

氏 名	山 本 光 やま もと ひかる
学位の種類	理 学 博 士
学位記番号	理 博 第 591 号
学位授与の日付	昭 和 54 年 9 月 25 日
学位授与の要件	学 位 規 則 第 5 条 第 1 項 該 当
研究科・専攻	理 学 研 究 科 物 理 学 第 一 専 攻
学位論文題目	低次元系での整合・不整合相転移に関する理論的研究

論文調査委員 (主 査) 教 授 恒 藤 敏 彦 教 授 富 田 和 久 教 授 松 原 武 生

論 文 内 容 の 要 旨

最近, いろいろな分野で整合・不整合相転移が見出されている。たとえば TTF-TCNQ 等の準 1 次元有機導体や TaSe₃ のような層状化合物ではある温度以下で電荷密度波が生じた状態になるが, その波長は結晶格子の周期と整数比の関係にある場合とそうでない場合が可能である。前者を整合相, 後者を不整合相とよぶ。この整合・不整合相間の相転移は, Cr におけるスピン密度波, あるいは結晶表面に吸着された希ガスの単原子層においてもみられる。

この種の相転移を理論的に扱うために, 通常 Ginzburg-Landau の現象論が用いられるが, もっとも簡単な例では, この理論の基本的な量である自由エネルギーが

$$E = \int dx \left[\left(\frac{d\phi}{dx} - \mu \right)^2 - W \cos \phi \right]$$

という形を持つとされる。ここで $\phi(x)$ は, たとえば電荷密度波の位相であり, 結晶格子と同じ周期の場合には, 2π の整数倍に等しい。 μ は電子数に関するパラメタで, ϕ の空間変化を誘起する。この不整合パラメタ μ が充分大きくなると, E を極小にするのは, 区壁 (ソリトン) が規則的に並んだ不整合状態である。

申請者が第 1 部でとりあげたのは, 格子波と相互作用する 1 次元電子系について, 上のような自由エネルギーを微視的理論から導出する課題である。そのためにはある 1 つの波長の格子波および密度波の凝縮を考えるのでは不十分で, すべての高調波の凝縮を同時に取入れなければならないが, 申請者は温度グリーン関数の方法を用いてこれを行うことに成功した。具体的には電子がバンドの $1/3$ および $1/2$ までつまった系について計算を行い, 上の形の自由エネルギーを求め, 整合・不整合相転移の相図等をえている。

第 1 部の理論は, 分子場近似の枠内の議論であるが, 低次元系ではゆらぎが本質的に重要であり, 分子場近似をこえたゆらぎの統計力学がこの問題でも要求される。申請者は第 2 部でこの問題と取組んでいる。上述の形の自由エネルギーで記述される系のゆらぎの問題は, $\mu = 0$ にあたる場合, ある特定温度で厳密に解けることが数学的に同等な他の問題に関して知られていたが, 申請者は $\mu \neq 0$ のときにもこの解を一

般化できることに着目し、ゆらぎを考えたとき2次元系の整合・不整合相転移がどのような影響をうけるかについて理論的分析を行っている。

参考論文5篇も主として低次元系での整合・不整合相転移に関するものである。

論文審査の結果の要旨

整合・不整合相転移は、準1次元の有機導体、層状化合物などにおける電荷密度波、Cr等におけるスピン密度波、結晶表面上の吸着希ガス原子の周期的配列など広範囲の現象にみられるものであって、現在活発に研究されている。この問題に関する理論的分析の多くは、いわゆるGinzburg-Landauの現象論によっており、自由エネルギーとして、その極小条件が、ソリトンあるいは区壁の解をもつSine-Gordon型の方程式になるような形のものをを用いる。吸着希ガス単原子層の場合ではこれは自然な出発点であるが、準1次元導体における電荷密度波などの問題では、このような現象論的自由エネルギーは当然、微視的理論から導出されなければならない。

申請者は第1部で、格子波と相互作用する1次元電子系についてこの課題を取上げ、格子波および電荷密度波の凝縮エネルギーを分子場近似で求めている。そのさいすべての高調波の凝縮の効果を同時に取入れることが要求されるが、申請者はこの困難な問題をたくみに解決し、上述のような非線型性をもつ自由エネルギーを導出することに始めて成功したのである。自由エネルギーの具体的な形、したがって整合・不整合相転移の現われ方は、電子がバンドの $1/3$ までつまっている場合と、 $1/2$ までの場合とでは顕著な相違があるが、申請者の理論ではそれが微視的理論から求められ、詳細に分析されている。

第1部で展開された理論は、分子場近似の枠内のものである。ところで低次元系ではゆらぎの効果が定性的にも無視できないことがよく知られており、これが整合・不整合相転移の性格にどのような効果を与えるのかは、きわめて興味深い問題である。

上述のSine-Gordon型の場合で記述される2次元系のゆらぎの統計力学は、一般的にはきわめて困難な問題であるが、数学的にはこれと同等な問題がある特定の温度では厳密に解けることが知られていた。申請者はこの事情を利用する着想をえて、不整合パラメタが有限の場合にもこの厳密解を拡張し、ある特定温度においてではあるがゆらぎの効果を求めることに見事に成功した。申請論文の第2部にまとめられたこの研究は、整合・不整合相転移におけるもっとも興味ある問題の解決の緒をつけたものとして注目された。

参考論文5編も含めて申請者のこの一連の研究は、低次元系における整合・不整合相転移の理論に対する重要な貢献を行ったものと考えられ、また申請者のこの分野における学識と研究能力を十分に示しているものといえる。

よって、本論文は理学博士の学位論文として価値あるものと認める。