

ポリアセチレン・キンクの運動

東大・理 小形正男, 寺井 章, 小野嘉之, 和田 靖

I はじめに

最近, 固体物理の分野においてもソリトンの静的及び動的な性質が興味をひいている。トランス型ポリアセチレンに対して, キンク (ソリトン) という概念は, Su, Schrieffer と Heeger¹⁾ によって導入され, それ以来, 理論及び実験において, 様々な研究がなされてきた。特に最近, キンクと考えられるスピンの拡散係数が実験で求められるようになってきた²⁾。

一方, ϕ^4 系やサイン・ゴールドン系では, キンク・フォノン相互作用という観点から, キンクの拡散係数や摩擦係数が計算されている。そこで, 我々は ϕ^4 系でのキンクの運動と比較しながら, ポリアセチレン・キンクの運動 (特に, 低温での拡散係数の振る舞い) を調べることにする。両者がどの程度類似しているか, 又どこが異なっているかについても興味がある。

II ポリアセチレン

トランス型ポリアセチレンのモデルとして, Su, Schrieffer と Heeger は以下のハミルトニアンを提唱した¹⁾。

$$H = \sum_n \frac{P_n^2}{2M} + \frac{K}{2} \sum_n (y_{n+1} - y_n)^2 - \sum_{n,s} t_{n+1,n} (C_{n+1,s}^+ C_{n,s} + C_{n,s}^+ C_{n+1,s}),$$

$$t_{n+1,n} = t_0 - \alpha (y_{n+1} - y_n), \quad (1)$$

ここで, y_n はサイト n の (CH) ユニットの平衡位置 (格子定数 a の等間隔配置) からの変位, p_n はその運動量を表わす。第 3 項は π 電子 (1 炭素原子当たり 1 コ) のホッピング項で, その遷移積分 $t_{n+1,n}$ が格子変位に応じて変化している。もし $y_n = 0$ ならば電子は, $\varepsilon(k) = 2t_0 \cos(ka)$ のバンドを形成し, 丁度バンドの半分まで満たされている。しかし電子格子相互作用が存在するために, 格子が $y_n = (-1)^n u_0$ の様に変形し電子のフェルミ準位にギャップを生じた方がエネルギーが下がる (Peierls 不安定性)。この基底状態は, 図 1 に示される様に 2 通り考えられる。

我々は (1) の連続体近似である TLM モデル³⁾

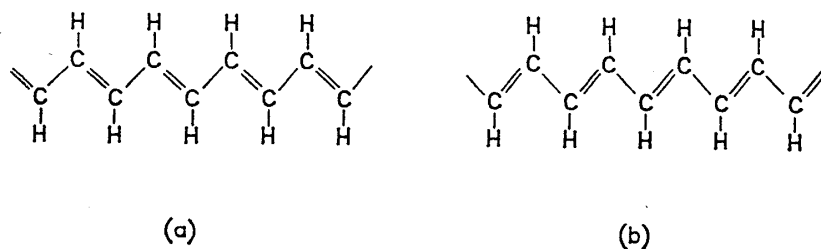


図1. トランス型ポリアセチレンの2つの縮退した基底状態。

$$H = \int dx \left(\frac{g^2}{2} P(x, t)^2 + \frac{\omega_Q^2}{2g^2} \Delta(x, t)^2 \right) + \sum_s \int dx \psi_s^\dagger(x, t) \left(-i v_F \sigma_3 \frac{\partial}{\partial x} + \sigma_1 \Delta(x, t) \right) \psi_s(x, t), \quad (2)$$

を用いることにする。ここで $\Delta(x, t)$ は $(-1)^n y_n$ の連続極限、 ψ は π 電子を表わす2成分場である。TLM モデルには2つの基底状態 $\Delta = \pm \Delta_0$ を結ぶキंक解、 $\Delta_k(x) = \Delta_0 \tanh(x/\xi)$ が存在することが示される。

Ⅲ ポリアセチレンにおけるキंक・フォノン相互作用

以下、断熱近似で考えることにする。つまり、 $\Delta(x, t)$ が時間に依存して変化しても電子の占める状態は変わらないと仮定する。この近似のもとでキंकまわりの線形モードを数値的に求めることができ、3つの局在モードとフォノンモードが得られた⁴⁾。局在モードのうち1つは、固有振動数 $\omega = 0$ の Goldstone モードに対応している。ソリトンの存在はフォノンに対してポテンシャルによる散乱と同じような効果を与えるが、この散乱が無反射であるかどうかについても調べられた。一般に1次元の散乱問題の時、無反射がそうでないかはフォノンの固有関数を偶関数と奇関数に分けて、それぞれのフェイズシフトを調べればわかる。(両者が一致すれば無反射) 実際の数値計算を図2に示すが、 $k < 1/\xi$ の領域で無反射ではないことがわかった。

この結果を用いて、次にキंक・フォノン相互作用を調べることにする。キंकの運動を調べるために、以下の変数変換を行なう⁵⁾。

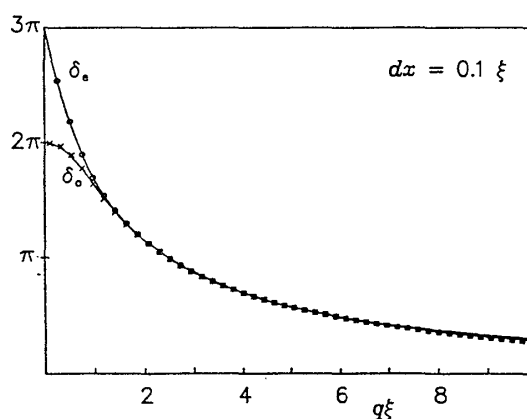


図2. フォノンモードを偶関数と奇関数に分けたときのそれぞれのフェイズシフト (δ_e と δ_o)。 q はフォノン波数。(Ono et. al.⁴⁾ より転載)

$$A(x, t) = A_k(x - Q_0(t)) + \chi(x - Q_0(t), t)$$

$$(\text{拘束条件}) \quad \int \chi(x, t) A'_k(x) dx = 0, \quad (3)$$

ここで $Q_0(t)$ がキングの座標を表わす。数値的に求められた線形モード $g_i(x)$ を用いて場 $\chi(x, t)$ は

$$\chi(x, t) = \sum_{i \neq 0} Q_i(t) g_i(x), \quad (4)$$

と展開できる。($\omega = 0$ の Goldstone モードは拘束条件によって除かれている。) 新しい変数 Q_0, Q_i と, それの正準共役な運動量 P_0, P_i を用いてハミルトニアンは

$$H = \frac{(P_0 + \int \pi \chi' dx)^2}{2M(1 + \zeta/g^2 M)^2} + \frac{g^2}{2} \sum_{i \neq 0} P_i^* P_i + \frac{1}{2g^2} \sum_{i \neq 0} \omega_i^2 Q_i^* Q_i + H_{\text{int}}(Q),$$

$$\text{但し} \quad M = \int (A'_k)^2 dx / g^2,$$

$$\zeta(t) = \int \chi'(x, t) A'_k(x) dx,$$

$$\pi(x, t) = \sum_{i \neq 0} P_i(t) g_i(x), \quad (5)$$

とかけ, キングの座標 Q_0, P_0 に対する運動方程式は

$$\dot{Q}_0 = \frac{(P_0 + \int \pi \chi' dx)}{M(1 + \zeta/g^2 M)^2},$$

$$\dot{P}_0 = 0, \quad (6)$$

となる。 ϕ^4 系の場合と比べると, ハミルトニアンと運動方程式は形式的に全く同じ形で表わされることがわかった。

Ⅳ キングのダイナミクス

まず入射フォノン波束の振幅についての摂動で, キング・フォノン衝突を調べた⁶⁾。2次の摂動の計算によって, 衝突の結果キングの位置のシフトと共にキング・フォノン間の運動量の交換があることがわかった。このことから, 熱平衡系でのキングの拡散運動は2つのメカニズムによって引き起こされることが期待される。1つは, 熱励起フォノンが次々とキングに衝突し, その度にキングのシフトが起こるために生じる, ランダム・ウォーク的なブラウン運動である。拡散係数は T^2 に比例すると考えられる。もう1つは, キングが熱励起フォノンとの運動量交換を通して摩擦を感じるという通常のブラウン運動のメカニズムである。(ここでキングはブラ

ウン粒子に、フォノンが水分子になぞらえられている。)

以上2つのメカニズムの関係は、森の方法⁷⁾による摩擦抵抗関数のFourier-Laplace変換 $\Gamma(\omega)$ の計算と、キンクに対する揺動散逸定理によって明らかにすることができた⁵⁾。まず $\Gamma(\omega)$ を低温で評価すると、 $\omega=0$ の成分、 $\Gamma(0)$ 、は後者のメカニズムからの寄与だけから決まり、温度 T に比例することがわかる。拡散係数は揺動散逸定理

$$D(\omega) \equiv \int_0^\infty \langle \dot{Q}_0(t) \dot{Q}_0 \rangle e^{-i\omega t} dt$$

$$= \frac{\langle \dot{Q}_0 \dot{Q}_0 \rangle}{i\omega + \Gamma(\omega)}, \quad (7)$$

で与えられるので、 $\omega \rightarrow 0$ の極限ではEinsteinの関係式 $D = k_B T / M \Gamma(0)$ が成り立ち、 D は低温極限で温度によらなくなる。この場合の拡散係数は後者のメカニズムによるものである。一方、前者のメカニズムからの寄与は $\Gamma(\omega)$ の $\omega \neq 0$ の成分に現われる。従って、 $\omega \neq 0$ かつ $\Gamma(0) \ll \Gamma(\omega \neq 0)$ の場合に前者のメカニズムによるキンクの拡散運動が支配的になると考えられる。実際この場合、(7)式を用いて $D(\omega)$ の実数部分が T^2 に比例することを示すことができる。

V 今後の課題

今まではフォノンの熱励起を古典的に扱って来たが、量子効果を考慮して、拡散係数を調べる必要がある。又、我々は連続体近似を行なったが、離散モデルの効果がどの程度あるかも興味をもたれる。実験との比較も今後の課題である。

参考文献

- 1) W. P. Su, J. R. Schrieffer and J. A. Heeger, Phys. Rev. **B22** (1980) 2099.
- 2) M. Nechtschein, F. Devreux, F. Genoud, M. Guglielmi and K. Holczer, Phys. Rev. **B27** (1983) 61.
溝口憲治, 久米 潔, 白川英樹: 日本物理学会講演 1985 秋
- 3) H. Takayama, Y. R. Lin-Liu and K. Maki, Phys. Rev. **B21** (1980) 2388.
- 4) H. Ito, A. Terai, Y. Ono and Y. Wada, J. Phys. Soc. Jpn. **53** (1984) 3520.
Y. Ono, A. Terai and Y. Wada, Submitted to J. Phys. Soc. Jpn.
- 5) M. Ogata and Y. Wada, J. Phys. Soc. Jpn. **54** (1985) 3425.
M. Ogata, A. Terai and Y. Wada, submitted to J. Phys. Soc. Jpn.

- 6) A. Terai, M. Ogata and Y. Wada, submitted to J. Phys. Soc. Jpn.
 7) H. Mori, Prog. Theor. Phys. **33** (1965) 423.

散逸のあるソリトン系の統計力学

北大・工 飛田和男, 中谷正吾

カールスルー工大・物理 U. Eckern

(1) はじめに

自然界における様々な非線型現象の理解にソリトン描像が重要な役割を果たしている事は周知の事実である。しかし、現実の系をソリトン解をもつ非線型方程式に帰着させる時様々な自由度を粗視化する過程を経なければならない。これらの自由度は、ソリトン系のふるまいに熱浴として働き、散逸をひきおこす。量子系の場合は殊に量子ゆらぎも散逸の影響を受けるため、古典系では見られない興味深い現象が期待される。ここではその中で特に量子サインゴルドン系を例に、ソリトンやフォノンの励起エネルギーのくりこみ、及び、外場中でのトンネリングの2つの純粋に量子的な現象について熱浴の影響を調べることにする。

(2) 量子系における散逸

1次元量子サイゴン・ゴルドン系は次のラグランジアンで記述される。

$$\mathcal{L}(t) = \frac{1}{2} \int_{-L/2}^{L/2} dx \left[(\partial_t \phi)^2 - (\partial_x \phi)^2 + \frac{2m_b^2}{g^2} \cos g\phi \right] \quad (1)$$

ここで ϕ はボゾン場, g は結合定数, m_b は裸のフォノン質量, L は系の長さである。散逸を考慮するとこの系の分配関数は、虚時間での経路積分¹⁾により、

$$Z = \int_{\phi(x,0)=\phi(x,\beta)} \int \mathcal{D}\phi(x,\tau) \exp(-S[\phi(x,\tau)]) \quad (2a)$$

$$S = S_0 + S_d \quad (2b)$$

$$S_0 = - \int_0^\beta d\tau \mathcal{L}(-i\tau) \quad (2c)$$

$$S_d = \frac{\eta}{4\pi} \int_{-L/2}^{L/2} dx \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \frac{\pi^2 (\phi(x,\tau) - \phi(x,\tau'))^2}{\beta^2 \sin^2(\pi(\tau - \tau')/\beta)} \quad (2d)$$