

§1 はじめに

パイエルス系のソリトンについて数年前から数多くの研究がなされてきた。最近の面白い仕事のひとつとして北大のグループによる orthorhombic な TaS_3 の電気伝導度の測定がある¹⁾。この物質は 218 K でパイエルス転移を起し、低温の半導体相で commensurate な波数 ($N=4$) をもつ CDW が形成される。一次元軸方向の伝導度は 80 K 以下で新たな活性化エネルギー 250 K で特徴づけられる。そしてこれは位相ソリトンの生成エネルギー E_0 であろうと推測されている。活性化型の電気伝導度は指数関数の前に prefactor があるが、この大きさは北大の実験によると $5.2 \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$ の程度である。この prefactor はソリトンの易動度が判れば求められる。和田・石内²⁾は sine Gordon 系で表わされた CDW のソリトンと phason の非線型相互作用によるソリトンの散散係数を低温で求めた。それから Einstein の関係を仮定して易動度を評価したところ、prefactor は 40 K で $34 me/m \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$ となった。 m_e と m は自由電子とバンド内電子の質量である。実験値との一致はかなりよいと云える。但しこゝで E_0 としては実験値を用いて解析されている。一方 E_0 の値自体 Lee, Rice, Anderson³⁾ の理論を用いて commensurability energy の大きさを見積れば求まって 34 K ぐらいの大きさとなる。実験値との不一致の原因としてバンド質量を自由電子質量にとっていること、chain 内のフーロン相互作用を無視していることなどあげられているが¹⁾、こゝではもう一つの原因の可能性を指摘したい。

§2 CDW の復習

1次元電子系では CDW によって電子密度は

$$\rho = \rho_0 (1 + \alpha \cos(Qx + \phi(x))), \quad Q = 2k_F \quad (1)$$

と空間変化する。この変化によって電子に対して附加的なポテンシャル

$$V(x) = 2\Delta \cos(Qx + \phi(x)) \quad (2)$$

が生ずる。これから話を簡単にするために TaS_3 とは離れるが、格子に incommensurate な CDW を考えることにしよう。(2) のポテンシャル中の電子問題は $\phi=0$ の half-filled-band の場合 Rice - Strässler⁴⁾ によって論じられた。又 ϕ の一次の項までとった電子と phason の散乱は Banik - Conwell⁵⁾ によって調べられた。こゝでは ϕ が静止ソリトンであるときを考える。

CDW にピッチめの機構があるとき、そのハミルトニアンは

$$H_{\text{CDW}} = A \int \frac{dx}{L} \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 + \frac{c_0^2}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 + \omega_0^2 (1 - \cos \phi) \right\} \quad (3)$$

と書ける。⁶⁾ L は格子間隔、 c_0 は phason の速度、 ω_0^2 はピッチめの強さを表わす。(3) から ϕ は sine Gordon 方程式

$$\partial^2 \phi / \partial t^2 - c_0^2 \partial^2 \phi / \partial x^2 + \omega_0^2 \sin \phi = 0 \quad (4)$$

をみたす。この方程式は静止ソリトン解

$$\phi(x) = 4 \tan^{-1} [\exp(\omega_0 x / c_0)] \quad (5)$$

をもち、そのエネルギーは

$$E_0 = 8A c_0 \omega_0 / l \quad (6)$$

2"ある。(5)と(2)へ代入すれば、ソリトンが存在する時のポテンシャルとして

$$V(x) = 2\Delta[(1-2\text{sech}^2 y)\cos Qx + 2\text{sech} y \tanh y \sin Qx], \quad y = \omega_0 x / c_0 \quad (7)$$
 が得られる。

§3 Tight binding 近似

CDWをひき起す格子歪のない unperturbed lattice による周期ポテンシャル U とおく。電子状態は

$$(-\hbar^2/2m) \cdot d^2/dx^2 + U(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad (8)$$

によって与えられる。これを次の tight binding 近似によって解く。

$$\psi(x) = N^{-1/2} \sum_{j=1}^N f_j \phi(x-x_j) \quad (9)$$

ϕ は原子の波動関数として

$$(-\hbar^2/2m) \cdot d^2/dx^2 + u(x) \phi(x) = \epsilon_a \phi(x) \quad (10)$$

ここで u は原子内ポテンシャルとしてある。波動関数の小さな値なりと無視すれば(8)は

$$\epsilon_l (f_{l+1} + f_{l-1}) + (\epsilon_a + v_l - E) f_l = 0 \quad (11)$$

$$\epsilon_l = \int \phi(x+l)(U(x)-u(x))\phi(x) dx$$

$$v_l = \int \phi(x)V(x+x_l)\phi(x) dx \approx \Delta[h_0 \exp(iQx_l - i\varphi(y_l)) + c.c.]$$

$$\exp(-i\varphi(y)) = 1 - 2\text{sech}^2 y - 2i\text{sech} y \tanh y, \quad h_0 = \int dx \phi(x)^2 \exp(iQx)$$

となる。ここで $l\omega_0/c_0 \sim 1/20$ としてソリトンの幅のりより大きいので y による V の変化は無視した。 f_l は

$$f_l = \alpha(y_l) \exp(ikx_l) + \beta(y_l) \exp(i(k-Q)x_l) \quad (12)$$

とおいて(11)に代入し、再びくりかえす α, β を展開し、早く変化する $\exp(ikx_l)$ と $\exp(i(k-Q)x_l)$ の係数とすると二つの零とあう。

$$\begin{aligned} (\epsilon_k - E) \alpha(y) + i\gamma_k d\alpha/dy + \Delta h_0 \exp(-i\varphi(y)) \cdot \beta(y) &= 0, \\ (\epsilon_{k-Q} - E) \beta(y) + i\gamma_{k-Q} d\beta/dy + \Delta h_0^* \exp(i\varphi(y)) \cdot \alpha(y) &= 0, \end{aligned} \quad (13)$$

$$\epsilon_k = \epsilon_a + 2\epsilon_l \cos kl, \quad \gamma_k = (2\epsilon_l l \omega_0 / c_0) \sin kl$$

を得る。

$|y| \rightarrow \infty, \quad \exp(-i\varphi) \rightarrow 1$ として定数解

$$E = E_k = (1/2) [\epsilon_k + \epsilon_{k-Q} \pm \sqrt{(\epsilon_k - \epsilon_{k-Q})^2 + 4\Delta^2/h_0^2}]$$

$$\alpha = \Delta h_0 / \sqrt{(E_k - \epsilon_k)^2 + \Delta^2/h_0^2}, \quad \beta = (E_k - \epsilon_k) \alpha / (\Delta h_0) \quad (14)$$

がある。これは half-filled-band のとき Rice-Strässler⁴⁾ の解になる。

§4 電子状態とエネルギーシフト

(13)から β を消去すると

$$d^2\alpha/dy^2 + i(a - 2\text{sech } y) d\alpha/dy + 2b \text{sech } y \cdot \alpha = 0 \quad (15)$$

$$a = (E_k - \varepsilon_k)/\gamma_k + (E_k - \varepsilon_{k-Q})/\gamma_{k-Q}, \quad b = (E_k - \varepsilon_k)/\gamma_k$$

と得る。 $k = k_F$ ときは $a = 0$ である。 $b \sim \epsilon_0 \Delta / (2\ell \varepsilon_1 \omega_0) \sim 10\Delta / \varepsilon_1 \ll 1$ のとき

$$a \sim 0 \ll b \ll 1 \quad (16)$$

の条件下で解いてみる。 $y \leq 0$ の解として

$$\alpha(y) = \alpha(\mp\infty) [1 - 2b \text{sech } y - 2bi(\tanh y \pm 1)], \quad (17)$$

$$\beta(y) = ((E_k - \varepsilon_k)/\Delta h_Q) \exp(i\varphi(y)) \cdot \alpha(\mp\infty) [1 - 2\text{sech}^2 y - 2i \tanh y \text{sech } y + 2b\{\text{sech } y \pm 2 \tanh y \text{sech } y + i(\pm 1 \mp 2\text{sech}^2 y + \tanh y)\}]$$

となる。

この二つの解を $y=0$ において条件(13)と導くときの議論から求めらる。 ちまた $y=0$ の方程式は(11)から二つの式(13)と表した。 従って $y=0$ の条件は二つの成分に分ける前の方程式に $\delta(y)$ という項が含まれることより、 $y=0$ で $\gamma_k \alpha + \gamma_{k-Q} \beta$ が連続という条件で解くことができる。 これから

$$\alpha(\infty)/\alpha(-\infty) = \exp(i\psi_k) \quad (18)$$

と表す。

$$\psi_k = 4((E_k - \varepsilon_k)/\gamma_k) \cdot (E_k - \varepsilon_k + \Delta h_Q)/(E_k - \varepsilon_k - \Delta h_Q) \quad (19)$$

ここで k は $|k| < k_F$ のとき k の符号と逆符号の値をとる。 波動関数は固相境界条件

$$f_{-N/2} = f_{N/2} \quad (20)$$

を課す。

$$\alpha(-\infty) \exp(-ikNL/2) = \alpha(\infty) \exp(ikNL/2) \quad (21)$$

ここで(18)から

$$\exp(i(kL + \psi_k)) = 1, \quad L = NL, \quad k = (1/L)(2n\pi - \psi_k); \quad n \text{ 整数} \quad (22)$$

と波数が $-\psi_k/L$ だけシフトする。 ことによる電子系のエネルギーシフトは

$$\begin{aligned} \Delta E &= 2 \sum_{|k| < k_F} (E_k(\text{シフトしたもの}) - E_k(\text{シフトしないもの})) \\ &= 2 \sum_{|k| < k_F} (-\psi_k/L) \partial E_k / \partial k = -(1/\pi) \int_{-k_F}^{k_F} dk \psi_k \partial E_k / \partial k \end{aligned} \quad (23)$$

これは正の量である。 この電子系のエネルギーシフトはソリトンの自己エネルギーとして(6)に加えられるべき量である。

§5 まとめ

ソリトンのエネルギーの実測値と計算値の一致を示した。 ソリトンによる電子波数のずれの可能性を指摘した。 したがって(16)の近似など問題は多く残っている。

- 1)伊土政幸: 日本物理学会誌 36 (1981) 826.
- 2) Y. Wada and H. Ishiuchi: J. Phys. Soc. Jpn. 稿中
- 3) P.A. Lee, T.M. Rice, and P.W. Anderson: Phys. Rev. Letters 31 (1973) 462.
- 4) M.J. Rice and S. Strässler: Solid State Comm.: 13 (1973) 125.
- 5) N.C. Banik and E.M. Conwell: Phys. Rev. B23 (1981) 5638.
- 6) M.J. Rice, A.R. Bishop, J.A. Krumhansl, and S.E. Trullinger: Phys. Rev. Letters 36 (1976) 432.