

である。とくに、soft mode と acoustic mode の結合による強く温度による弾性率の効果が問題であると考えられる。弾性率の温度変化による Debye 温度の温度変化から、比熱の異常部分の約半分程度がこれによっていると考えられることから、この部分の比熱への寄与をとりぞくことは慎重になされなければならない。その解析は、現在検討中である。

最後に、dynamic form factor におけるセントラル・ピークに関して少しふれる。実験的には中性子非弾性散乱によりその存在が確められている。その正確な幅に関しては、中性子非弾性散乱の分解能のためによくわかっていなかったが、 SrTiO_3 において Müller らは ESR の幅の解析により、 T_c の上の一つの温度でセントラル・ピークの幅を算出している。われわれは KMnF_3 の超音波分散の測定より、例えば、セントラル・ピークの幅は転移点より 1K 上で 20 MHz, 4K で 170 MHz と、critical slowing-down をみいだした。このことは中性子非弾性散乱の結果の解析の際などに使われているセントラル・ピークをもつ dynamic form factor を与える分散式がよいことを示している。現在のところ、perovskite 型結晶の structural transition におけるセントラル・ピークに関する理論で、比較的その導出にむりのないものとしては、Silberglitt による soft mode の 2 次と acoustic mode の 2 次との結合からもとめたものと、Schwabl による soft mode の 4 次の項からもとめたものがあるが、まだ、実験結果との対応はあまり検討されていない。

今後の問題である。

小林模型の動的性質

高田^{*} 慧^{*} 大成逸夫^{**} 黒沢秀夫^{**} 大村能弘^{***}

圧電性を有する KDP 型強誘電体ではソフトモードと TA フォノンが結合して、音速 0 となる。吾々は小林模型¹⁾ を一般化しプロトン系に TO 及び TA フォノンを結合させ、松原グリーン関数を用い、分子場近似を無擾動として、擾動法で調べた。²⁾ ハミル

トニアンは、

$$H = \left(-2\Omega \sum_i X_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} Z_i Z_j \right) + \frac{1}{2} \sum_{q,\lambda} (P_q^\lambda P_{-q}^\lambda + (\omega_q^\lambda)^2 Q_q^\lambda Q_{-q}^\lambda) - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q,\lambda} F_q^\lambda Q_q^\lambda Z_{-q}. \quad (1)$$

ここで $\lambda = 0, a$ は各々 TO 及び TA フォノンを表わす。スピングリーン関数を計算する場合、フォノンの影響は $\omega_n (= 2\pi nT)$ に依存するスピン間の有効相互作用に $\tilde{J}_q(i\omega_n)$ としてくりこまれる；

$$\tilde{J}_q(i\omega_n) = J_q + \sum_\lambda |F_q^\lambda|^2 / (\omega_q^{\lambda^2} + \omega_n^2) \quad (2)$$

このことより第一近似 RPA²⁾ では各モードの周波数 ω を定める式はフォノンを考慮しないプロトン系の周波数 ω を決定する式³⁾ の中で J_q を $\tilde{J}_q(\omega)$ に置き換えたものとなる；

$$\omega^2 - W(W - \sin^2 \theta \langle S^z \rangle \tilde{J}_q(\omega)) = 0 \quad (3)$$

$$W = \sqrt{(2\Omega)^2 + (\tilde{J}_0(0) \langle Z \rangle)^2}, \quad \sin \theta = 2\Omega/W.$$

(2) (3) より 3つのモードの周波数 $\tilde{\omega}_i(q)$ は、

$$\tilde{\omega}_1(q) \approx \omega_q^0, \quad \tilde{\omega}_2^2(q) \approx \omega_p^2(q) = a_\pm (|T - T_c| + \Delta T_\pm) + O(q^2)$$

$$\tilde{\omega}_3(q) \equiv \tilde{v}_q + O(q^2) \quad (4)$$

\tilde{v} はくりこまれた音速で、

$$\left(\frac{\tilde{v}}{v}\right)^2 = \frac{W(W - \sin^2 \theta \langle S^z \rangle \tilde{J}_0(0))}{W(W - \sin^2 \theta \langle S^z \rangle \tilde{J}_0(0)) + \sin^2 \theta \langle S^z \rangle W(F_0^a / \omega_0^a)^2} \quad (5)$$

脚注) * 東教大・理, ** 神奈川大・工, *** 東工大・理

\tilde{v} は (5) より $T=T_c$ で 0 になるが T_c 近傍で、

$$\left(\frac{\tilde{v}}{v}\right)^2 = \frac{|T-T_c|}{|T-T_c| + \Delta T_{\pm}} = 1 - \frac{1}{(|T-T_c|/\Delta T_{\pm}) + 1} \quad (6)$$

と書ける。ここで ΔT_+ , a_+ は $T > T_c$ の値, ΔT_- , a_- は $T < T_c$ の値を表わす。

以上の結果は KDP の実験結果と良く一致する。先ず (6) より $(\tilde{v}/v)^2$ を画くと T_c で 0 をとり, T_c より ΔT_{\pm} 離れたところに漸近線を有する直角双曲線の一部となっていて, T_c の上下で形は同じでそのスケールだけが ΔT_+ と ΔT_- と異なっている。Brody-Cummins の結果⁴⁾ をこの曲線に合わせると $\Delta T_+ \simeq 4^\circ\text{K}$, $\Delta T_+/\Delta T_- \simeq 11^\circ\text{K}$ となる。一方, Kaminow-Damen⁵⁾ によるとソフトモードの周波数 $\tilde{\omega}_2$ が 0 になる前に, T_c で \tilde{v} が 0 となるが, 外挿して $\tilde{\omega}_2$ が 0 になる温度 T_{c0} と T_c との相違 $\Delta T_+ (= T_c - T_{c0}) \simeq 5^\circ\text{K}$ となっている。又 $\Delta F_+/\Delta T_-$ は (5), (6) 及び $\langle Z \rangle$ を定める式を用いると, $\Omega/\tilde{J}_0(0)$ の関数として書けるが, 実験値 $2\Omega \simeq 99\text{cm}^{-1}$ (Kaminow-Damen) と $T_c \simeq 122^\circ\text{K}$ より $\Delta T_+/\Delta T_- \simeq 10$ となる。

吾々の摂動展開は Force range の逆数の展開となっているが, 高次の計算に当たっては RPA をくりこんだ相互作用 $\tilde{J}_q(i\omega_n)$ を用いることになる;

$$\tilde{J}_q(i\omega_n) = J_q + \sum_{i=1}^3 A_i(q) / (\tilde{\omega}_i^2(q) + \omega_n^2) \quad (7)$$

この \tilde{J}_q の最低次で TA フォノンの減衰常数 Γ_k^a を計算すると, $\Gamma_h^a \propto k^4 |T-T_c|^{-4}$ となって attenuation $\alpha \propto \omega^4$ となり実験と合わない。然し, TA フォノンの非調和項 ($\propto Q^a Q^a Q^a$) を第一ボルン近似で扱うと $\alpha \propto \omega^2 |T-T_c|^{-5/2}$ となって実験結果を説明することができる。

参 考 文 献

- 1) K.K.Kobayashi : J.P.S.J. 24 (1968) 497.
- 2) Vaks, Larkin and Pikin : Sov. Phys. JETP. 26 (1968) 188.

高田 慧・大成逸男・黒沢秀夫・大村能弘

- 3) M.Tokunaga : Progr. Theor. Phys. 36 (1966) 857.
- 4) Brody and Cummins : Phys. Rev. Letters 21 (1968) 1263.
- 5) Kaminow and Damen : Phys. Rev. Letters. 20 (1968) 1105.