

連続・不連続相転移におけるソフトモード

日本電気株式会社 中央研究所

松野 孝一郎

(10月17日受理)

ある物質系に対する外部環境が定まった時、その物質系が安定に存在し得る相も決定されている。一方、外部環境を規定するもの(多くの場合は温度であるが)が変化し、ある閾値を超した場合には、閾値以前で安定に存在し得た相がもはや安定に存在し得なくなり、新しい安定な相が現われてくることがある。簡単のため閾値温度 T_{th} が存在し、温度が $T > T_{th}$ の範囲では物質系の相はA-相、 $T < T_{th}$ ではB-相にある場合を考察する。温度が $T > T_{th}$ を満足する限り安定な相はA-相であるが、安定なA-相がB-相を励起する励起エネルギーは T_{th} に近づくと減少してくる。この励起は一般に相転移にともなうソフトモードとして知られている。

平均場近似に従うならば、温度が減少するにつれソフトモードの周波数は $\omega \propto (T - T_c)^{1/2}$ なる温度特性を有している。 T_c は不連続相転移(例、液体-固体相転移)の場合、転移の閾値温度 T_{th} とは異なるが、連続(二次)相転移の場合は T_{th} と一致している。 T_c は熱力学安定性の極限点として定義されているものである。

相転移点近傍では集団現象、協力現象が支配的であるため、ソフトモード自体その影響を受けている。平均場近似の範囲内では幾多の例で指摘されている様に相転移点近傍で固有な集団現象、協力現象を十分にとり入れていない。本報告では、この集団現象、協力現象を積極的にとり入れることによってソフトモードのスペクトルを求めている。平均場近似では $\omega \propto (T - T_c)^{1/2}$ なる温度特性を有するソフトモードが、集団、協力効果をとり入れた場合 $\omega \propto (T - T_c)^{1/3}$ と修正されることを最終的に指摘している。但しソフトモードの波数が0でない場合である。

ソフトモードのスペクトルを求める際連続相転移と、不連続相転移とでは前述の様にその特性が異なるが、不連続相転移において過熱、過冷却の存在を認めれば、連続相転移と並行した議論を行うことが出来るとの見方をここでは採用している。高温側から転移点に近づく場合を考えているので不連続相転移に過冷却の状態があるものとする。過冷却の状態がない場合は後で改めて議論する。

ソフトモードとしては波数0のもの, 0でないものがある。ここでは波数が0でないものを考える。反強磁性体相転移, ブリルユアンゾーン端のフォノンの凍結する強誘電体相転移, それに液体-固体相転移がこれに含まれている。以下の議論では液体-固体相転移を例として考え, 過冷却の存在を認めるものとする。

液体中のスペクトルは, 一般に, 0でないある波数 q_c の所でその励起エネルギーが局所極小となる構造を有している。この局所極小は静的構造因子が q_c の近傍で局所極大になっていることに対応している。液体を構成している粒子が自由粒子である場合 q_c の所でのエネルギーは $\hbar^2 q_c^2 / 2m$ となるが (m は粒子の質量), 観測されている励起の励起エネルギーは波数 q_c の所で $\hbar^2 q_c^2 / 2m$ より小さい。このことは波数 q_c の近傍で励起が引力的に相互作用していることを示している。即ち0でない束縛エネルギーがあるために自由粒子のエネルギーより一自由度あたりの励起エネルギーが小さくなっている。波数が q_c の近傍の励起を簡単のため LM-励起と呼ぶことにする。LM-励起は相互に引力的に相互作用している。

温度が液体-固体相転移の閾値温度 T_{th} ($\sim T_c$) より十分大きい時, LM-励起の励起エネルギーを $\omega_{LM}^{(0)}$ としてその相互作用エネルギーを $V_{LM}^{(0)}$ とする。LM-励起間の引力的相互作用により一対の LM-励起は一つの (準) 束縛状態を作ることが出来, そのエネルギーは $2\omega_{LM}^{(0)} - |V_{LM}^{(0)}|$ となる。温度が減少するにつれ熱的擾乱の温度が低下し, 互いに位相がそろって引力的に相互作用する LM-励起の数も増加する。 n 個の LM-励起が束縛状態を作ったとするならば, その束縛状態のエネルギー E_n は $n\omega_{LM}^{(0)} - n^2 |V_{LM}^{(0)}|$ の程度になる。液体がこの束縛状態の生成に対して安定に存在し得るためには $E_n > 0$ でなければならない。さもなければ液体は n 個の LM-励起による束縛状態の生成に対して不安定になるからである。 n 個の LM-励起の束縛状態の出現により液体が不安定となる n の閾値 n_c は $n_c \sim \omega_{LM}^{(0)} / |V_{LM}^{(0)}|$ の程度である。温度が減少すれば位相がそろった状態で相互作用をする LM-励起の数 $n(T)$ は増加する。よって液体は $n(T_c) = n_c$ を満足する温度 T_c 以下では安定に存在し得ない。

上記の現象論に基き次の推論を導く。即ち, 液体-固体相転移は温度 T_c において生起し, 波数 q_c の LM-励起の励起エネルギー $\omega_{LM}(q_c)$ は T_c において0となる。さらに $T < T_c$ の固体相では周期が π/q_c で与えられる構造が現われる (あらかじめ断った様に過冷却の存在を認めている)。この LM-励起がソフトモードである。 $T < T_c$ では波数 q_c のソフトモードが凍結することにより π/q_c の周期を持った構造が

現われるとしたが、この解釈は Schneider の動的構造因子による解釈と矛盾するものではない¹⁾。

ソフトモードである LM-励起のスペクトルを求めるためにはそのプロパゲータを求めればよい。裸の LM-励起のプロパゲータを \longrightarrow で表わし、二ケの LM-励起が位相をそろえて相互作用し準束縛状態を作る所まで考慮に入れることによって再規格化された LM-励起のプロパゲータ \longrightarrow は次の Dyson 方程式の解で与えられる。

$$\begin{aligned} \xrightarrow{(2)} &= \xrightarrow{(2)} + \xrightarrow{(2)} \text{---} \Sigma_{(2)} \text{---} \xrightarrow{(2)} \\ \Sigma_{(2)} &= \text{---} \square \text{---} + \text{---} \square \text{---} \square \text{---} + \text{---} \square \text{---} \square \text{---} \square \text{---} + \dots \end{aligned} \quad (1)$$

ここで \square は引力的な相互作用の核である。プロパゲータ $\xrightarrow{(2)}$ は二ケの LM-励起が位相をそろえて相互作用する効果までをとり入れているが、すでに指摘した様に、温度が低下するにつれ位相をそろえて相互作用する LM-励起の数は増加する。転移点の近くでは位相のそろった相互作用を可能な限り考慮に入れなければいけない。その様な場合の再規格化された LM-励起のプロパゲータ \Rightarrow は近似的に次のブートラップ方程式で与えられる。

$$\begin{aligned} \Rightarrow &= \xrightarrow{(2)} + \xrightarrow{(2)} \text{---} \Sigma \text{---} \Rightarrow \\ \Sigma &= \text{---} \square \text{---} + \text{---} \square \text{---} \square \text{---} + \text{---} \square \text{---} \square \text{---} \square \text{---} + \dots \end{aligned} \quad (2)$$

この方程式を T_c の近傍で解くことにより $\omega_{LM}(q_c) \propto (T - T_c)^{1/3}$ を得る。ただしこの場合相関距離 ξ は T_c が近づくにつれ $(T - T_c)^{-2/3}$ の形で発散するという結果を用いている。 $\xi \propto (T - T_c)^{-2/3}$ の関係は転移点近傍での波数の小さい集団励起を求める際にすでに得られているものである²⁾。

液体-固体相転移は過冷却の状態を経ずして準安定な状態へ不連続的に転移することが多くの場合に認められている。ソフトモードの周波数は温度の減少と共に $(T - T_c)^{1/3}$ の形で減少するが、 T_c に達する以前、 $T = T_{th} (> T_c)$ の所で不連続的に準安定

状態である固体相に転移すると考えられる。一方連続転移を行う反強磁性体，強誘電体については，ソフトモードの周波数が0となる所で転移が行われる。

参 考 文 献

- 1) T.Schneider, Phys. Rev. A3, 2145 (1971)
- 2) T.Matsuno, Submitted to J.Phys. Soc. Japan

MODE - MODE COUPLING 理論

京大教養 川 崎 辰 夫

(10月17日受理)

はしがき

van Hove - Onsager にはじまる臨界緩和理論によれば，通常緩和時間 τ は $\tau^{-1} = L/\chi$ で与えられる。臨界異常は Critical Slowing Down (以下CSD 又はSD と略記する) の名で呼ばれ，それは帯磁率 χ の異常性の反映として理解されOnsager 係数 L は温度に鈍感な量と仮定されて来た。しかし実験技術の向上(磁性体に限って言えばとりわけ中性子非弾性散乱実験の精密化)と共に L は時間空間の局所的な性質に強く依存するばかりでなく，臨界異常に大きな役割を果している事が判ってきた。この段階で“相転移の本質は” Order Parameter の示す長波長のゆらぎ”にあるという知識を Full に活用し，臨界異常性のみを抽出した理論が提案された。これが Dynamic Scaling 理論(以下DS と略記)である。DS は相関距離を与える k ，時間的特性を与える Ω_k という2つの量を用いて $(S_k(t), S_k^*) = \kappa^{\frac{L}{\nu}} F(\Omega_k t, k/\kappa)$ ， $\Omega_k = \kappa^\theta G(k/\kappa)$ の2式を満す Scaling Function F, G 及び指数 θ が存在するという仮説である。DSは極めて簡単な仮定から ① 特定の系の性質にとらわれない一般的枠組の中で臨界異常をとらえ得る。② 実験事実とよく符号する。という利点から広く普及した。 θ のみを定める実験は枚挙にいとまもないが， F, G, θ を同時に見事に与えた MnF_2 や $Rb Mn F_3$ 等の実験事実がある。しかしながら ①' F, G, θ を自