

【 6 】

氏 名 (本 籍)	堺 英 二 郎 (長崎県)
学 位 の 種 類	理 学 博 士
学 位 記 番 号	博 甲 第 6 号
学 位 授 与 年 月 日	昭和53年 3 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 の 名 称	物理学研究科 物理学専攻
学 位 論 文 題 目	Theory on Effects of Eluctuations in One-Dimensional Incommensurate Peierls-Flöhlich System, (一次元incommensurate パイエルス-フレーリッヒ系におけるゆらぎの影響の理論)

論 文 の 概 要

1. 序 .

一次元電子・フォノン系は、波数 $2k_F$ (k_F はフェルミ波数) 付近でのコーン異常性が巨大化し、そのためある温度 T_c でフォノンが完全にソフト化して構造相転移 (パイエルス転移) を起こすことが知られている。 T_c 以下では格子変形に伴って、フェルミ準位近傍にバンド・ギャップが生じ、同時に電荷密度波 (CDW) も誘起される。CDWの位相のモード (phason) は、長波長極限で波数 q に比例する振動数を持っている。そのために phason による電気伝導度 σ は

$$\sigma = \frac{ne^2}{i\omega m}$$

で与えられ、振動数 $\omega = 0$ のところにデルタ関数型の発散が現われる。即ち phason により静的電気伝導度の発散 (フレーリッヒ超伝導) が出現する。これはCDWの並進不変性の結果であり、CDWが形成されることによって破られた並進不変性を回復するゴールドストーン・モードである phason が超伝導に寄与している。従って並進不変性をこわす機構が何か存在すると、この超伝導は失われる。これがBCS超伝導と本質的に異なる点である。並進不変性をこわす原因のうちで特に重要なものとして、①格子とCDWの commensurability と②不純物によるピン止め、がある。格子の周期とCDWの周期が有理比をなす (commensurate) 場合には、イオンのある格子点で電子密度が大きくなるようにCDWの位置が決められ、CDWを動かすのに有限なエネルギーが必要となるので、むしろ絶縁体となる。また結晶中に不純物が存在すると、不純物によるCDWのピン止めがおこり、超伝導が失われる。

一方実験的には、一次元 incommensurate パイエルス-フレーリッヒ系と考えられている T T

F - T C N Qは構造相転移を数回起こすことが知られており、しかも電気伝導度が最初の転移点 54 Kよりやや高温側の 60 K付近に鋭いピークを持つ。そして低温側では急速に電気伝導度は減少して、絶縁体的になってしまう。この電気伝導度の鋭いピークがどういうメカニズムで生じているのかは、まだ十分には解明されていない。そこでこのピークを、波数 $2k_F$ 近傍のゆらぎの効果として説明できるかどうか興味あるところである。

II. パリエルズ転移に対するゆらぎの効果

まず Chsp. 3 でパリエルズ転移に対するゆらぎの効果をも、renormalized RPA (RRPA) の範囲内で調べる。その結果、 T_c より上での short range order のために、電子状態に低温相と似た性質が現われ、フェルミ準位近傍に擬ギャップが生じていることが示される。また厳密な一次元系では、ソフト・フォノンの振動数が、温度の低下とともに、初め熱的ゆらぎがきいて、 T に比例して減少し、より低温側では、零点ゆらぎがきいて、 $T^{-\frac{1}{2}}$ に比例して減少することも示される。一方擬一次元系では、ソフト・フォノンの振動数は、初めは $(T - T_0)^{\frac{1}{2}}$ に比例し (T_0 は平均場近似の転移温度)、そのあと T に比例するようになる。これは、十分高い温度領域では、系の次元性に関係なく、平均場近似がいいことを示し、もう少し温度が下がってくると、系が一次元的であることが、ゆらぎの性質に現われることを示している。さらに低温になると、系の三次元性がきいて、有限の T_c が現われる。

III. ゆらぎによる電気伝導度

Chap.4 で、ゆらぎによる電気伝導度を摂動論的に調べる。今までの関連した仕事として、アレダー・ブレイ・バーディーン (A B B) は、低温側で超伝導になるとの仮定のもとに、現象論的にゆらぎによる電気伝導度を調べ、 $t^{-\frac{1}{2}}$ ($t = (T - T_c) / T_c$) に比例して発散するという結果を得ている。一方微視的な計算としては、パットンとシャム (P S) がゆらぎに関して摂動論的に計算して、高純度の極限でしかも電子・フォノン結合定数 λ が 1.56 よりも大きい場合にのみ、 $t^{-\frac{1}{2}}$ で増大するという結論を得ている。その計算で、彼らは、不純物による電子の後方散乱は考慮したが、前方散乱は無視した。またピン止めも考慮しなかった。

我々は、不純物による前方散乱及びピン止めの効果をも考慮して、P Sと同じく電気伝導度を摂動計算した。その結果、高純度の極限では、電気伝導度はゆらぎによって、常に増大することが示されている。一方純度が低い極限では当然のことながら、伝導度は減る。また T_c のごく近傍では、不純物によるピン止め効果のために、伝導度はむしろ抑えられ、そのため、 T_c の少し上で伝導度がピークを持つことが示される。今までに伝導度のピークを導いた計算はなかった。

実験にあうように、伝導度のピークの位置を $t = 0.1$ にとると、数値計算から平均自由行路は 300 Å となり、伝導度の極大値としては、 $4 \times 10^5 (\Omega \text{ cm})^{-1}$ が得られる。これらの値は実験から得られる値よりも大きすぎるようである。

ゆらぎによる電気伝導度は、今の場合 $t^{-\frac{1}{2}}$ に比例して増大しているが、これは普通の超伝導の場合の結果である $t^{-\frac{1}{2}}$ と異なっている。これは、今の場合には最も発散の強い項が打ち消しあって、次に発散の強い項がきいているためである。この性質が、パリエルス-フレイリッヒ系に特有のもの

で、一般的に成立していることが、Chap.5 で証明される。そして、特に二次元系の場合には、伝導度に対数的な特異性が現われることが示される。

最後に、Chap.6 で得られた結果と残されている問題について考察がなされている。

審 査 の 要 旨

一次元金属で、電子とフォノンとの相互作用を考えると、フェルミ波数 K_F の2倍の波数のフォノンとの相互作用によって、フェルミ準位近傍の電子のエネルギーにジャンプが生じ、同時に $2K_F$ のフォノンが不安定になり、格子に周期 $1/2K_F$ のひずみが生ずる(パイエルス転移)。一方このひずみに応じて、電子の電荷密度波(CDW)が生ずるが、この周期が格子の周期と有理数比をなしていない場合(incommensurate)、系の並進対称性のために、格子のひずみとCDWによる電気伝導度は ∞ になり、超伝導を示すことになる(フレリッヒ超伝導)。これに対し系が不純物を含む場合は、並進対称性が破れるため、CDWのピンどめがおこり、超伝導ではなくなることが期待される。

実験面では、有機化合物 $TTF-TCNQ$ の電気伝導度が60 K付近に鋭いピークをもつことから、これが上述のパイエルス-フレリッヒ系に対応するものとして注目され、多くの理論的研究がなされている。とくにこのピークがCDWができる前駆現象として、電子密度のゆらぎが大きくなるために生ずると考えられ、ゆらぎの効果が論じられているが、まだ十分納得できる理論は確立されていない。

この論文ではこのゆらぎの効果をより完全に考慮した理論をつくることを目的としている。まず第1章で問題の所在を述べ、第2章で今までの理論的、実験的研究のまとめをしている。第3章以下が著者の得た新しい結果である。

第3章では、ゆらぎがパイエルス転移自身に及ぼす影響を議論している。くりこんだ乱雑位相近似(RRPA)を用いて、 $2K_F$ フォノンの振動数が温度が下がるとともに、どのように減少するかを調べている。また電子のフェルミ準位付近の状態密度が温度とともに減少し、擬ギャップが生ずることを示している。さらに小さな横方向の運動を考慮した場合の転移温度を、横方向の運動の大きさと、ゆらぎの大きさの関数として求めている。

第4章では、電気伝導に及ぼすゆらぎの効果を摂動論を用いて調べている。この場合、不純物による散乱、ピンどめの効果も考慮に入れ、摂動論の範囲内で従来のものより完全な計算を行なった結果、ゆらぎによる電気伝導度の増大は、 $(T-T_c)^{-1/2}$ (T は絶対温度、 T_c は転移温度)に比例することが示された。さらに T_c のごく近くになると、ピンどめ効果によって電気伝導度は抑えられ、伝導度は T_c の少し上で極大を示すという、実験結果に定性的に合う結果を得ている。

ゆらぎによる電気伝導度の増大は、超伝導の場合は $(T-T_c)^{-3/2}$ に比例し、今の場合はこれよりも弱いことが分かったのであるが、このことが摂動の低次だけでなく、任意の次数で成り立つことの証明が第5章でなされている。これはグラフの対称性を用いた一般的証明で、顕著な結果の一つであ

る。

第6章では得られた結果のまとめと討論がなされている。

パイエルス転移は、最近注目をあびるようになった現象であり、多くの研究がなされているが、この論文におけるゆらぎの取り扱い、現在では最も一般的であり、得られた結果も興味深い。とくに第4章で電気伝導度に極大が現われることの理論的導出は最初のことであり、また第5章におけるゆらぎ伝導度のふるまいが超伝導と異なることの一般的証明は、この論文で初めて指摘したものである。これらはこの研究に大きな転機を与えるものとして注目される。

上記論文審査と最終試験の結果にもとづき、著者は理学博士の学位を受けるに十分な資格があると認める。

昭和53年2月17日

主査 筑波大学教授 理学博士 高野文彦

副査 筑波大学教授 理学博士 沢田克郎

副査 筑波大学教授 理学博士 小寺武康

副査 筑波大学助教授 理学博士 高田 慧