

研究のはやりとすたりーソリトンと固体物理ー

In and out of fashion in research works —soliton and solid state physics—

和田 靖

WADA Yasushi

It is well known that scientific research works have a phenomenon similar to that in the community of fashion designers. One day, a particular problem is enormously popular and many people join to explore the problem and try to clarify every puzzle it has. The other day, a new problem becomes so popular and everybody looks to work in the new problem. We sometimes find that the old problem is not necessarily solved. People have just forgot it. We had one or two decades when solitons were so popular in the solid state physics. They were extensively studied theoretically as well as experimentally with exciting discoveries and illuminating discussions. We shall see it with a soliton whose existence is most reliably established in solids. It is in a conducting polymer called polyacetylene, described by $(\text{CH})_x$. Results of ESR, dynamic nuclear polarization, and NMR suggested that the soliton is more mobile at higher temperatures. Its diffusion constant was observed to be proportional to T^2 at low temperatures. The T^2 dependence was claimed similar to that obtained theoretically in 1978. The similarity was, unfortunately, accidental. In spite of extensive works thereafter, the temperature dependence is still unexplained and many questions remain widely open. Presumably, many important unsolved problems remain all over the fields of physics, being forgot by people. Let us hope that they will revive sometime to become fashionable again, as we see very often in the world of fashion industry.

1. はじめに

1975年にKrumhanslとSchrieffer⁽¹⁾が共著の論文を書いた。ある擬一次元系ではソリトンが多体系の素励起であり熱的性質を統計力学によって計算するときその要素の一部として使えることが示された。彼らが用いたのは ϕ^4 系として知られている模型であった。固体物理でソリトンという概念が有効で重要であることを示した最初の仕事といえよう。

ソリトン自体は1834年にRussellによって運河の水の波動として発見されたことがよく知られている。まっすぐな運河を馬に引かれた船が登ってきて船着場に着いたのを眺めていると、止まった船からひとかたまりの波動が出て運河の先のほうへ動いていった。それを馬に乗って追いかけていったら、波動は少しも崩れずどこまでも伝わったが、やがて運河が曲がったところで消えた。

普通、波動は進む方向の前後にある程度広がっているものだがこの波動はむしろ塊になっている。また普通の波動のようにすぐ形が変わって平らにならずいつまでも安定に形を保っている。こんな波動の存在を科学的に説明できるかどうか当時の流体力学研究者の話題になった。そして流体力学の基本式からKdV (Korteweg-de Vries) 方程式が導き出されて、波動の存在を説明することが分かったのである。

塊の形をした波動はいろいろな波長の波の重ねあわせでできている。波長が違くと伝わる早さが違うから塊の

形はすぐ崩れてしまうはずである。これを分散という。ところがKdV方程式を見ると波動の高さの二乗に比例する項があって、波動が高い場所ほど高さをより高くする。つまり波動を険しくする。これを非線形性という。分散と非線形性がうまくバランスすると波動は崩れず険しくもならず、形を保ったまま伝わる。この波動は孤立波(solitary wave)と名づけられた。

非線形項をもつ非線形方程式は普通解けない。ところが驚いたことにKdV方程式は解けることが分かった。ある時刻で各地点での波動の形とその変化率を与えるとそのあと波動がどう変化するかを、原理的には、数式で書ける。これは物理学者数学者に大きな刺激となり研究が進んだ結果、かなりの数の非線形方程式が解けることがわかってきた。このような方程式であらわされる体系を積分可能であるという。そして積分可能系では孤立波が安定な重要な成分として含まれていることが示された。

ある時刻にある領域の中でどんな波動が立っているかを科学的に表そうとしたら、領域内の各地点での波動の高さとその変化率を記録することになるだろう。そのような任意の波動は塊の形をした波動同様にいろいろな波長の波の重ねあわせでできている。ある決まった波長の波は領域全体に広がっているのだが、その強度と、位相というどの地点に波の最高点があるかを決める量をうまくあたえて、ほかの波長の波と重ねるともとの波動ができる。この意味で波長が決まった波はいろいろな波動を作るための基本量であるといえるので、これらを素励起という。各地点での波動の高さと変化率の代わりに各素励起の強度と位相で波動を表すことができるのだ。つまり実際の波動は素励起の複雑な重ねあわせなのである。

波動のエネルギーを考えよう。波動がまったく立っていない状態がいちばんエネルギーが低だろう。そのエネルギーを基準としそれに比べて波動が立っている状態のエネルギーがどれだけ高いかを問題とする。それがその波動の励起エネルギーである。励起エネルギーは各地点での波動の高さと変化率が分かれば計算できる。したがって各素励起の強度と位相が分かれば決まるともいえる。

ところで考えている波動の温度がある値に決まっているようなときは何が起こっているのだろうか。熱の科学が教えるところによれば温度によっていろいろな波動が

立つ割合が変わってくる。その割合は波動の励起エネルギーと温度の比率によって決まる。つまり温度一定のときはエネルギーは一定ではなく、いろいろなエネルギーの波動が立つ。温度が高くなるとエネルギーの大きな波動も立つようになる。このようなときにエネルギーの平均値をはじめいろいろな量を求めるには、波動が立つ割合に関係した量を波動すべての場合について加えあわせて得られる状態和という量を求めることが必要になる。それはつまり各素励起の強度と位相について加え合わせるのである。

常識的な普通の波動のときは、素励起は前にも述べたとおり波長一定の領域全体に広がった波で、非線形項のない線形方程式の解として定まるものである。そして二種類以上の素励起の波を加え合わせたものはより複雑な波動を表すが、それも同じ方程式を満たす。方程式が線形であることからこれは保証されていて、波の干渉といわれる現象にあたる。一方、非線形方程式であるKdV方程式の解を調べてみると、孤立波と孤立波があるときに領域全体に広がった波とがまさに素励起の役割をしていることが分かった。波動全体は孤立波部分についてはその位置と運動量を、他の波については強度と位相を与えると完全に決まる。そして状態和はこれらがいろいろな値をとる場合について加え合わせて求まる。孤立波はこのようにその位置と運動量によって運動状態が決まるので、何かある粒子のように見える。そこで孤立波(solitary wave)のかわりにソリトン(soliton)と呼ぶようになった。ただ方程式が非線形なためにソリトンだけがあるときの波動と領域全体に広がった波だけがあるときの波動を加え合わせたものは解にはならない。しかし“加え合わせる”ということがただの足し算ではなく少し複雑な過程の足し算を意味するとすれば、波の干渉はこの場合にも起こっているといえる。

このようにしてソリトンは主に物理数学の分野で精力的に研究されてきた。運河の波の次に自然の中で注目されたのはプラズマの中のソリトンである。それから物理の他の分野でも次々にソリトンの考えが使われたりその存在が示唆されるようになった。固体物理でも対象とする物質に応じて昔からソリトンの問題に対して研究されてきた。磁性体の中の磁壁とか、ある種の転位の構造などがその例である。それにも拘わらず1975年のKrumhansl-Schriefferの論文が新鮮な印象を与えたのは熱の科学を含

めた広い分野に対応する一般性と、いろいろな物質にも応用できそうな大きな期待を読者に持たせたからであろう。

この小文の目的はその後に続くソリトン研究の全体を見ることではない。固体の中でソリトンはどう動くかという疑問に関連した話題だけを取りあげる。それが熱心に調べられた時期がありその結果がどうなったか、そして現在どうなっているかを検証するのが目的である。

§2ではKrumhansl-Schriefferが取り上げた ϕ^4 模型の特徴と、そのソリトンの運動のシミュレーションの結果、新しい問題が生じたこと、その問題の理論的解釈が行われ、その結果さらに新しい問題を認識したことを述べる。§3では人工的に合成されたポリアセチレンという物質の紹介をする。その中にソリトンが存在すると信じられる理由を説明する。§4はソリトンの運動を実験的に観察した結果をまとめる。§5で実験の結果を理解しようとした試みをふりかえる。§6は残された問題の意義を説明し、それを解決する可能性を議論する。

2. ϕ^4 ソリトンとその運動

KrumhanslとSchriefferが用いた ϕ^4 模型とは一本の鎖のように原子が長くつながった一次元系である。一つ一つの原子は二重井戸といって底に同じ深さの最低点が二つある井戸の中にある。隣り合った井戸の中にある原子の間には力が働いている。それは距離が遠くなると引き合い近くなると反発するばねの型の力である。二重井戸の二つの最低点を仮に右左で区別することにしよう。この体系のエネルギー最低の状態は二つある。ひとつは原子が全部右側の最低点に静止しているとき、もうひとつは左側の最低点に静止しているときである。これらよりも少しエネルギーの高い状態といえば、ある原子がその最低点の周りで微小な振動をはじめそれが隣との相互作用を通じて隣の原子の微小振動を引き起こし、しだいに波動となって系全体に広がる場合である。このような波動を格子振動という。

原子が二重井戸の中にあるせいで別な種類の励起状態がある。鎖上のある場所の片方の側ではその場所の近くを除いてすべての原子が一方の、たとえば右側の最低点に静止し、反対側では同じようにその場所よりある程度以上離れた原子は別の、左側の最低点に静止している。

問題の場所の近くの原子は与えられた環境の中で一番エネルギーが低くなる場所を探してそこに静止する。この原子配置は平衡点の周りの微小な振動である格子振動では作れない新しいもので、これが ϕ^4 系のソリトンになる。

Krumhansl-Schriefferはこれをソリトンとは呼ばずdomain wallと名づけた。 ϕ^4 系はKdV系のような積分可能系ではない事が知られていた。したがってこの系でのソリトンの励起は安定ではなく、それら同士が衝突したり格子振動と衝突したりすると変形したり消滅したりする可能性があるので、数理論理学者はそれをソリトンと呼ぶことを好まなかったのである。おそらくそれがdomain wallと名づけられた原因であろう。しかし自然界の中で、ある積分可能系を具現する体系を求めようとすると、いつもある現実系を理想化したものとしてしか見出せない。つまりその系内外にある弱い相互作用を無視した極限が積分可能系になりうる。KdV方程式自体がそのよい例である。従って理想化の極限から一步踏み出して無視した相互作用のうちで比較的重要なものを考慮に入れると、系は積分可能ではなくなりソリトンは安定ではなくなる。だからソリトンという名前を積分可能系だけに限定するのはあまり意味がない。

1975年から76年にかけての冬にSchriefferが来日し東大で講演をした。Krumhansl-Schriefferの話をした後で、最近得られたシミュレーションの結果を紹介した。シミュレーションとは実験を実際に行うことが難しいときや、その系をあらわすと信じられている方程式が解けないときに、方程式をコンピュータで強引に解いてしまおうというやり方である。simulationとは何かのふりをすることを意味するが、この場合は与えられた方程式が自然系のふりをしているという意味であろう。

その結果を一言でいうと、 ϕ^4 ソリトンは思ったほどまっすぐには進まない。むしろブラウン運動をする粒子のようにジクザクと動くというのである。昔ブラウンという人が水の上に浮かべた花粉の運動を顕微鏡で観察したところ、じっと止まっていたはずでジクザクした乱れた運動をしていた。これは水の分子がいろいろな方向から時々ぶつかるからでこの花粉の運動をブラウン運動という。シミュレーションの結果を報告した論文⁽²⁾はブラウン運動の原因として二つの可能性をあげている。ひとつはソリトンと格子振動の相互作用で、格子振動について非線形な項の効果である。格子振動といってもこの

場合はソリトンが存在するときの格子振動であるから線形項は存在しない。一個のソリトン解自体がエネルギーの局所的安定状態の解なのでそれからの微小なずれである線形項はないのである。もうひとつの可能性は ϕ ソリトンが仮ではあってもソリトンであるのは、原子の間隔がソリトンの広がりとか格子振動の波長とかに比べてずっと小さいときに認められているという事情に関係する。このとき原子の鎖は一本の紐のような連続体とみなされ、その運動方程式は空間座標についても微分方程式になる。ところがシミュレーションをするときは、連続体をまた鎖に戻さなくてはならない。1mの長さの紐の運動は1mを1cmごとに区切って100個の点を作りその100個の点の運動として求める。もちろん区切りは1cmよりも1mmのほうがよいし、コンピュータのメモリが大きければできるだけ小さいほうがよい。しかし区切りがどんなに細かくても鎖は鎖であって紐ではない。だから紐のときにはなかった余分な運動が見えた可能性があるというのである。

1977年の夏から10カ月ほどSchriefferのところ滞ることになった。はじめに何をするかを相談した。期間は短くはないがまったく新しい問題に取り組むほど長くもない。具体的で取りつき方に見当がついているほうがよい。結局2年間進歩してなかったソリトンの運動にした。それもやりやすいほうの格子振動に限った⁽³⁾。

静止したソリトンがあるとする。そこでは原子が二重井戸の最低点にはない。原子の配置、つまり格子の形がひずんでいる。格子振動はひずんだ安定点の周りの原子の振動になるから、ソリトンがないときの格子振動とは違って来る。この違いは既に分かっていた。新しい格子振動は三種類からできている。はじめの二つはソリトンの近くだけにあるもので、その一つは振動数がゼロのものである。それはこの振動の励起エネルギーがゼロであることを意味する。これはゴールドストーンモードといわれるものでソリトンにつきものなのである。ソリトンは何処にできてエネルギーは変わらない。ソリトンにゴールドストーンモードの格子振動を加えるとソリトンを移動したのと同じになる。移動によってエネルギーは変わらないからゴールドストーンモードの励起エネルギーはゼロなのである。もうひとつの振動はゼロでない振動数を持っている。ソリトンの形が変化するモードである。残りの格子振動は体系全体に広がるもので、ソリトンが

ない場合と同じ振動数を持っている。それはソリトンの近くだけにあるものの振動数より高い。ソリトンから遠くへ離れると決まった波長を持つ。ソリトンのない場合と比べるとソリトンの前後で位相にずれができる。

ソリトンが花粉であり格子振動が水の分子であるならば、まずソリトンに格子振動をぶつけたら何が起こるかを見なければならぬ。ソリトンから離れたところで、格子振動で弱い波を作りそれをソリトンにぶつける。作った波の振幅を α とすると弱い波というのは α が小さい場合である。その波がぶつかったあと何が起こるかを計算すると、 α の一次の範囲ではほとんど何も起こらない。ソリトンは動かず形も変えない。波もソリトンをするりと通り抜けて早さも形も変えない。ただひとつの変化はソリトンがいなかったときに比べて波の位置が一步先になっていることである。

つぎに α の二次の範囲では二つのことが起こる。ひとつはソリトンが波が入ってきた方向に一步動く。その歩幅が α^2 に比例している。もうひとつは入ってきた波の振動数の二倍の振動数をもつ波が発生しソリトンの前後へ伝わる。これらを高調波という。振幅が α^2 に比例するより弱い波であるが二つを比べると、最初の波が入ってきた方向へ行く波は反対方向へ行く波よりずっと弱い。はじめの、ソリトンが一步動くことはほかの積分可能な系でもよく知られていることである。しかし高調波が発生すると積分可能ではなくなる。衝突をするたびに次々とより高い振動数の波が発生するので、それらをまとめて数学的に扱うことができなくなるのだ。 ϕ 系で高調波が発生するということが、積分可能系ではないことを示唆している。

前節で述べたように温度がゼロでない格子振動が熱によって励起される。いつ何処でどんな振動が起こるかはランダムな確率事象である。そのような格子振動がソリトンに衝突するのだから、衝突自体がランダムに起こることになる。そして衝突ごとにソリトンが一步動く。これは水分子にランダムに衝突される花粉とまったく同じ状態である。花粉同様ソリトンもブラウン運動をすることになる。ただ衝突によって動き出した花粉がすぐ止まるのは水そのものとの摩擦のためであるが、ソリトンのときは α の二次までには摩擦は起きない。ソリトンと格子振動の間には引力が働いていて、格子振動が近づいてくるとその方向へ動き出し、振動がソリトンの位置に

来たときにはある速度で動いているのだが、振動がソリトンを過ぎると反対向きの力が働きだし速度が遅くなる。振動が遠くへ行き過ぎるとソリトンの速度がゼロになって止まる。ブラウン運動の微視的な原因はこのように違うのだが巨視的に見ると二つの間に違いはない。

ブラウン運動の度合いを表すのは拡散係数という量である。水の中にインクを一滴たらすとだいに広がり、やがて水全体が同じ濃さになる。インクの染料の分子がそれぞれブラウン運動をして勝手な方向へ動いていくので、インクが広がるのである。インクが広がる速さの目安が拡散係数だが、それがブラウン運動の度合いを示すのは明らかだ。

一個の染料分子に注目して、インクをたらした瞬間から t 秒後にその分子が何処まで動いたかが分かったとする。動いた距離を $\delta(t)$ とする。これを二乗して平均したものを $\langle \delta(t)^2 \rangle$ と書く。 $\langle \cdot \cdot \rangle$ はランダムに起こる水分子との衝突についての確率平均である。もし分子が等速運動をするなら $\delta(t)$ は t に比例するから、 $\delta(t)^2$ は t^2 に比例することになる。しかしブラウン運動のときはジグザクと動くため t が大きくなると t 自体に比例する。そこで $\langle \delta(t)^2 / 2t \rangle$ を計算すると t に無関係な値になる。これが拡散係数 D にあたることが知られている。

ソリトンにこの議論を応用する。ソリトンの歩幅は a^2 に比例しているから距離 $\delta(t)$ も、 a^2 に比例する。従って拡散係数 D は a^4 に比例する。この量の確率平均をとるとどうなるか。前世紀に確立した古典の熱の科学によると、格子振動の振幅の二乗の平均は絶対温度 T に比例する。エネルギーの等分配則というのがあって、運動エネルギーや位置のエネルギーがいくつかの成分からできているとき、そのおのおのの成分はひとしく T に比例した平均値を持つ。一方これら各成分はそれぞれ振動の形で与えられ、そのエネルギーへの寄与は振幅の二乗だったのである。この議論を応用すると a^4 の平均は T^2 に比例する。それで拡散係数 D は T^2 に比例することになる。

$$D \propto T^2. \quad (1)$$

もし等分配則が成り立たなくなったらこの温度変化も変わることが予想される。今世紀に入ってマイクロな世界の研究が進み、量子物理ができると、一般にある振動数の波動を励起するには、最低その振動数に比例するエネ

ルギーが必要であることが分かった。熱の科学も進歩した。その結果、等分配則は温度が高いときに成り立つことが示された。何に比べて高温かという、ソリトンの例では、振動数がゼロのゴールドストーンモード以外のモードの振動数に対応する温度である。それよりも低温では波動を励起するのに必要なエネルギーがなかなか得られないから、格子振動の振幅の二乗の平均はその制限がなかった等分配側の時代に比べてずっと小さくなる。 a^4 の平均も同じで、拡散係数 D は $T \rightarrow 0$ のとき式 (1) よりもずっと早くゼロに近づく⁽⁴⁾。このようにして ϕ^4 ソリトンのブラウン運動は理解できることになって研究プロジェクトは成功裏に終了したが、問題はまだ残っていた。

その一つは文献⁽²⁾ が指摘したもう一つの効果、コンピュータが紐を鎖で置き換えたことの影響を調べることだ。この問題は数式を使った解析的方法では研究できないので、それ自体コンピュータシミュレーションをするしかない。これをすっきりとやってみせたのは石内君である⁽⁵⁾。コンピュータ上でソリトンに格子振動をぶつけると原子が二重井戸のひとつの最低点から他の最低点に実際に動くのが見えたりする。鎖にした効果はブラウン運動を促進する方向に働いているように見えるが、シミュレーションの欠陥は一般性が足りないところにあり、それだけでは拡散係数の大きさや温度依存性を決めることができない。ところがこの仕事は思いがけない結果を生んだ。格子振動に衝突されたあとソリトンは一歩動くだけではなく振動がきた方向へある速さをもって走り出したというのである。この速さが a^4 に比例することが示され、四次の過程であることがわかった。そして全エネルギー、全運動量の保存則からこの速さを求めることができてシミュレーションからの結果とよく一致した。格子振動がソリトンにぶつかる二次の過程で前後方に高調波が出ること、入射波が通り抜けていく方向へ出る高調波のほうがずっと強いことを前に述べたが、それだけだとその方向への運動量が逆方向へのものよりも大きくなって保存則が成り立たない。やむをえずソリトンが逆方向へ走り出して保存則を満たすようにする。

衝突後にソリトンが速度を持つと事情は花粉に似てくる。花粉が水の抵抗のために止まったように、ソリトンも媒質としての格子振動との摩擦で速度を失いとまるに違いない。つまりソリトンのブラウン運動は二

つのメカニズムで起こっているのだ。その二つを見分ける手段はあるのだろうか。実際の物質にソリトンを持つものがあるとすれば、そのブラウン運動でこのメカニズムは見えるのだろうか。

3. ポリアセチレン

1977年にアメリカへ行ったとき同じキャンパスの中で面白い仕事が進んでいた。当時東京工大におられた白川さんが70年代の初めに作られたポリアセチレンのフィルムに不純物を添加する実験である。アセチレンというのは有機化学では基本的な分子で炭素2個と水素2個からできており、(CH)₂と表され $\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$ のように結合している。炭素原子は四本の手をもち水素原子は一本もっていて、結ばれた手を一本の線で表した。一本の線で結ばれたところが一重結合、三本の線で結ばれたところが三重結合である。アセチレンは気体だが適当な触媒を入れて反応させるとポリアセチレンになる。ポリアセチレンは (CH)₂と表され図1で示すような *cis* と *trans* の二つの構造がある。Shirakawa-Ikedaはこの鎖状の高分子でフィルムを作ることに成功し、任意の *cis/trans* 比の資料を作る技術を開発した⁽⁶⁾。このフィルムは半導体で、*trans* 成分は常温で安定である。これからもっばら問題にするのは *trans* 成分の方である。これに塩素Cl, 臭素Br, 沃素Iなどのハロゲン元素や五フッ化砒素AsF₅を不純物として添加したところ導電性のある金属になり、その電気伝導度は不純物濃度とともに11桁も増加した⁽⁷⁾。

電気を伝える物質を金属という。よく使われるのは銅である。そこでの電気伝導は電子が動くことによって起こる。銅の中で各電子は電子状態という部屋の中に住んでいる。この部屋は巨大なマンションの一部だが、マンションはものすごく高い——実は無限に高い。1階から螺旋状の坂が上に登っている。半径が大きくピッチが小さい緩やかな螺旋坂だ。坂に面して各部屋への入り口がぎっしりと並んでいる。だから隣り合う二つの部屋は同じ高さにあるように感じてどちらが上か下かを気にすることは無いほどである。しかしマンションの構造上ところどころ坂が1段の階段になっている。たまには階段どころかかなりな高さの絶壁になっているところもある。何処に階段があり何処に絶壁があるかはマンションによって、つまり物質によって異なる。電子はこのような

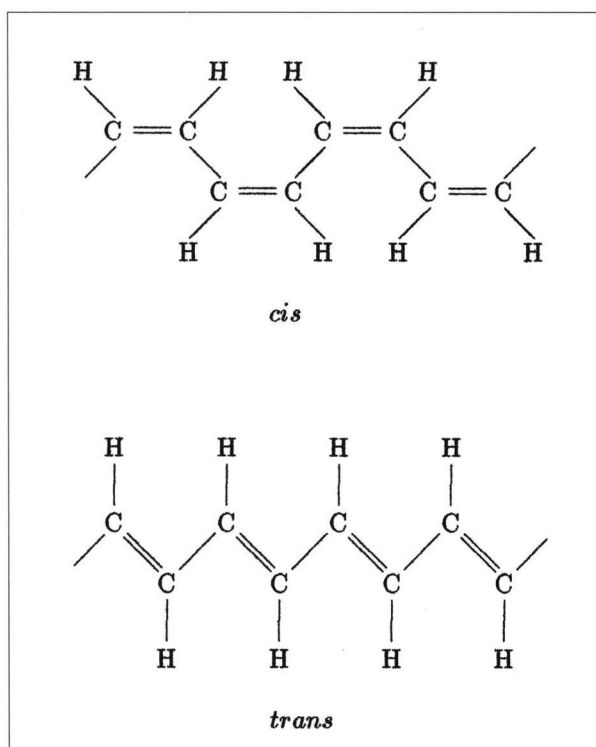


図1：ポリアセチレンの二つの構造、*cis*型と*trans*型

構造をしたマンションの中の部屋に住んでいるのだが、入居については規則がある。各部屋に入れる電子は二人までで、二人のときは男女一人ずつである。電子に性別があるかといわれそうだが、電子はスピンというものをもっており、スピンは上か下を向いている。上と下を決めるのは、さしずめ何でもよい。勝手な方向をとってそちら向きを上向き、反対向きを下向きとしてよい。スピン上向きの電子を男性、下向きを女性とすれば話は通じる。マンションの住人は毎月の家賃は払わなくてもよいが入居のとき部屋の高度に比例した入居費を払わなければならない。入居した後でもっと見晴らしのよい高いところへ移ろうと思ったら、入居費の差額相当分を払う。また下の部屋が空いたのでそこへ移るときには差額がかえってくる。物質の種類に応じて電子の、つまり住人の総数が決まっている。当然入居費が安い下の部屋に人気が集まり下から詰まってくる。運が悪い人はみんなの中では一番高い部屋に入ることになる人だ。その上に空き部屋はいくつもあるとはいっても、この人の部屋がどんなどころにあるかが実は大切なのである。それが螺旋坂の途中にあるときその物質は金属になる。1段の階段の下にあるときは半導体である。絶壁の真下であれば絶縁体になる。

あるとき金属の住人全員に金額は少ないが地域振興券が配られることになった。住人はこれを住み替えのためにだけ使えるという条件だ。金額が小さいのでほんの少し上の部屋までしか移れない。大多数の住人にとっては移れそうなどころには既に人が入っているので移れない。結局地域振興券の恩恵を受けることができるのは一番高い部屋かそのすぐ下あたりに入っているごく一部の住人だけである。この人達は振興券を払ってすぐ上の部屋やその近くの部屋を覗いたりちょっと住んでみたりあちこち動いたりしてみることができる。このように電子が動けることが電流を作れる原因なのだ。振興券は金属にかけられた電場なのである。

半導体マンションでは振興券の金額が少ないと一番上の部屋の住民でも動けない。上の部屋に行くには階段があるのでそれを登れるだけの金額は最低必要である。まして絶縁体マンションでは振興券はあってないにひとしい。絶壁を登りきるほどの電場がかかったら登りきる前にマンションが壊れてしまう。

さて次にもっと独創的な政党が勢力を得て妙な振興券が出ることになった。金属マンションに住む女性にだけ一定の金額を出すというのである。その代わり男性からは同じ金額を税金として徴収する。同じ部屋に男女がペアで入っている人達にとっては何の関係もない。しかし一番高い部屋付近の人達には変な反応を示した。ペアで住んでいた人達のうちの男性が性転換をして女性になると言い出したのである。すると同じ部屋には住めないの、上の空き部屋へ移る。入居費の差額分が振興券の金額より少なければ性転換をしたほうが得だというわけだ。以前は男女の数がほとんど同じだったのに、振興券のおかげで女性の数が増えた。この増加分は振興券の金額に比例する。それから空き部屋のうち差額分が少ない部屋がどのくらいあるかにも比例する。増加分と金額の比をとると手ごろな部屋の数を推定できる。

この妙な振興券とは磁場である。スピンの向きが磁場と平行な電子は男性であり、逆向きの電子が女性である。男女数の差は金属の磁化にあたり、それと金額の比はパウリの磁化率と呼ばれる。

二つの振興券の効果は両方とも手ごろな空き部屋がどのくらいあるかで決まる。原因が共通なので片方が起これば他方も起こる。つまり金属なら必ずパウリの磁化率はゼロではない筈である。文献⁽⁷⁾の著者たちはポリア

セチレンに不純物を添加すると金属になることを発見したが、同じグループがAsF₅を添加したときのパウリ磁化率を測定して添加率が4%以下では非常に小さいことを見出した⁽⁸⁾。ポリアセチレンでは常識が通用しないようだ。

1979年にポリアセチレンで働いているいろいろなメカニズムの中から最も重要なものだけを取り出して見通しをよくした理論模型がSu-Schrieffer-Heegerによって提出された⁽⁹⁾。この模型をSSH模型と呼ぶ。φ⁴模型でのKrumhansl-Schriefferにあたる論文である。図1のtransでどのCとHの組もいつもいっしょに動くのでそれぞれ(CH)グループとして一個の粒子のように扱う。左の端から1番目のグループ、2番目のグループ、……のように名前を付ける。仮に電子がいなければ各グループは等間隔で直線状に並び次元格子を作るだろう。そしてそれぞれの地点の前後に微小な振動をする。隣り合った(CH)グループの間隔が大きくなったら、それに比例した引力が働いて間隔を縮めようとし、小さくなったら、それに比例した斥力が働いて間隔を広げようとする。隣人というものは近くに居ないと困ることがあるが、近すぎると煩いものである。

各(CH)グループは、ばらばらに居るときは、一個の電子状態をもちその中に一個の電子がいる。つまり電子の部屋を一つもってそこに電子が一人住んでいる。それが集まってきて隣人と一緒に直線状に並ぶと、電子は隣の(CH)グループの部屋へ飛び移れるようになる。その飛び移りやすさは隣との距離が小さいほど大きく、大きいほど小さいだろう。隣との距離は二個の(CH)グループの振動によって変化する。だから飛び移りやすさの変化は電子—格子の相互作用を与えることになる。以上がSSH模型である。

(CH)グループがばらばらに居るとき、電子はいわば一軒家に住んでいる。(CH)グループが格子状に並ぶと電子も一軒家に居るわけにはいかなくなって、マンションを建てることになる。マンションの部屋の総数は元の軒家の総数にひとしい。体系の自由度はその物理的状態によって変化しないことに対応している。電子総数も変わらないから、それは部屋総数にひとしい。本来一つの部屋には二個の電子が入れるから、部屋の半分は空くことになる。

じつは直線状の一次元系にはある特殊な事情がある。

図1のtransにあるように片方の隣とは二本手をつなぎ、もう一方の隣とは一本だけつなぐ。二本のほうが近く一本のほうがより遠い。このように工事するとマンションの構造がよりしっかりするのだ。

この工事によって電子が入居している下半分の部屋と空いている上半分の部屋の上に階段ができる。つまり半導体になる。工事は階段のすぐ下の坂道をもっとなだらかにして、余った土を階段の上側に運びその勾配をもっとなだらかにしてしまう。その結果階段のすぐ下あたりの部屋の入居費はなだらかになった分安くなる。格子のほうは等間隔に並んだ方がエネルギーは低い。工事のために格子は歪み、余分なお金がかかったが、一次元系では電子の入居費の下がりのほうが大きいのでいつもこの工事が行われる。これが原因で不純物のないポリアセチレンは半導体なのだ。

不純物を入れると前に述べたようにこの構造に妙な変化が起こるらしい。それがソリトンによるものだと指摘したのが論文⁽⁹⁾なのである。図1にtrans型の構造を示したが、図2の上二つに示す二つの構造は同じエネルギーをもつ。一つをA型、他をB型と呼ぶことにする。一番下に左の端がAで右の端がBであるような場合を示す。両端の間に二つの構造の間の移り変わりが少なくとも一回は存在する。其の境界は急ではなく10数個のCHにわたってゆっくりと変わっていく。その境界がポリアセチレンのソリトンなのである。

このソリトンの構造を理解するために、今仮にポリアセチレンの鎖の両端は炭素Cの間が二本の手でつながっている二重結合であるほうがエネルギーが低いとしよう。するとCHグループの数が偶数のときは鎖全体がAかBのときにエネルギーは低い。しかしCHの数が奇数であると両端が二重結合なので片方がAなら他方はBになり、間のどこかにソリトンがいることになる。

ソリトンが在るときの電子のマンションはどのような構造になるだろうか。CHの数を $2n+1$ とする。 n は整数である。すると電子の数も $2n+1$ である。マンションの部屋の総数も $2n+1$ である。マンションの坂道にできる半導体の階段はちょうど半分の高さのところのできるから、階段より下の部屋数と上の部屋数はひとしくそれぞれ n に違いない。

すると残りの一つは何処にあるか。マンションの構造の対称性からそれは階段の真中にできるだろう。崖の真

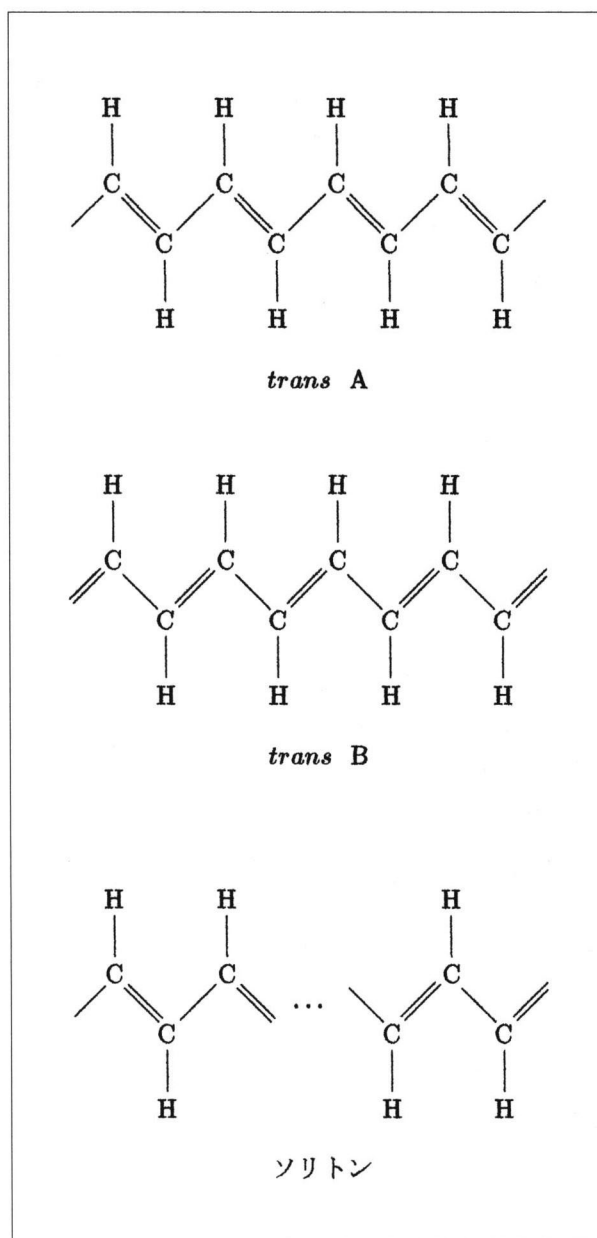


図2：トランスポリアセチレンの二つの型、A型とB型。境界がソリトンになる

中にある鳥の巣のように。この部屋はエネルギーのギャップの中の状態というのでmid-gap stateと呼ばれる。マンションは(CH)グループがばらばらにいたときの一軒家を解体してその材料を使って建設されるので、普通の部屋は一軒家すべてからほぼ等分に材料を受け取るのだが、この鳥の巣はソリトンが存在する為に生ずることから推察できるようにソリトンをつくっている10数個の(CH)グループからの建材だけでできており、その範囲にしか広がっていない。

このマンションに電子が入居する。下のほうの部屋からペアになって入るから階段の下までは満室で $2n$ 人はいる。残りの一人は階段の中の部屋に入ることになる。その人が男か女かで全体として男が多いか女が多いかが決まる。部屋がソリトンと同じ広がりしかもっていないから、男が多いか女が多いか、つまりスピンの上向きか下向きかはソリトンのいる場所だけの特性になるのでそれをソリトンのスピンと考えることができる。

一方、電気の方は電子が負の電荷をもっているが、各(CH)グループもそれを打ち消す正の電荷をもっているため全体として電気はない、中性である。つまりこのソリトンは電氣的には中性である。

普通は物質の中の現象を担う粒子はそれが持つ電気量とスピンの大きさの間に関係があって、電気を持っていればスピンもあり、電気がなければスピンもなかった。ソリトンのように電気がなくてスピンがあるというのは初めてで、これをスピン—電荷の分離という。

このポリアセチレンに不純物を添加したらどうなるか。不純物の効果は第一にポリアセチレンに余分な電子を供給したり、ポリアセチレンから電子を取り去ったりすることにある。今は前者の供給する場合を考えよう。余分な電子は何処に入るだろうか。中性ソリトンが存在するときは鳥の巣に住んでいるのが男だったら女性が、女だったら男性が入ってペアを作るだろう。するとソリトンは負の電荷をもちスピンは無くなる。

中性ソリトンのいないポリアセチレン鎖は鳥の巣のない普通の半導体だった。入ってきた電子は階段の上の部屋へ入るだろうか。必ずしもそうとは限らない。たとえば、まず中性ソリトンを二つ作ってその中の一つに入ることもあるだろう。中性ソリトンと負のソリトンが残ることになる。すべてはどちらが少ないエネルギーでできるかで決まる。

さて電場がかけられると、中性ソリトンは電気がないので電場を感じない。電場を感じるのは負のソリトンである。従って電気伝導は負のソリトンが担う。これはスピンをもたないのでパウリの磁化率はゼロである。

このようにして文献⁽⁸⁾で提起された問題はソリトンのスピン—電荷の分離で解明された。

4. ソリトンの運動

ポリアセチレンのソリトンの運動が集中的に議論されたのは1982年のLes Arcsでの会議だった。報告された実験は電子スピン共鳴 (ESR)、動的原子核偏極 (DNP)、核磁気共鳴 (NMR) などいろいろあった。温度領域は絶対温度100度付近以下の範囲で、大方の結論は温度が高いほどソリトンは動きやすいということであった。

はじめに核磁気共鳴 (NMR) をとりあげる。ポリアセチレンには図2にあるように水素Hがいる。水素原子は一個の陽子からできる原子核と一個の電子からできている。その電子は隣の炭素Cの電子の一つと一しょに(CH)グループを作るための結合の手になっている。陽子は正の電気と電子と同じようにスピンをもつ。スピンがあるとそれに伴って小さな磁石をもつ。磁石の強さは、陽子が電子より1800倍重い分だけ小さい。電子同様陽子のスピンも上向きか下向きの二つの向きしか向けない。ポリアセチレンに外から静磁場をかけると、その磁場が陽子の磁石にも働き、磁石が磁場と同じ向きのときはエネルギーが低く、逆向きのときは高い。そのエネルギー差は磁場の強さに比例する。

もう一つの振動する磁場を前の磁場に垂直にかける。振動数を磁石の向きによるエネルギー差に合うようにすると、磁場の方向を向いていた磁石が振動磁場からエネルギーを受け取って、エネルギーの高い逆方向を向く。これが核磁気共鳴である。逆を向いた磁石はやがてエネルギーの低い元の向きへ向きなおす。それに必要な時間の平均値をスピン—格子緩和時間と呼び T_1 であらわす。論文⁽¹⁰⁾の著者たちは磁石の向きの再反転が中性ソリトンとの衝突によると考えた。磁石の向きと逆向きのスピンをもったソリトンが磁石に衝突すると、磁石もソリトンのスピンも向きを変えることができ、その確率は計算できる。すると緩和時間の測定値からソリトンが衝突してくる頻度がわかり、ひいてはソリトンの拡散係数が分か

るというわけだ。

スピン格子緩和時間とは磁石が逆を向いた状態の寿命である。短い寿命の間しか生きていない状態の励起エネルギーは広がりをもっている。言い換えれば、その状態を作ろうとしたら、ある特定の値のエネルギーをつぎこむ必要は必ずしもなくて、その近くの値のエネルギーでも可能である。この広がり寿命が短いほど広い。核磁気共鳴の実験で実際に見るのは振動磁場からのエネルギー吸収であるが、その振動数を大きくしていくと励起エネルギーの広がりの中に入ったときに吸収が始まり、その度合いが大きくなり、最大になり、小さくなり、零になる。この吸収の山の幅から緩和時間 T_1 が求まる。実際には振動数を変えるのは大変なので、振動数は一定にして静磁場の強さを変える。得られる情報は同じである。

緩和時間と拡散係数との間には、少し前に核スピンと一次元ブラウン運動をする電子の衝突で導かれた関係があって、それが使える。それによると

$$T_1 \propto (DH)^{1/2}. \quad (2)$$

である。ここで H は静磁場の強さである。論文⁽¹⁰⁾ では T_1 が H の平方根に比例することをまず確かめてから拡散係数 D を決めたところ、 T^2 に比例するという結果が出た。比例係数もほぼWada-Schriefferの大きさになるというのである。

Les Arcsの会議では上の考えに対し異論が出た。ソリトンがいなくても、水素原子核スピンの間の弱い相互作用によって隣の磁石を逆向きにし自分は元の向きに戻るというスピン拡散で T_1 は \sqrt{H} に比例するし、データも説明できるというのである。どちらの機構が主なのかは、会議では決着がつかなかった。

このような複数の可能性がないのは電子スピン共鳴である。核磁気共鳴の核スピンの役割を電子のスピンが果たす。核との違いは電子の場合環境の影響が大きいことにある。たとえば固体の中では電子の質量が大きく変化することが知られている。その磁石の強さも電子が一個だけいるときと比べると環境に応じて大きく変わる。だからどの物質でも電子スピン共鳴が観測されるとは限らない。ただ普通の金属の中で電気伝導の役割をする電子は観測できることが多い。それでポリアセチレンについても早い段階から実験が行われてきた。

ポリアセチレンでスピンをもっているのは中性ソリトンであるから、電子スピン共鳴の対象になるのも中性ソリトンである。振動磁場でそのスピンの逆転し、それが元の向きに緩和するのは他の中性ソリトンがやってきて衝突することによって起こる。このシナリオは早い段階の実験結果に基づいて描かれていた。

核磁気共鳴の解釈の複雑さが指摘されてからNMR、ESRの実験がさらに丹念に繰り返され、その他の新種の測定も数多くなされた。論文⁽¹⁰⁾ のグループは1983年にNMRとESRの両方の結果を包括的に説明する考え方を提出した⁽¹¹⁾。その要点はソリトンが不純物に捕らえられて動けなくなる可能性を取り入れたことである。動けなくなった中性ソリトンはスピンの緩和には寄与できない。彼らの主な結論は二つある。一つは低温になるにつれて拡散運動をする中性ソリトンの数が減る。不純物に捕らえられるものが増えるわけだ。第二にまだ動いている中性ソリトンの拡散係数を求めると、論文⁽¹⁰⁾ の結論と同じく、式(1)の温度変化をしている。

その後、新しいポリアセチレンの製法が次々と開発され、新種の試料が提供された。それをういてソリトンの運動の研究を精力的に続けたのは都立大のグループである^(12,13)。このグループの研究結果によっても論文⁽¹¹⁾ の結論は大筋で動いていない。つまりポリアセチレンのソリトンは温度が高いほど動きやすい。その拡散係数は式(1)の温度変化を示し、その比例係数の大きさもほぼ論文⁽³⁾ で与えられたものの程度である。

5. ソリトンと格子振動

ポリアセチレンのソリトンの拡散運動について以上のように活発な研究が続いていたが、われわれがそれに参加することをためらっていた理由は、論文⁽⁴⁾ に示したように量子効果によって拡散係数は低温域で T^2 ではなく、それよりずっと早く小さくなることを知っていたからである。しかしこれだけ研究が多くなると、 ϕ^4 模型だけでは知らないとはいえなくなった。当時、大学院へ進学したばかりの若い人達に一仕事してもらうことにした。お手本は ϕ^4 の議論である。模型としてはSSH⁽⁹⁾ またはそれを扱いやすくしたTLM模型⁽¹⁴⁾ をとる。TLM模型とはtransポリアセチレンのA型とB型の境界であるソリトンの幅にくらべて隣り合う二つの(CH)グループの間

隔が非常に小さいとしてSSHを単純化した連続体模型である。この単純化のおかげでソリトンの形と電子が住んでいる家の形を初等関数で表すことができた。

ϕ^4 ではソリトンがいるときの格子振動の形もソリトンの近くに局在する二つのモードを含めてすでに分かっていた。つまり数式で表されていた。ポリアセチレンではTLMでさえソリトンの形しか式では表されていない。格子振動の形からしてコンピューターで数値的に決めなければならない。格子がソリトンだけがいる状態からほんの少しずれてそのずれが振動しているとすると、そのために電子の住む家の形もごく少しずれて振動する。弱い地震のために家がゆれているわけだが、ほんとうの地震との違いは家がゆれること自体が地震の原因になっていることである。この因果関係を解明するとこの振動の波長と振動数の関係がわかる。

話が複雑なのでコンピューターで扱えるかどうか心配だったが、ポリアセチレンが一次元系であることが幸いして結果を出すことができた⁽¹⁵⁾。一次元系は百個の原子を並べればかなり長い長さになるが、二次元系だと百個の原子では一辺あたり十個になり面積が狭すぎる。一辺あたり百個にすると全体で一万個要る。三次元系にでもなるとこの個数の増え方はさらに烈しくコンピューターも疲れてくる。

この計算で新しく分かったことが二つあった。一つはソリトンの近くに局在する格子振動が ϕ^4 のように二種類ではなく三種類あることだ。その一つは振動数ゼロのゴールドストーンモードで、第二は体系全体に広がる格子振動のうち一番低い振動数の0.85倍のもので、この二つは ϕ^4 のものに対応する。新しいのが三番目で振動数は0.98倍と1に近く、はじめはこれがあるのかないのかをめぐって議論になったほどである。

最初と三番目はソリトンについて対称で、二番目は反対称である。対称なものは赤外活性で、赤外線を吸収することによってその振動をつくり出すことができる。反対称なものはRaman活性で、ある波長の光を吸収し、より長い波長の光を放出することによってその振動をつくれる。1987年に光誘起吸収という実験でこの第三モードをみつけたという報告があった⁽¹⁶⁾。赤外線の波長を変えながらその吸収度を測る実験をソリトンがいるときといないときの両方で行いその差を見る。ソリトンをつくるためにはもう一つの波長の短い光をあてる。その光をあ

てたことによる光の吸収の変化を観測するので光誘起吸収という。Raman散乱についてはポリアセチレンに光励起されたものがソリトンなのか、あるいは、ここでは議論しないが、ポーラロンと呼ばれるものなのかを区別する手段として有効であることを指摘したが⁽¹⁷⁾、実験としては難しいようでまだやられたという話を聞かない。

論文⁽¹⁵⁾でのもう一つの知見は、ソリトンの近くに局在する格子振動ではなく体系全体に伝わる格子振動についてである。その格子振動がソリトンに衝突しても反射波はできないというのである。一般に波は障害物のような不規則な場所を乗り越えて進むと波長は変わらないが位相が変わる。不規則さがなければ山であったところが谷になったりする。これは位相のずれと呼ばれて、不規則さによる波の変化を表す大切な量である。計算の結果ソリトンについて対称な波と反対称な波の位相のずれは広い波長領域にわたって等しかった。このことは反射波がないことを意味しているのである。

しかし解析が精密になるにつれ局在モードの数と広がったモードの位相のずれの間には関係があることがわかった。対称な局在モードが二つあるから対称な広がったモードのずれは波長が長い極限で 3π になり、反対称な局在モードは一個だから反対称な広がったモードのずれは同じ極限で 2π にならなければならない。従って波長が長い所でその二つの間には差が出る。実際より精密な数値計算の結果この事実が確認された⁽¹⁸⁾。

このことは長波長の格子振動との衝突によってその振幅の一次の過程でソリトンに運動量が移り走り出すということである。ポリアセチレンのソリトンは ϕ^4 のソリトンに比べて一段とソリトン性が低いといえよう。

このように理論解析の方はその大部分がコンピュータシミュレーションであった。それならば出発点にTLM模型をとらずにもとものSSH模型をとり、格子振動がないときのソリトンや電子の家の構造からして数値的に決めた方がよい。この考えで議論をやり直したのが論文⁽¹⁹⁾である。その結果それ以前の結論が確認され、議論のあいまいさがなくなった。そしてそれ以後の研究にしっかりした基礎を与えたのである。

ポリアセチレンでのソリトン-格子振動衝突は振幅の一次では長波長部分を除いてソリトンに影響はなかった。 ϕ^4 ではソリトンのブラウン運動は二次で起こった。ポリアセチレンでも同様に二次で起こるのではないかと期待

された。これを実際に示したのが論文⁽²⁰⁾である。二次過程の計算は一次過程より数段複雑であるが見通しよく結果が求まり、ソリトンのブラウン運動での歩幅は ϕ^4 のその数倍であることが分かった。互いに独立な系であるから本来は比べられないのだが、ソリトンの幅とか広がった格子振動の最低振動数とか共通する量は等しいとして比べたのである。

この結果から論文⁽³⁾に従って拡散係数を求めると低温で T^2 に比例する。しかしこれには論文⁽⁴⁾の指摘があまり格子振動を量子化すればずっと小さくなる。

一方 ϕ^4 とポリアセチレンに共通な格子振動によるソリトンのブラウン運動は理論上の問題を提起した。我々が日常使う電気は電力会社から電流として供給されている。電流は電子が動いて流れる。つまり電子が電流を運んでいるわけだ。このように電気とか熱とかが流れ動く現象を輸送現象と呼ぶ。ソリトンが動くのもこの一種である。ところで輸送現象には一般に成り立つと信じられている原則がある。ゆらぎと散逸の原理 (fluctuation-dissipation theorem) というが、電流の例でいえば、その散逸、つまり電流に対する抵抗は電流が平均値の周りに変化していることによるという。この変化をゆらぎという。つまり電気抵抗が出るためにはゆらぎが必要で、ゆらぎがあれば抵抗ができてエネルギーが散逸する。

もともとこの原理は花粉のブラウン運動の研究から導かれたものである。花粉のジクザク運動が位置のゆらぎを与え、それが花粉の運動に対する抵抗を決める。ジクザク運動は前に述べたように水の分子が衝突して運動量を花粉に渡すため花粉が動き出すが、水自体の抵抗によりその運動量が減りやがて止まるといふ現象である。このことからジクザク運動と抵抗の間には関係があるのは自然なことが想像できる。

ところが二次過程でのソリトンのブラウン運動では格子振動はソリトンに運動量をわたさない。衝突した格子振動はソリトンを通り抜けると同じ運動量をもって動きつづける。ソリトンは一歩動くが抵抗によって止まるのではない。格子振動との引力の相互作用が衝突の前後で向きが変わるのでちょうど相殺することによって止まる。このブラウン運動はゆらぎはあるが散逸がないように見える。これはゆらぎと散逸の原理の例外なのだろうかという問題が提起されたのである。

この問題に対する解答の手がかりを与えたのは論

文⁽²¹⁾である。ブラウン運動をしている花粉に対する抵抗は普通は時間によらない一定値をもつと考えられているが、一般化して考えると時間によっているだろう。言い換えるとそれはいろいろな振動数成分からできている。振動数がゼロの成分が普通考える抵抗である。ゼロでない成分も同じように重要な役割を果たしている。そしてこの成分はゆらぎと散逸の原理を使って求めることができる。この手法を ϕ^4 ソリトンに適用すると振動数がゼロでないときの拡散係数、ダイナミカルな拡散係数を計算できる。この結果、温度が振動数より小さいときは T^2 に比例し、大きくなると $1/T$ に比例して減少することが見出された。後者は四次過程で運動量の交換が起こることによる。

この分析をポリアセチレンに適用したのが論文⁽²²⁾である。ダイナミカルな拡散係数は温度が振動数より小さいとき T^2 に比例し、大きくなると温度によらなくなる。これは運動量の交換が一次過程で起こっていることによる。

ゆらぎと散逸の原理とソリトンのブラウン運動の間には矛盾はない事が分かったが、そのかわり、導入された振動数の大きさは何が決めるのかという問題が残った。もし実験が何かを示唆しているとすればこの振動数は温度にして100度程度でなければならない。ESRの交流磁場の振動数は桁違いに小さい。現在のところこの問題についてはよい考えがない。

以上のようにポリアセチレンのソリトンと格子振動の光学的性質を解析することについては成果があったが、ソリトンの拡散運動についてはあまり進歩がなかった。

6. おわりに

最後にソリトンの拡散運動を理解する可能性について二三述べておこう。

§3でSSH模型の話をした。そこでは、電子—格子相互作用は隣接する(CH)グループの間隔が狭くなったり広くなったりするので、電子が飛び移りやすくなったり飛び移りにくくなったりすることから生じた。このように隣接する原子の間隔の時間変化が早い振動が波として伝わる格子振動を光学型という。図2に示した*trans*型のように短い二重結合と長い一重結合が交互に並ぶのは光学型振動と電子の相互作用が有力な原因の一つであるので、SSH模型ではこの格子振動だけを考慮して模型を簡単に

したともいえるのである。一般に光学型の格子振動はどの波長をとっても振動数がゼロにならないのが特徴である。ということはそれを励起しようとしたらゼロでない大きさのエネルギーが要る。熱で励起しようとしたら振動数に対応する温度まで熱することが必要である。その温度以下では振動はほとんど励起されない。

拡散係数の T^2 依存性を説明するには低温でも励起しているものがあることが必要だ。格子振動の中では音響型という成分がこれにあたる。光学型のように (CH) グループの間隔が次々と変わるのではなく、ゆっくりと変わり、そのパターンが伝わるもので波長が長い極限で振動数がゼロになるのが特徴である。そのため温度が低くなくてもある程度熱励起をする可能性をもつ。

しかし音響振動の効果を分析しようとするといろいろな困難にぶつかる。SSH模型は上に述べたように光学振動を取り入れたものだが、各(CH)グループを原子のように扱いポリアセチレンを一本の鎖とみなしたために、実は音響型との相互作用も少し入っている。連続体近似をすると振動部分は完全に光学型のみとなりTLM模型に単純化する訳だが、音響型との相互作用はそのときに落とされた部分、言い換えるとTLMの補正項の中にはいつている。ただ補正項であるから電子との相互作用は弱い。

また音響型は波長が長いのでおそらく一本のポリアセチレン鎖だけとったのでは物理的ではないだろう。その波は周りのかなりの数のポリアセチレン鎖にわたって広がっているに違いない。それを考慮するとしたらポリアセチレンの模型自体を作り直さなければならないだろう。そのような模型でソリトンの描像を果たして残せるのかどうかは見通しはない。一本の鎖を考えている限りソリトンははっきりしたイメージをもてるが、多くの鎖といっしょに考えると微妙な問題が多くある。これは大切な問題なのだが難しい問題でもあり、ソリトン拡散の問題を越えた大きなものである。

仮に音響型振動の効果を分析できる模型ができたとしても、それとソリトンの相互作用で、ソリトンが高温ほど動きやすくなるかどうかは保証の限りでない。結論を一言でいえば、理論ではまだ何も分かっていないといえる。

一方の実験は1995年の都立大学の論文⁽¹³⁾で全世界的に終っている。ソリトンの拡散係数は今でも T^2 に比例しているのだ。

話の終りになぜこの問題にこれほど執着するのかを説明しておこう。 T^2 はともかくとして、温度が高いほど動きやすいものはそう沢山はないのである。だいたい逆で高温ほど運動を妨げるものが出てきて動きが鈍くなる。たとえば金属の電気抵抗は温度が上がると増加するが、これは温度が上がると格子振動が熱励起され、それが電流を担う電子と衝突して電子の運動を妨げるからである。電子やソリトンのような担い手にとって環境はふつう不親切でともすれば足を引っ張られる。温度が上がるとということは環境が活発になるということだから足もより活発に引っ張られるわけだ。その中で親切に後押しをしてくれる人というのは貴重な存在なのだ。そのような人がいなければ高温ほど動きやすいソリトンはありえない。だからその親切な人を探そうという試みが一時盛んだったのにその後暫く絶えてしまったのは残念でならない。

研究というものがどのようにして始まるかについては、皆興味がありそれについての研究もある。研究がどのようにして終るかはそれほど興味を引かないようである。研究が大きな成果をあげると大勢の研究者がその分野に参入してますます活発に研究されるのが普通である。だからその研究は終らない。研究が終るのは研究者がその分野に興味を失ったときである。問題自体に価値がなくなった場合は終るのは当然であるが、価値があってもないと誤解されたか、あるいは問題が難しすぎてアイデアがなく時間がたつうちに忘れられた場合とかは残念としか云いようがない。

学問の分野でもある研究がはじまり盛んになりやがて衰えて忘れられるありさまを見ると、服飾や建築などの流行の世界に似ていると感じざるを得ない。流行の始まりと終了には必ずしも客観的な原因はあるまい。人々の興味を得るか失うかできまるのだから。その世界では何十年かたつと同じデザインが復活することがよくある。学問の分野でも研究が復活することがあるとすれば、ソリトンの拡散問題もやがては解明されるかもしれない。おそらく同じように解明を待っている沢山の問題が学術雑誌の中に論文として埋もれているのだろう。この小文がそれらの復活のきっかけとでもなることができればこれ以上の喜びはない。

参考文献

- (1) J. A. Krumhansl and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev. B* 11 (1975), 3535.
- (2) T. R. Koehler, A. R. Bishop, J. A. Krumhansl, and J. R. Schrieffer, *Solid State Commun.* 17(1975), 1515.
- (3) Y. Wada and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev. B* 18(1978), 3897.
- (4) Y. Wada, *J. Phys. Soc. Japan* 51(1982), 2735.
- (5) H. Ishiuchi and Y. Wada, *Prog. Theor. Phys. Supplement* 69 (1980), 242.
- (6) H. Shirakawa and S. Ikeda, *Polym. J.* 2(1971), 231.
- (7) C. K. Chiang, C. R. Fincher, Jr., Y. W. Park, A. J. Heeger, H. Shirakawa, E. J. Louis, S. C. Gau, and A. G. MacDiarmid, *Phys. Rev. Letters* 39(1977), 1098.
- (8) B. R. Weinberger, J. Kaufer, A. J. Heeger, A. Pron, and A. G. MacDiarmid, *Phys. Rev. B* 20(1979), 223.
- (9) W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, *Phys. Rev. Letters* 42 (1979), 1698.
- (10) M. Nechtschein, F. Devreux, R. N. Greene, T. C. Clarke, and G. B. Street, *Phys. Rev. Letters* 44(1980), 356.
- (11) M. Nechtschein, F. Devreux, F. Genoud, M. Guglielmi, and K. Holczer, *Phys. Rev. B* 27(1983), 61.
- (12) K. Kume and K. Mizoguchi, *Prog. Theoret. Phys. Supplement* 123(1993), 91.
- (13) K. Mizoguchi, S. Masubuchi, K. Kume, K. Akagi, and H. Shirakawa, *Phys. Rev. B* 51(1995), 18864.
- (14) H. Takayama, Y. R. Lin-Liu, and K. Maki, *Phys. Rev. B* 21(1980), 2388.
- (15) H. Ito, A. Terai, Y. Ono, and Y. Wada, *J. Phys. Soc. Japan* 53 (1984), 3520.
- (16) Schaffer, R. H. Friend, and A. J. Heeger, private communication (1987).
- (17) A. Terai, Y. Ono, and Y. Wada, *J. Phys. Soc. Japan* 58(1989), 3798.
- (18) Y. Ono, A. Terai, and Y. Wada, *J. Phys. Soc. Japan* 55 (1986), 1656.
- (19) A. Terai and Y. Ono, *J. Phys. Soc. Japan* 55(1986), 213.
- (20) A. Terai, M. Ogata, and Y. Wada, *J. Phys. Soc. Japan* 55(1986), 2296.
- (21) M. Ogata and Y. Wada, *J. Phys. Soc. Japan* 55(1986), 1252.
- (22) M. Ogata, A. Terai, and Y. Wada, *J. Phys. Soc. Japan* 56 (1987), 3220.