

が分かった。acoustic phonon はソリトンの拡散に大きな影響を持つと考えられており、その解明が今後の課題である。

15. Electron Correlations in Polyacetylene

米 満 賢 治

擬一次元系物質が示す性質は非常に多様である。その性質は、少数の重要なパラメーター即ち電子のバンド巾、電子・格子相互作用、電子間相互作用などの競合や協力によって説明される。一次元系物質では低温でパイエルス転移がおこり、基底状態が縮退していればキンク的な励起（ソリトン）が生じる。ポリアセチレンにおけるソリトンは、初め SSH モデルなどで、電子・格子相互作用のみを考えた一体問題の範囲内で研究されてきた。しかし、現実には電子相関が無視できないことも、ENDOR や光吸収などの実験でわかってきた。赤外吸収やラマン散乱の実験で、ソリトンまわりの振動モードが観測されていて、ソリトンの性質について重要な情報を与えている。これらの振動モードに対する電子相関の効果を Hartree-Fock 近似で調べた。大まかに言って、同サイト間の斥力と隣接サイト間の斥力は振動モードに対しても逆方向に作用する。荷電ソリトンの振動モードとスピンソリトンのそれは電子間相互作用に対して逆方向に変化する。ソリトンなどの結合交替欠陥付近ではよくないと考えられるこの近似を越えるため、さらに2次までの摂動計算も静的解とともに行った。電子相関が弱いところでは HF 近似は定性的によく、ゆらぎを無視したため相関を過大評価していることが示された。

16. Revisit to 2D Ising Models with Frustration and with Arbitrary Boundary Conditions

知 久 哲 彦

有限系の2次元イジングモデルを周期的境界条件のもとで、厳密にとり扱った。すなわち、

- ① 周期的境界条件のもとでの分配関数における境界の効果を正確にとり入れた。
- ② 周期的境界条件を拡張し、その一般化条件のもとで分配関数を厳密に計算し、熱力学的極