

低次元系の相転移について

九大・理 太田隆夫

§1. はじめに

70年代に急速に発展した臨界現象の研究の中で、ここでは低次元系での相転移の理論の進展について述べる。相転移一般のレビューは鈴木増雄氏により、詳しくこの研究会で解説されている。低次元系の相転移のうち、所謂、Kosterlitz-Thouless 転移及びその周辺の話題を取り上げる。関係のある総合報告として文献1), 2), 3)がある。また、文献4)も参照されたい。

§2. 二次元古典スピン系

二次元格子上のスピン系のうち、最も単純化されたモデルが Ising モデルである。ハミルトニアンは次のように書かれる。

$$\mathcal{M} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (1)$$

ここに結合定数 J は正であるとする。和 $\langle i, j \rangle$ は最近接格子点のあらゆる対についてとられる。スピン変数 σ_i は格子点 i で $+1$ か -1 の値をとると仮定する。このモデルの状態和は Onsager により厳密に求められ、⁵⁾ 有限温度 (T_c とする) で二次転移を起こすことが示された。その後、いろいろな人々により他の物理量も計算されている。例えば、“自発磁化” $\langle \sigma_i \rangle$ は T_c より高温側ではゼロであり、 $T \lesssim T_c$ では

$$\langle \sigma_i \rangle \propto (T_c - T)^{1/8} \quad (2)$$

ここに、カッコ $\langle \dots \rangle$ はハミルトニアン(1)によるカノニカル平均を意味する。また、スピンの相関は $T = T_c$ でかつ、格子点 i と j が充分はなれているとき

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle \propto 1/(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^{1/4} \quad (3)$$

となる。ここに、 \mathbf{r}_i は i 番目の格子点の位置ベクトルである。転移温度からはなれると、スピン相関は二点の距離の関数として指数関数的に減少する。

ハミルトニアン(1)をスピン変数が連続的自由度を持つように拡張することができる。⁶⁾

$$\mathcal{M} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - h \sum_i \mathbf{S}_i \quad (4)$$

ここに、 \mathbf{h} は定ベクトル。 \mathbf{S} は N 成分(S_1, S_2, \dots, S_N)をもち $|\mathbf{S}|=1$ とする。素粒子の分野では(4)($\mathbf{h}=0$)の連続体表現をカイラルラグランジアンと呼ぶようである。系(4)は二次元以下では有限温度で有限の自発磁化をもたない。⁷⁾(熱力学的極限をとった後、 \mathbf{h} をゼロとする。)しかし、 $N=2$ のときは以下に述べるように新しいタイプの相転移が出現する。

§ 3. 二次元プレーナーモデル

ハミルトニアン(4)は $N=2$, $\mathbf{h}=0$ のとき $S_1 = \cos \theta$, $S_2 = \sin \theta$ とおくと次のように書ける。

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) \tag{5}$$

ただし、 $|\theta| \leq \pi$, この系のスピン相関 $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle$ を計算してみよう。充分低温では、 \cos 関数を引数で展開し二次まででとめ、かつ $|\theta| \leq \infty$ と近似すると

$$\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle = (a/R)^{\eta(T)} \tag{6}$$

を得る。ここに、 a は格子定数であり、 $\mathbf{R} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, また

$$\eta(T) = T/(2\pi J) \tag{7}$$

一方、充分高温では各格子点のスピンへの向きは乱雑であるから、スピン相関は R について指数関数的に減少するであろう。このことは有限温度である種の相転移が存在することを暗示する。⁸⁾帯磁率の高温展開による解析からも、異常性が存在するらしいと示唆されていたが、⁹⁾この転移の物理的描像はKosterlitzとThoulessにより与えられた。¹⁰⁾

§ 4. Kosterlitz-Thouless 転移

ハミルトニアン(5)を次のように簡単化しよう。

$$\mathcal{H} = \frac{J}{2} \int d^2 \mathbf{r} (\nabla \theta)^2 \quad |\theta| \leq \pi \tag{8}$$

(5)と(8)の違いは以下の議論に重要でない。

Kosterlitz と Thouless は図1のようなスピン配向に注目し、その熱力学的安定性を調べた。内部エネルギーは(8)より直ちに

$$E = \pi J \ln(R/a) \tag{9}$$

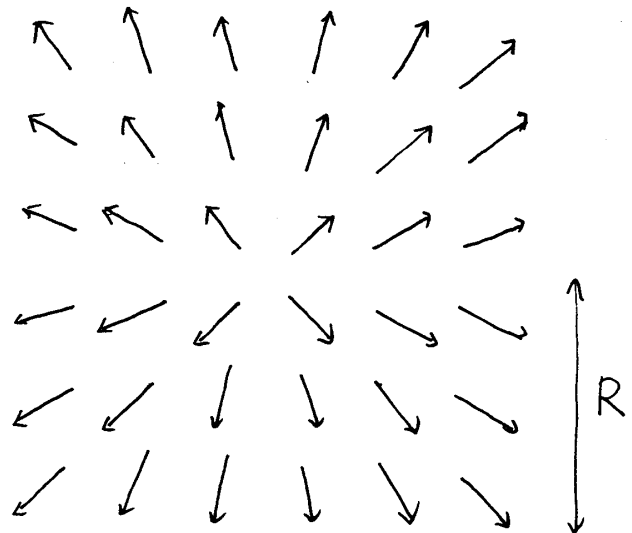


図1

太田隆夫

を得る。エントロピーは Boltzmann の原理により

$$S = \ln(R/a)^2 \quad (R \gg a) \quad (10)$$

と評価される。(Boltzmann 定数を 1 とする。)ここに、 $(R/a)^2$ は図 1 の配向の中心をどこに置くかという自由度を表わす。(9)と(10)より自由エネルギー

$$F = (\pi J - 2T) \ln(R/a) \quad (11)$$

を得る。つまり、 $T_c = \pi J/2$ より高温側では図 1 のような励起は熱力学的に安定である。(尚、この議論では、式(9)からわかるように、ミクロな長さ a の存在が本質的であることに注意。)従って、 T_c 近傍の系の性質をみるためには図 1 のような励起、あるいはもっと一般に、ある閉じたループにそって格子点を一周したとき θ が 2π の整数倍変化するような励起を考慮しなければならない。

ここで便利のため θ のかわりに $\mathbf{v} = \nabla\theta$ を導入する。図 1 に対応する \mathbf{v} を図 2 に与える。このとき $|\mathbf{v}| = 1/r$ である。以後、図 2 の励起を渦とよぶ。

\mathbf{v} を二つの部分にわけると

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_0 + \mathbf{v}_1 \quad (12)$$

ここに、 \mathbf{v}_0 はあるスカラー量 $\Phi(\mathbf{r})$ のグラジエントでかけるとする。 \mathbf{v}_1 は

$$\nabla \times \mathbf{v}_1(\mathbf{r}) = 2\pi n(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{z}} \quad (13)$$

を満たすように取る。ここに、 $\hat{\mathbf{z}}$ は考えている二次元面に垂直な単位ベクトル。 $n(\mathbf{r})$ は渦度密度、すなわち

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i n_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i), \quad n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (14)$$

を表わす。(13)の解はただちに得られ、それを(8)に代入すると

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \frac{J}{2} \int d^2\mathbf{r} (\nabla\Phi)^2 \\ & - \pi J \iint \frac{d^2\mathbf{r}}{a^2} \frac{d^2\mathbf{r}'}{a^2} n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}') \ln \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{a} - T(\ln y) \int \frac{d^2\mathbf{r}}{a^2} n(\mathbf{r})^2 \end{aligned} \quad (15)$$

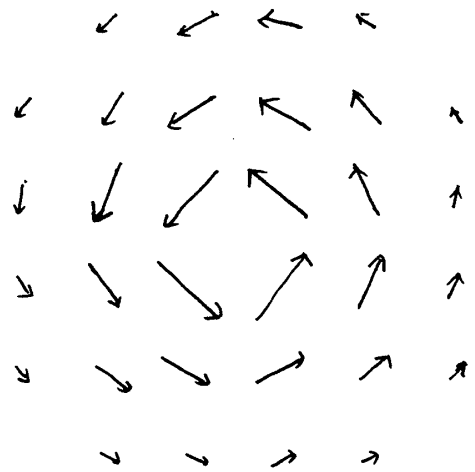


図 2

となる。¹⁰⁾第2項は渦間の相互作用を表わす。積分は $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|>a$ の領域に限られる。あとの議論のため

$$y = y_0 \exp[-cJ/T] \quad (16)$$

でパラメーター y_0 を導入する。 c は正の定数。以後、 n の値を $0, \pm 1$ に制限する。高次の励起は T_c の近傍で重要でないことが示せる。

以上でプレイナースピンの問題が二次元クーロンガス系に移された。また、二次元超流動との対応も明白である。Kosterlitz-Thouless 理論から4年後 (!) Kawabata と Binder により、実際にプレイナーモデルで渦の励起が存在することが、コンピューターシミュレーションで確かめられた。¹¹⁾(文献12)も参照)

この節ではプレイナーモデルからクーロンガス系への変換を直観に基づいて行なったが、より系統的な方法については文献13)及び14)を参照されたい。

§ 5. 繰り込み群による解析

クーロンガス系¹⁵⁾に繰り込み群の方法を適用し、 T_c 近傍での性質を定量的に議論したのはKosterlitz である。¹⁵⁾ここでは、誘電関数 $\epsilon(\mathbf{q})$ に対する繰り込み群方程式を求める。¹⁶⁾簡単のため波数 $\mathbf{q} = 0$ の場合を考える。

$$\hat{\epsilon}(\eta, y) \equiv \eta \epsilon(0) = \eta + O(y^2) \quad (17)$$

で $\hat{\epsilon}$ を導入する。 η は式(7)で定義されている。 $\hat{\epsilon}(\eta, y)$ を y に関する展開で求め、そののちマイクロな長さ a を $a e^{\ell}$ と変換すると、 y^2 のオーダーまでで

$$\hat{\epsilon}(\eta, y) = \hat{\epsilon}(\eta(\ell), y(\ell)) \quad (18)$$

を得る。ここに、 $\eta(\ell), y(\ell)$ は次の方程式 (Kosterlitz のゼン化式) に従う。

$$\frac{d\eta}{d\ell} = 2\pi^2 y^2 \quad (19)$$

$$\frac{dy^2}{d^2\ell} = \left(4 - \frac{1}{\eta}\right) y^2 \quad (20)$$

この方程式の解の流れ図は図3のようになる。 $T \leq T_c$ では

$$\hat{\epsilon}(\eta, y) = \hat{\epsilon}(\eta(\infty), y(\infty)) = \eta(\infty) \quad (21)$$

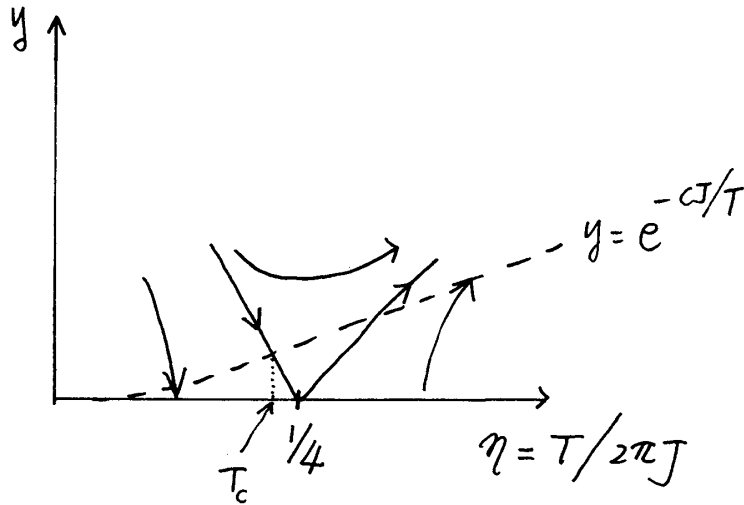


図 3

特に $T = T_c$ では $\eta(\infty) = 1/4$. 即ち, $T = T_c$ でプレイナーモデルのスピนว変数の異常次元はIsingモデルのそれ式(3)と一致する。 $T \geq T_c$ では波数を有限にしておく

$$\hat{\epsilon}(\eta, y, \mathbf{q}) \doteq c_1 + c_2/(q\xi)^2, \quad (q\xi \ll 1) \quad (22)$$

を得る。ここに

$$\xi \propto \exp[c_3(T - T_c)^{-1/2}] \quad (23)$$

c_1, c_2, c_3 は正の定数。(21), (22)からわかるように, クーロンガス系は T_c で「金属」-絶縁体転移を起こす。より高次の項を取り入れた計算については文献17)がある。自由エネルギーの異常部分は

$$F_{\text{sing}} \propto \xi^{-2} \quad (24)$$

となる。(23), (24)より $T = T_c$ で自由エネルギーは温度に関して無限回微分可能。これがKosterlitz-Thouless 転移の特徴の一つである。

ここで次のようなことを問題にしてもよいであろう。即ち, 二次相転移は ϕ^4 理論で, 統一的に理解された^{18), 19)}ならば, Kosterlitz-Thouless 転移を記述する普遍的なハミルトニアンは何か? sine-Gordon 系がその候補の一つである¹⁶⁾

§ 6. 二次元 sine-Gordon “ハミルトニアン”

30年程前から結晶成長の分野で結晶表面の不安定性にともなう転移が問題になっていた。roughening 転移と呼ぶが, これは, いかにも速く結晶を成長させるか, あるいはいかにして「な

めらかな結晶面を作るか等の実用上の要請とつながる問題であった。roughening 転移を記述する最も簡単化したモデルに離散的ガウスモデルがある。

$$\mathcal{M} = J \sum_{\langle i, j \rangle} (h_i - h_j)^2 \quad (25)$$

ここに、 h の値は整数に制限される。 $\langle i, j \rangle$ は結晶表面格子上での和を表わす。エネルギー

(25)の意味は図4から理解されるであろう。(図では一次元断面を記述している。) (25)がクーロンガス系に写されることはChuiとWeeksにより示された。²⁰⁾ここでは(25)をsine-Gordon型に変形する。(25)の状態和 Z を計算するとき、 h が離散的であるため、重み関数 $W\{h\}$ を導入しなければならない。

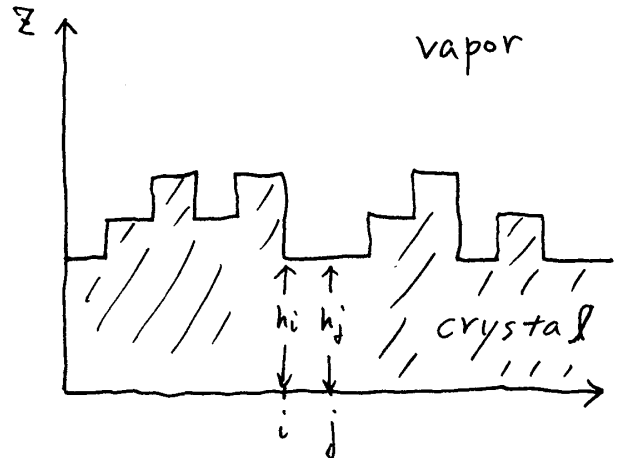


図4

$$Z = \int d\{h\} W\{h\} \exp[-\mathcal{M}] \quad (26)$$

今の場合、 $W\{h\}$ は周期的デルタ関数になる。この重み関数を

$$W\{h\} = 1 + 2g \cos 2\pi h, \quad |g| < 1/2 \quad (27)$$

で近似する。¹⁶⁾その結果、新しいハミルトニアン

$$\mathcal{M}_{\text{eff}} = J \sum_{\langle i, j \rangle} (h_i - h_j)^2 - \sum_i \ln(1 + 2g \cos 2\pi h_i) \quad (28)$$

を得る。(28)では h は実数の値をとる。第2項を g で展開し、連続体表現で書くと

$$\mathcal{M} = J \int d^2 \mathbf{r} (\nabla h)^2 - 2ga^{-2} \int d^2 \mathbf{r} \cos 2\pi h(\mathbf{r}) \quad (29)$$

となる。(文献21)も参照のこと)。sine-Gordon系(29)に繰り込み群変換をほどこすと(19)、(20)と同じ方程式を得る。^{16), 22), 2), 23)}ただし、 $\eta = J/\pi$, $y = g$ 。即ち、sine-Gordon型がKosterlitz-Thouless 転移と同じユニヴァサリティクラスに属することが直接的に確かめられた。

二次元古典的 sine-Gordon 系は一次元量子的 sine-Gordon 系、一次元フェルミオン系^{24), 25), 26)} massive Thirring モデル²⁷⁾等と少なくとも近似的に関係がある。しかし、このような横のつながりにはこれ以上深入りしない。

§ 7. 二成分 sine-Gordon 系

この節ではモデルの拡張及びその応用を議論する。Kadanoff は二つの成分（彼はそれらを電荷と磁気単極子と呼ぶ）をもつクーロンガス系を考え、プレーナーモデルのみならず、Ising モデル、eight vertex モデル、Potts モデル等をもその中に含ませようとする。²⁸⁾しかし、今だ、形式的な段階で充分成功しているとは言えない。

ここでは(29)で与えられる sine-Gordon 系を二成分場に拡張する。²⁹⁾この考えは Nelson の論文³⁰⁾に刺激された。ハミルトニアンを次のように書こう。

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 \tag{30}$$

$$\mathcal{H}_0 = \int d^2 \mathbf{r} \frac{1}{2} \left[\mu \sum_{\alpha, \beta} (\partial_\alpha h_\beta)^2 + (\mu + \lambda) \sum_\alpha (\partial_\alpha h_\alpha)^2 \right] \tag{31}$$

$$\mathcal{H}_1 = -2g a^{-2} \int d^2 \mathbf{r} \sum_{i=1,2,3} \cos 2\pi \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{h} \tag{32}$$

ここに、 $\mathbf{h} = (h_1, h_2)$ 、 \mathbf{e}_i ($i=1, 2, 3$) は二成分単位ベクトルで

$$\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3 = 0 \tag{33}$$

を満たすようにとる。 μ, λ は正の定数。ハミルトニアン(30)は物理吸着系に適用される。つまり、substrate が六角格子で吸着系が三角格子を組むとすると、(32)は近似的に、substrate と吸着された原子との相互作用を表わす。このとき、 $\{\mathbf{e}_i\}$ は吸着系の逆格子ベクトルに比例する。一方、 \mathcal{H}_0 は吸着系の弾性エネルギーを表わす。 \mathbf{h} は変位ベクトル、 μ, λ はラメ係数の意味をもつ。

物理吸着系でおこる転移については Nelson と Halperin により繰り込み群の方法で詳しく議論されている。³¹⁾ある種の条件下では次のような相変化が期待される。充分低温ではエフェクティブな(くりこまれた)結合定数 g_{eff} が無限に大きくなり吸着系は registered solid, 温度があがると $g_{\text{eff}} = 0$ となり floating solid, そして、もっと高温では shear modulus $\mu_{\text{eff}} = 0$ となり吸着系は融解する。

ハミルトニアン(30)は図5で示されている転移 T_1 に直接的に適用できる。²⁹⁾驚ろくべきことは(30)はもう一つの転移 T_2 をも記述してし

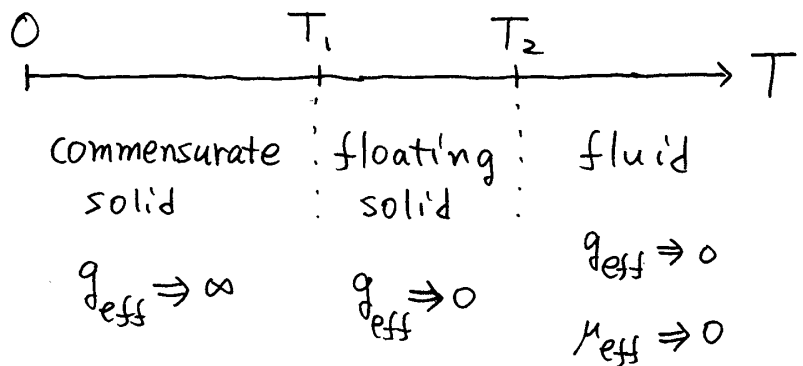


図5

まうことである。^{31), 29)} それをみるために(30)にデュアル変換をほどこそう。少なくとも g について最低次までで、(30)は次のように変換される。

$$\mathcal{H}_D = \frac{1}{8\pi} \sum_{\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'} \left[K_1 \mathbf{b}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{b}(\mathbf{r}') \ln |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| - K_2 \frac{\mathbf{b}(\mathbf{r}) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{b}(\mathbf{r}') \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} \right] - (\ln g) \sum_{\mathbf{r}} |\mathbf{b}(\mathbf{r})|^2 \quad (34)$$

ここに、 K_1 と K_2 は μ, λ の関数。また

$$\mathbf{b}(\mathbf{r}) = m(\mathbf{r}) \mathbf{e}_1 + n(\mathbf{r}) \mathbf{e}_2 \quad (35)$$

m, n は $0, \pm 1$ の値をとる。

(34)の型のハミルトニアンは転位理論でよく知られている。即ち、(34)は三角格子に生じた転位 (dislocation) 間の相互作用を表わす。 $\mathbf{b}(\mathbf{r})$ は転位のバーガスベクトルに他ならない。このとき \mathbf{e}_1 と \mathbf{e}_2 は三角格子ベクトルと解釈する。(逆格子ベクトルではない。) 転移点 T_2 の近傍の性質は(34)に繰り込み群を適用することにより Nelson, Halperin³¹⁾そして Young³²⁾により調べられた。

このように、二成分 sine-Gordon 系に拡張することにより、二次元系のさらに広い相転移現象をカバーする。尚、(30)を少し修正することにより、吸着系の整合不整合転移³³⁾に応用できることに注意しておく。

研究会では対称性を破る外場 (面内異方性) のあるプレイナーモデルを sine-Gordon モデルで扱う³⁴⁾ことにも言及したがここでは割愛する。

§ 8. 結 論

以上で、Kosterlitz-Thouless 転移及び関連する最近の理論的進展について述べた。二次元 sine-Gordon 系とそれを一般化したモデルは低次元系の相転移のかなりの部分を記述し得る。今後の問題の一つは、Kadanoff がクーロンガス系で試みたように、Ising モデルあるいは Potts モデル等を取り込めるかどうかである。これは吸着系の相転移を統一的にみる試み³⁵⁾と関連して重要であろう。

Kosterlitz-Thouless 転移の動的側面は、主として Halperin のグループで精力的に研究がなされているが本研究会では省略した。

この報告は川崎恭治先生との日常の会話から有形無形の影響を受けている。ここに感謝の意をあらわします。

太田隆夫

参 考 文 献

- 1) J.M. Kosterlitz and D.J. Thouless, Prog. Low. Temp. Phys. **VIIB** (1978), 371.
- 2) J.B. Kogut, Rev. Mod. Phys. **51** (1979), 659.
- 3) Kyoto Summer Institute lecture note, Physics of Low-Dimensional Systems, (1979).
- 4) 鈴木増雄, 固体物理 **11**, 12月号(1979),
- 5) L. Onsager, Phys. Rev. **65** (1944), 117.
- 6) 例えば, S-K. Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena*, (Benjamin, 1976).
- 7) N.D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Letters **17** (1966), 1133.
- 8) V.L. Berezinskii, Sov. Phys. JETP **32** (1971), 493.
- 9) H.E. Stanley and T.A. Keplan, Phys. Rev. Letters, **17** (1966), 913.
- 10) J.M. Kosterlitz and D.J. Thouless, J. Phys. **C6** (1973), 1181.
- 11) C. Kawabata and K. Binder, Solid State Comm. **22** (1977), 705.
- 12) M. Suzuki, S. Miyashita, A. Kuroda and C. Kawabata, Phys. Letters, **60A** (1977), 478.
- 13) J.V. Jose, L.P. Kadanoff, S.Kirkpatrick and D.R. Nelson, Phys. Rev. **B16** (1977), 1217.
- 14) R. Savit, Phys. Rev. **B17** (1978), 1340.
- 15) J.M. Kosterlitz, J. Phys. **C7** (1974), 1046.
- 16a) T. Ohta and K. Kawasaki, Prog. Theor. Phys. **60** (1978), 365.
- 16b) T. Ohta, Prog. Theor. Phys. **60** (1978), 968.
- 17) I. Nakayama and T. Tsuneto, Prog. Theor. Phys. **63** (1980), 402.
- 18) K.G. Wilson, Phys. Rev. **B4** (1971), 3184.
- 19) E. Brezin, J.C. Le Guillou and J. Zinn-Justin, Phys. Rev. **D8** (1973), 434.
- 20) S.-T. Chui and J.D. Weeks, Phys. Rev. **B14** (1976), 4978.
- 21) Y. Saito, Z. Phys. B (in press).
- 22) P.B. Wiegmann, J. Phys. **C11** (1978), 1583.
- 23) D.J. Amit, Y.Y. Goldschmidt and G. Grinstein, J. Phys. **A13** (1980), 585.
- 24) A. Luther and V.J. Emery, Phys. Rev. Letters **33** (1974), 589.
- 25) S.-T. Chui and P.A. Lee, Phys. Rev. Letters **35** (1975), 315.
- 26) J. Solyom, Adv. in Phys. **28** (1979), 201.
- 27) S. Coleman, Phys. Rev. **D11** (1975), 2088.
- 28) L.P. Kadanoff, J. Phys. **A11** (1978), 1399.
L.P. Kadanoff, Ann of Phys. **120** (1979), 39.
- 29) T. Ohta, Prog. Theor. Phys. **63** (1980), No. 3.
- 30) D.R. Nelson, Phys. Rev. **B18** (1978), 2318.

- 31) D.R. Nelson and B.I. Halperin, Phys. Rev. **B19** (1979), 2457.
 32) A.P. Young, Phys. Rev. **B19** (1979), 1855.
 33) H. Shiba, J. Phys. Soc. Japan, **48** (1980), 211.
 34) T. Ohta, in preparation.
 35) E. Domany, M. Shick, J.S. Walker and R.B. Griffiths, Phys. Rev. **B18** (1978), 2209.

不規則な状態での局在

— 2次元アンダーソン局在 —

京大・基研 氷上 忍

ここで取り上げる問題は最近くり込み群の方法で研究されている2次元アンダーソン局在の問題である。金属に不純物を入れると電子は不純物散乱を受けて、電気伝導度にその効果あらわれる。もし不純物がかかなり不規則なポテンシャルをつくれれば、電子はそのポテンシャルにつかまって局在し、金属ではなく絶縁体になるとアンダーソンが1958年に言い出したのがそもその始まりで、その後多くの研究がなされた。この問題は厳密に言えば一電子が絶対零度で、ポテンシャルが不規則な為にあるエネルギー E_c のところで伝導電子から局在電子に変わる問題である。一般にこのような E_c はモービリティエッジ(易動度端)と呼ばれている。実験的には電子間の相互作用の影響やフォノン励起の為、アンダーソン局在が起こるかどうかはっきりしない。後で述べるが2次元のMOSFETと呼ばれるシリコン表面の電子系や、薄膜の金属でアンダーソン局在が起っていると解釈できることが最近わかってきたので、今後の実験及び理論の発展が期待される。(アンダーソン局在の今までの発展はアンダーソンのノーベル賞講演¹⁾やサウレスの講義録²⁾が参考になる。)

さて、2次元のアンダーソン局在の理論であるが、2次元のハイゼンベルクスピン系の理論と似た所がある。2次元のスピン系は4次元のゲージ理論と似ているので、2次元アンダーソン局在理論は4次元QCD理論と共通した面を持っていると言ってもよい。

くり込み群が適用出来る弱結合を最初に考えることにする。不純物散乱が弱い時には、以前に超伝導の不純物効果の問題で考えられたように、摂動論でボルン近似をつかって考えられる。注目する点は、この一つの電子が不純物散乱によって拡散モードがどうなるかということである。拡散モードはゴールドストーンモードと見ることが出来て、スピン波と類似させるとわか