

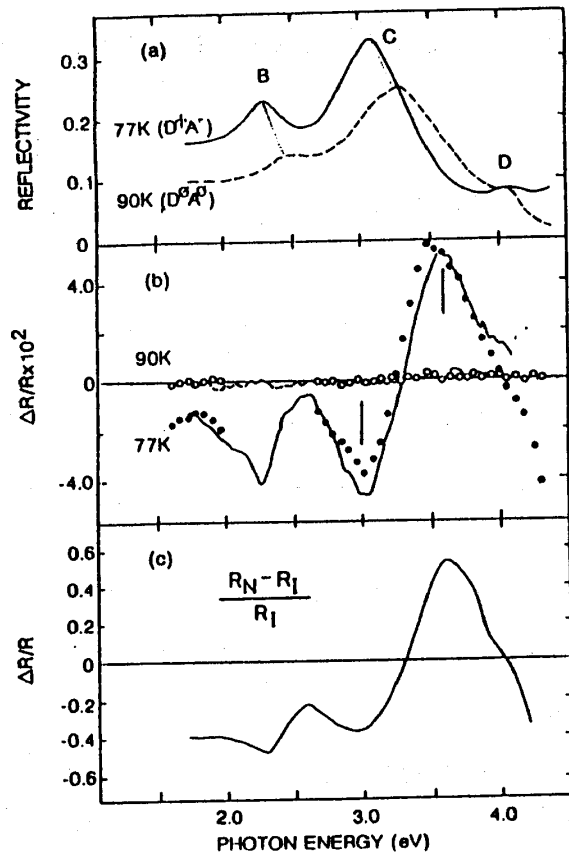


図1 (a) TTF-CAの反射スペクトル：実線 I 相破線 N 相 (b) 光誘起反射スペクトル：実・破線 CW 励起 黒・白丸パルス励起 (c) N 相と I 相の差スペクトル

ポリアセチレンのソリトン（合成と実験）

筑波大学・物質工学系 白川英樹

ポリアセチレンは $-(CH=CH)-$ を単位とする最も単純な直鎖状有機高分子化合物で、 π 電子を一次元に長く並べた系と見ることができる。二重結合の立体配置により、シス型とトランス型の二つの異性体が存在する。合成時にシス型に富んだ試料ができるが、加熱や熱やドーピングなどにより熱力学的に安定なトランス型に異性化する。トランス型には二つの縮重した構造が可能のため、その接点では一個の π 電子が安定に孤立でき、炭素-炭素結合を歪ませながら非常に低いエネルギーで一次元運動をする。この不対 π 電子が中性ソリトン (domain wall, phase kink などとも呼ばれる) で、電荷をもたないため伝導には寄与しないが、アクセプターやドナーとの電荷移動 (ドーピング) により、それぞれ、正や負に荷電したスピンのゼロの荷電担体となる。ポリアセチレンの光学的、電磁氣的性質とドーピングにともなうこれらの性質の変化の多くはソリトンの存在で説明できるが、すべてを統一的に説明できるわけではない。

ポリアセチレンは不溶・不融のため再結晶化が不可能で、合成時の形態や分子構造の欠陥などが諸性質の測定結果に大きく影響していると考えられる。物性研究に用いられる試料は主としてアセチレンの重合反応により合成されているが、合成方法の改良により、今日ではヨウ素でドーブした一軸配向試料の分子軸方向の電気伝導度の値として $10^5 \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$ 以上の値が報告されている。前述

の理由のため単結晶の育成は不可能なので、次善の試料として良好な一軸配向試料の合成方法を研究している。

ポリアセチレンの金属転移

東大・理 和 田 靖

針 谷 喜久雄

ソリトンの励起をもつ古典的物質にポリアセチレンがある。それを不純物で数%ドーピングすると金属転移を示す。その機構についてはまだ定説がない。最近、金属に匹敵する高伝導度の試料も作られるようになって、その説明は重要になった。

試料内の不純物配位には規則性があるとの指摘もあるが、我々はこれがランダムだと仮定して議論する。不純物としてそれが存在するサイトでの電子順位が乱されるサイト型と、その附近での電子移動を乱すボンド型をとり上げるが、金属転移に関係するのは主にサイト型である。

はじめにポリアセチレンを連続体とするTLM模型に不純物効果を加えたものをCPAを用いて解いた。電子数は準位数の半分で、格子の共役性を表すオーダーパラメタは一定とする。不純物濃度とそのポテンシャル強度を変数とする相図を求めると金属相が得られたが、濃度強度共に大きい領域にあった。

CPAの有効さは小さな体系を数値的に解いて比較することで確かめられた。100サイトの系に100種類の不純物分布をとって平均した。数値的方法は電子数が不純物濃度によって決まる場合にも適用できる。実験試料はこの種のもので、不純物がなければオーダーパラメタはソリトン格子になる。小さな系での結果からエネルギーギャップを求める方法は自明ではないが、それを最も自然に定義すると実験に対応する濃度と強度の領域でギャップが零になることが示された。これが金属転移であるが、その大きな特徴はオーダーパラメタが零にならず残っていることである。

電場下の荷電ソリトン

東邦大・理 小 野 嘉 之

ポリアセチレン中のソリトンには2種類の荷電ソリトンと1種類の中性ソリトンが知られている。荷電ソリトンは電場によって加速できることを利用して、Domain Wallとしてのソリトンのダイナミクスを数値計算によって調べた。

ポリアセチレンのソリトンは電子格子相互作用の結果生じる格子歪の二量体化構造のキンクとしての特性と、それが電子系の自由度と絡んで複雑な内部構造を持つという特性とがあり、ダイナミクスを調べる際も、動いているソリトンにおいて、この2つの自由度がどのように絡み合っている