

一次元電荷密度波のピン止の機構と非線形電気伝導度

北大・理 松川 宏, 高山 一

一次元電子-格子系においては, 波数 $Q = 2k_F$ (k_F : フェルミ波数) の格子変位と, 同じ波数の電荷密度波 (CDW) とが共存した, Peierls 状態が生じる。このときフェルミ面にエネルギーギャップが開き, 他にフェルミ面と重なるバンドが無い場合, 系は絶縁体となる。フェルミ波数 k_F は物質のバンド構造で決まり, 逆格子ベクトルの波数 $2\pi/a$ (a は一次元方向の格子間隔) の有理数倍である場合 (整合 CDW) とそうでない場合 (不整合 CDW) とがある。ここでは後者の不整合 CDW を考える。この場合, 系のエネルギーは結晶の格子点と CDW の相対的位置によらない。言い換えれば, この CDW は並進対称性をもち, エネルギーの供給なしに一次元方向に運動できる。実際, Fröhlich は BCS 理論の出る前に, この機構—1 電子描像では絶縁体だが, 巨視的に凝縮した CDW が運動する—が超伝導現象を説明すると考えた。しかし, 現実の結晶中に存在する不純物ポテンシャルにより, この超伝導は実現されない。即ち, CDW は不純物ポテンシャルにより "ピン止め" を受け, このピン止めに打ち勝つためのあるしきい値 E_T 以上の電場のもとでのみ, CDW の並進運動が可能となる。超伝導でなかったが, 電荷を伴う, 巨視的に凝縮した相の運動として興味深い問題で, 実際, $NbSe_3$, TaS_3 他の擬一次元物質で, 種々の非線形, (準) 非平衡現象が観測されている。以下に, 不純物ポテンシャルのある系での不整合 CDW に関して我々の行った計算機実験の結果を報告する。¹⁾

Peierls 状態での電荷密度 $\rho(x, t)$ は

$$\rho(x, t) = \bar{\rho} + \rho_c \cos(Qx + \phi(x, t)) \quad (1)$$

で与えられる。 $\bar{\rho}$, ρ_c はそれぞれ平均密度, 及び CDW の振幅であり, 位相 $\phi(x, t)$ が運動を含めた CDW の状態の詳細を記述する。ここで問題にするのは CDW の巨視的な凝縮相の振舞いであるから, $\phi(x, t)$ は時間的・空間的にゆっくり変化するものとして, これを古典的な物理量として取扱う。 $\phi(x, t)$, 即ち CDW の変形及び運動に伴うエネルギーは, 適当なスケール変換をすれば²⁾

$$N \propto \int_0^L dx \left[\frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{u^2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 + \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 \right\} + n_i \varepsilon_i \sum_j^{\text{imp}} \cos(Qx_j + \phi(x_j)) \delta(x - x_j) - n_i^2 \varepsilon_f \phi(x) \right] \quad (2)$$

で与えられる。 u , n_i はそれぞれ CDW の特性速度と不純物濃度。オ2項は位置 x_j の不純物によるポテンシャルエネルギー, オ3項は電場によるエネルギーを表わす (ε_i , ε_f は規格化された不純物ポテンシャル, 及び電場の大きさ)。(2)式から導かれる $\phi(x, t)$ に対する運動方程式は

$$\Gamma^2 \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + n_i \varepsilon_i \sum_j^{\text{imp}} \sin(Qx_j + \phi(x_j)) \delta(x - x_j) + n_i^2 \varepsilon_f \quad (3)$$

但し, ニンで現象論的な抵抗カ $-\delta(\partial \phi / \partial t)$ を導入し, ϕ と $t \rightarrow \tau$ の変換を行った (Γ

三と/4)。(2),(3)式で与えられる問題の特徴は、不純物ポテンシャルの位置がランダムであり、かつ、ポテンシャルが(非線形)周期関数であること、及び注目する現象も、しきい値電場を伴う非線形伝導現象であること、言わば、ランダム系における非線形問題である。このことから直ちに、そのエネルギーがほぼ等しい、多数の準安定状態と非線形所起(ソリトン)の存在³⁾、及びそれらに伴う特徴的な運動等が予想される。我々は、連続媒質について与えられた(2),(3)式を離散型の問題に書き直し、パラメーター $\varepsilon_i, \varepsilon_f, n_i, \Gamma$ 等を、ほぼ $NbSe_3$ に対応すると考える値に設定し、先ずモンテカルロ法で、しきい値電場 ε_f^t 以下の電場のもとでの基底状態を探し、その状態から出発して ε_f を ε_f^t 以上にあげたときの $\phi(x, t)$ 、即ちCDWの運動を、(3)式を分子動力学法で解くことにより、解明した。得られた結果を以下に列記する。

- i) 予想されたように、 $\varepsilon_f < \varepsilon_f^t$ の電場のもとで、複数の準安定状態が得られた(モンテカルロ法における初期条件や、低エネルギー状態の探し方の違いによって)。特に $\varepsilon_f < \varepsilon_f^t$ の範囲で電場を上げ下げさせると、状態は必ずしも元の配置に戻らないことが多い。即ち、空間の一部の領域の $\phi(x)$ がもとの値から 2π —(2),(3)式の不純物ポテンシャルは 2π の周期関数—だけずれたままになった状態が得られ、その境界は 2π —ソリトン(反ソリトン)になっている。このような準安定状態の存在が、この種の系の電流-電圧特性で観測されている履歴現象、長時間緩和を伴う現象の原因と考えられる。
- ii) しきい値電場 ε_f^t を伴う非線形電気伝導度、及びこれに伴う単一の基本周波数をもつ "narrow band noise" が得られた。特に前者についてはサンプルの大きさ、不純物の分布の仕方に関らない結果が得られている。詳細までは実験曲線と一致するには至っていないが、'不純物によるCDWのピン止め、及び ε_f^t 以上でCDWの巨視的な並進運動の出現'の描像が確証されたと考えている。
- iii) $\varepsilon_f > \varepsilon_f^t$ での $\phi(x, t)$ の時間変化を具体的に調べることにより、低電場側($1 < \varepsilon_f / \varepsilon_f^t \leq 2$)ではi)に記した $\phi(x)$ の領域構造が、動的に生じていること、即ち、 $\phi(x, t)$ が一様に増加するのではなく、局所的に $\phi(x)$ が 2π 大きい領域の出現、その生長(ソリトンと反ソリトンの運動)の過程の繰り返しで全体的な $\phi(x, t)$ の増大—CDWの並進—が起っていること、を見出した。これに伴って、この場合の電流のスペクトルには高次調和項が顕著になる。
- iv) ピン止めがはずされてCDWが運動を始めた場合、定常状態の $\phi(x, t)$ のプロファイルに達するまでに、有限時間を要する。これはCDWの慣性によるものではなく、即ち電場に対応したプロファイルまでに $\phi(x, t)$ が変化するに要する時間で、具体的には "narrow band noise" の振巾の緩和過程として観測される。

- 1) H. Matsukawa and H. Takayama, to appear in Solid State Commun.
- 2) H. Fukuyama and P.A. Lee, Phys. Rev. B17, 535 (1978).
- 3) P.B. Littlewood and T.M. Rice, Phys. Rev. Lett. 48, 44 (1982).