\sigma \neq A_\rho$, $B_\sigma \neq B_\rho$) 直線Pからずれ、トポロジカルにも電子間相互作用のない時のホーラロンと違ってくる。

(2) $1/3$ つまったバンドの場合

この場合のハミルトニアンを古典近似で書くと、

$$E_3 = \int dx \left[A_\rho (\nabla \theta)^2 + A_\sigma (\nabla \phi)^2 + 2gu \sin(\theta - \theta_{ph}) \cos \phi + \frac{1}{2} u^2 \cos \phi \cos(\theta + 2\theta_{ph}) + Ku^2 \right] \quad (6)$$

となる。ここで、 θ_{ph} は $u_{2k_F} = u \exp i \theta_{ph}$ により定義されている (u_{2k_F} は格子のひずみの内、波数 $2k_F$ (k_F はフェルミ波数) を持つ成分である)。 $\hat{u}$ は、電子-格子のウマクラップ過程の結合定数である。 u と θ_{ph} の微小変化に対して状態が安定である為の条件 (つまり $\delta E_3 / \delta u = 0$, $\delta E_3 / \delta \theta_{ph} = 0$) を使って、 θ と ϕ に対する有効ハミルトニアンを導くと、

$$E_3(\theta, \phi) = \int dx \left[A_\rho (\nabla \theta)^2 + A_\sigma (\nabla \phi)^2 - \frac{g^2}{K} \frac{\cos^2 \phi}{1 - \alpha^2 \cos^2 \phi} (1 + \alpha \cos \phi \cos 3\theta) \right] \quad (7)$$

となる ($\alpha = \tilde{g}/K < 1$)。基底状態は、 $\theta(x)$, $\phi(x)$ と場所 x によらず、 θ - ϕ 平面での位置は、図2の黒点により示されている通りである。この系のソリトンも、やはり基底状態を結ぶ曲線により表される。図2の直線FC2は、 $S=0$, $Q=\mp 2e/3$ を持つソリトン、曲線FC1は $S=\pm 1/2$, $Q=\mp e/3$ のソリトン、そして曲線Pは、ホーラロン ($S=\pm 1/2$, $Q=\mp e$) を表している (曲線FC1とPは模式的なものである)。これらはSuとSchriefferにより見出された状態に対応しているが、 $S=0$, $Q=\pm 4/3$ を持つソリトンは、我々のモデルでは見つからなかった。

文献

- 1) W.P. Su, J.R. Schrieffer and A.J. Heeger: Phys. Rev. Lett. **52** (1979) 1698, Phys. Rev. **B22** (1980) 2099.
- 2) W.P. Su and J.R. Schrieffer: Phys. Rev. Lett. **56** (1981) 738.

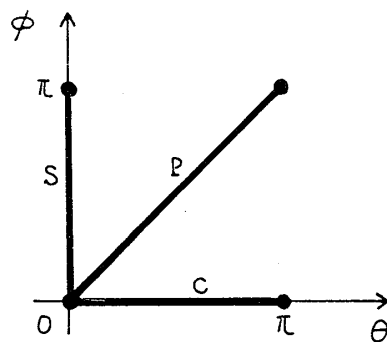


図 1

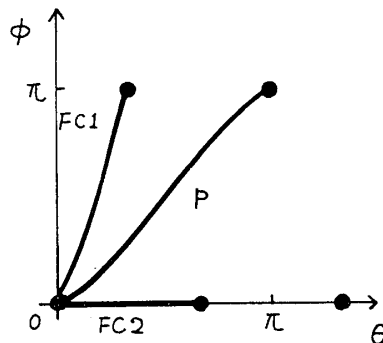


図 2

- 3) M. J. Rice : Phys. Lett. 71A (1979) 152 .
- 4) S. Brazovskii : Zh. Eksp. and Teor. 78 (1980) 677.
- 5) H. Takayama , Y. R. Lin-Liu and K. Maki : Phys. Rev. B21 (1980) 2388.
- 6) B. Horovitz : Phys. Rev. Lett. 46 (1981) 742.
- 7) S. Brazovskii and N. Kirova : preprint .
- 8) T. Nakano and H. Fukuyama : J. Phys. Soc. Jpn. 49 (1980) 1679.
- 9) A. Luther and I. Peschel : Phys. Rev. B9 (1974) 2911.
- 10) A. Luther and V. J. Emery : Phys. Rev. Lett. 33 (1974) 589.
- 11) Y. Suzumura : Prog. Theor. Phys. 61 (1979) 1.
- 12) K. Takano , T. Nakano and H. Fukuyama : J. Phys. Soc. Jpn (in press).