

ソリトン系の統計力学

東北大理 佐々木 一夫

都築 俊夫

1次元ソリトン系[サイン・ゴルドン(SG)系や ϕ^4 系など]の古典統計力学は、Transfer 積分(TI)法や、フォノンとソリトンとを素励起とみなす現象論的方法によって調べることができる。¹⁾ 自由エネルギーや静的相関関数に対する解析的な表式は、低温極限において得られており、2つの方法による結果は一致する。我々の目的は、これらの表式に対する有限温度の補正項を計算し、TI方程式を数値的に解いた結果²⁾と比較することである。

次のハミルトニアンで記述される1次元ソリトン系を考える。

$$H = Aa \sum_n \left[\frac{1}{2} \dot{\phi}_n^2 + \frac{1}{2} \frac{C_0^2}{a^2} (\phi_{n+1} - \phi_n)^2 + \omega_0^2 V(\phi_n) \right] \quad (1)$$

ここで、 ϕ_n は n 番目の格子点における場の量(無次元)、 a は格子定数、 C_0 と ω_0 は系に特徴的な速さと振動数、 A は[エネルギー]・[長さ]⁻¹・[時間]²の次元を持った定数である。以下で扱うSG系と ϕ^4 系のポテンシャル $V(\phi)$ は、

$$V(\phi) = \begin{cases} 1 - \cos \phi & , \text{SG} \\ \frac{1}{8} (\phi^2 - 1)^2 & , \phi^4 \end{cases} \quad (2a)$$

$$(2b)$$

で与えられる。(1)を連続体近似して得られる運動方程式の特解として、ソリトン解があり、その静止エネルギー E_s は、SG系、 ϕ^4 系でそれぞれ $E_s = 8A\omega_0 C_0$, $\frac{2}{3}A\omega_0 C_0$ である。

TI法によると、これらの系の古典統計力学の問題は、連続体近似の極限で、次のシュレーディンガー型方程式の固有値問題に帰着する。

$$\left[-\frac{1}{2m^*} \frac{d^2}{d\phi^2} + V(\phi) \right] \psi_n(\phi) = \varepsilon_n \psi_n(\phi), \quad \sqrt{m^*} = A\omega_0 C_0 / k_B T \quad (3)$$

自由エネルギーは、最低固有値 E_0 から求められるし、静的相関関数は、いくつかの固有値 E_n と固有関数 ψ_n から計算することかできる。

十分低温では ($m^* \gg 1$)、 E_0 を $E_0 = E_0 - t_0$ のように、2つの部分に分けて考える。ここで、 E_0 はポテンシャル $V(\phi)$ の1つの谷の底で振動する振動子の最低固有値であり、 t_0 はトンネル効果によるエネルギーの下かりを表わす (この効果は非常に小さい: $t_0 \ll E_0$)。「現象論」との対応でいうと、 E_0 と t_0 からの自由エネルギーへの寄与は、それぞれフォノンとソリトンの自由エネルギーに相当する。 E_0 を計算するには、調和近似をもとにして、非調和性を摂動として扱えばよい。このときの展開パラメーターは $t \equiv k_B T / E_S (\ll 1)$ になっている。一方、トンネル効果 t_0 の低温展開の第1項は、WKB法とWeber関数を併用して計算されている³⁾が、この方法では高次の項を計算することは困難と思われる。ここでは、「修正WKB法」⁴⁾とGreen関数法とを組み合わせ、有限温度の補正項を計算した結果⁵⁾を紹介する。 t_0 に対する展開パラメーターは $e^{-1/t}$ であり、 $e^{-1/t}$ の最低次の項に対する t のべきの補正項を計算した結果は

$$t_0 = \begin{cases} 16 \sqrt{\frac{2}{\pi}} t^{1/2} e^{-1/t} \left[1 - \frac{7}{8} t - \frac{59}{128} t^2 - \dots \right], & \text{SG} \quad (4a) \\ 2 \sqrt{\frac{2}{3\pi}} t^{1/2} e^{-1/t} \left[1 - \frac{71}{72} t - \frac{6299}{10368} t^2 - \dots \right], & \phi^4 \quad (4b) \end{cases}$$

こうして求めた E_0 と t_0 から自由エネルギーが得られ、したがって比熱も計算できる。図1にSG系の1粒子当りの比熱 C を示す。 ϕ^4 系もほぼ同じ振舞を示す。 C は、フォノン部分 C_0 とソリトン部分 C_t との和であり、 $t = t_m \sim 0.26$ (SG), ~ 0.25 (ϕ^4) に

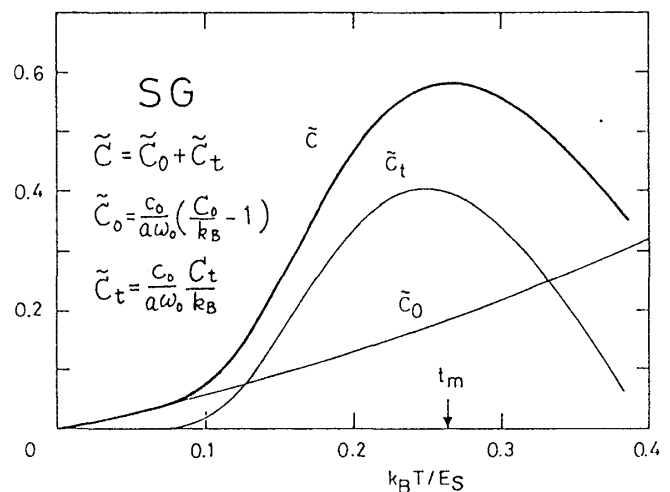


図1 SG系の比熱

ピークがあり、これがソリトンに起因することは図から明らかである。比熱のこのような振舞は、数値計算の結果 $[\tau_m \sim 0.22 (\text{SG}), 0.21 (\phi^4)]^{2)}$ と定性的に一致する。

比熱のピークの物理的意味を考えてみよう。そのために、「現象論」から導かれる、ソリトン密度 n_s とソリトンによる自由エネルギー密度 Λ の寄与 F_t との関係 $n_s = -F_t / k_B T$ を利用する ($F_t = -A \omega_0^2 t_0$)。 n_s を温度の関数としてプロットしてみると、 n_s の増加率が $\tau = \tau_m$ の近くで最大になることがわかる。この事実から、比熱のピークは、熱的に励起された ソリトンによる Schottky 型の異常比熱 であると解釈できる。

ソリトンに支配される相関関数の相関距離 ξ の補正項も直ちに計算できる。

(4) と同じ精度の計算で $\xi^{-1} = -2F_t / k_B T = 2n_s$ となり、これは「現象論」から導かれる関係と同じである。したがって、少なくとも (4) の精度までは、ソリトンの理想気体近似は有効であるといえよう。しかし、「現象論」による有限温度の補正項の計算結果は、現在のところまだ得られてはいないようである。[注] 上記の結果は SG 系と ϕ^4 系に関するものであり、Double-Quadratic 系: $V = \frac{1}{2}(1 - \phi)^2$ では、上記の n_s と F_t の関係は成立せず ($T \rightarrow 0$ では成立)、(4) の精度ですらに理想気体近似が破れていってしまう。]

我々の用いた Green 関数法は、見通しよく、しかも機械的に高次の項を計算でき、従来の方法³⁾よりも計算が簡単であるという点を強調しておきたい。さらに、物理的内容のより豊かな、2成分ソリトン系(複素スカラー場やスピノン系など)の古典統計力学[(3)に対応する式は「2次元シュレーディンガー方程式」になる。]を調べるときにも有効であり、従来の方法より見通しよく計算ができる。

REFERENCES

- 1) J. F. Currie et al, Phys. Rev. B22 (1980), 477.
- 2) T. Schneider and E. Stoll, Phys. Rev. B22 (1980), 5317.
- 3) R. M. DeLeonardis and S. E. Trullinger, Phys. Rev. A20 (1979), 2603.
- 4) Y. Okwamoto, H. Takayama and H. Shiba, J. Phys. Soc. Japan 46 (1979), 1420;
K. Sasaki, to appear in Prog. Theor. Phys. 67 #2 (1982).
- 5) K. Sasaki, to appear in Solid State Commun.