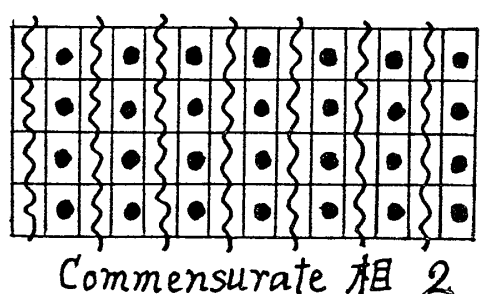
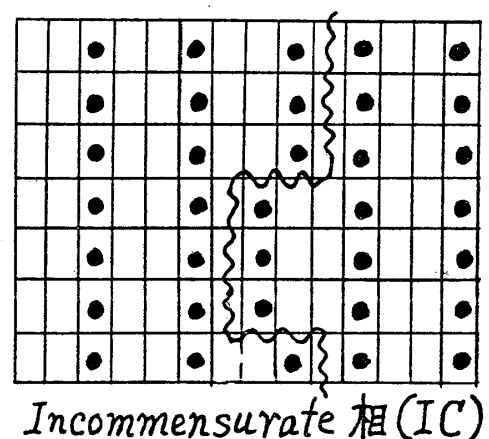
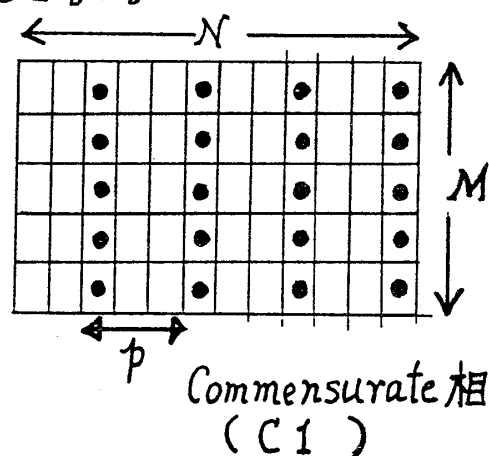


乱れのある結晶表面格子に吸着された原子集団の示す相転移 —— 乱れのある系での Commensurate-Incommensurate 転移 ——

東京大学 教養学部 物理教室 伊豆山 健夫

乱れのない場合にはシャープな二次相転移を示す系に乱れが入ると、一般に転移は滑らかになって、 ∞ 次の相転移になると筆者は予想している。その明快な例として表題の系を考える。転移点では、Gibbs 自由エネルギーを何回温度で微分したものも、不連続になったり発散したりしないが、それらが総じて真性特異性を示す場合には、Ehrenfest の定義に従って、この相転移の次数は ∞ 次であると言う。

結晶表面の格子は右の図のように非等方的四角格子としよう。吸着原子は縦方向にはびっしり並んでいるとする。この場合に原子間ポテンシャルが最小になっているので、隙間をあけてこのポテンシャルエネルギーを上げてしまうのは大いに損だ、というのである。横方向には原子間隔が格子間隔の p 倍よりちょっと小さい所で原子間ポテンシャルは最小になっているとする。この表面が原子の気体にさらされていると、適当な蒸気圧で、気相低温から、右上の図のように物理吸着した原子が Commensurate 相 1 (C1) を形成する。温度を上げると、原子間隔が $p-1$ になったものが上下に series になって出現する。これを domain wall と言い、右図の中で波線で示されている。間隔 $p-1$ では原子間ポテンシャルが上がりすぎてしまうが、wall はジグザグでできるので、エントロピーで補って、ある温度以上で wall の出現となる。このような相を Incommensurate 相と言う。また、蒸気圧がもっと上がると、低温でも右下の図のような Commensurate 相 2 (C2) が形成される。



このような系の統計力学は、S. N. Coopersmith et al, Phys. Rev. B 25 (1982) 349. H. J. Schultz, B. I. Halperin and C. L. Henley, Phys. Rev. B 26 (1982) 3797. その他多数によって扱われ、厳密解は T. Izuyama and T. Yamamoto, J. Phys. Soc. Jpn. 52 (1983) 4034. によって与えられた。そこではまた Incommensurate 相の中にもう一つの新しい相が

存在することも指摘された。こゝではこの厳密解をランダム格子の問題に発展させる。

Izuyama-Yamamoto によれば、正則格子の場合、縦方向を時間軸とみなすと、domain wall のジグザグは横方向の一次元格子上のランダム walk とみなされ、「一次元格子上で互に重なることのできない random walkers の集合体の外配関数を算出する問題」に歸着する。その transfer matrix は、 n 個の domain wall があるとき

$$A = \mathcal{P} \cdot \prod_{i=1}^n \left[\sum_{x_i=1}^L \left\{ |x_i\rangle \eta \langle x_i| + \sum_{l=\pm 1} |x_i+l\rangle \xi \langle x_i| \right\} \right] \cdot \mathcal{P}$$

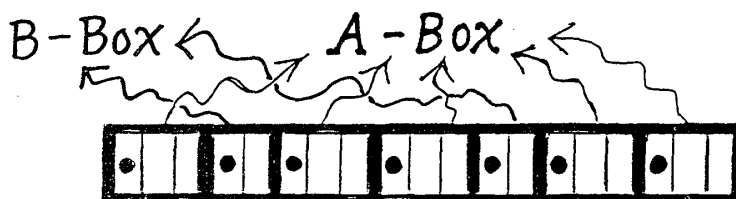
と書かれる。こゝに $\mathcal{P}$ は random walker の集積を排除するオペレータで、 x_i は i -th random walker の一次元格子上の座標、

$$\eta \equiv \exp[-\beta(\delta - \mu)] \quad , \quad \xi \equiv \exp[-\beta(\varepsilon - \mu)]$$

で、 μ は domain wall の化学ポテンシャル、 δ は wall energy / サイト、 ε は wall が一つ横に跳んだためのエネルギー増を δ に加えたものである。

こゝで言う random walker は wall そのものではなく、格子を下の図のように長さ p の A-Box と長さ $p-1$ の B-Box とでおおひ蓋して、隣接した B と A とが交換可能であるとした。

従って B-Box が random walker である。これが長さ L の仮想格子の上で random walk すると考えられる。こゝに

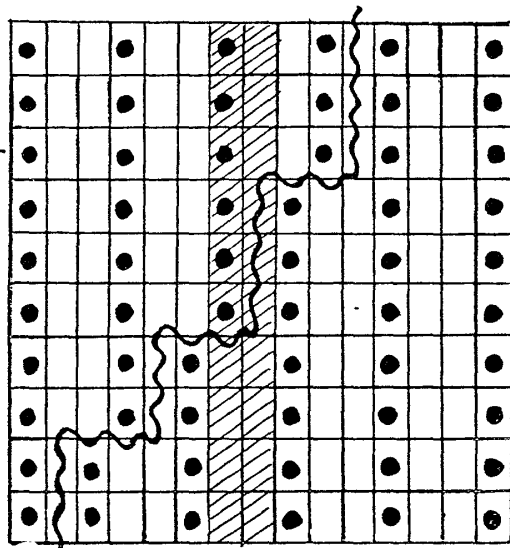


$(p-1)n + p(L-n) = N$ の関係がある。 $\rho \equiv n/L$ として、この定式化から得られた自由エネルギーは

$$f(\rho) = -\frac{1}{L-p} \left[(\mu - \delta) \rho + \frac{k_B T}{\pi} \int_0^{\pi \rho} \ln |1 + 2\delta \cdot \cos k| dk \right]$$

で与られ、相転移は、C1-IC, C2-IC, IC-New IC の何れの場合も、低温側からは比熱等の発散がなく、高温側からは $C \propto (T-T_c)^{-1/2}$ の鋭い発散が見出される。

乱れは左の図のように入れる。斜線を設した部分は他の部分にくらべて ε も δ も大きい値 ε' , δ' を採るものとする。モデルを簡単化して、縦方向には (ε', δ') の値は一定であるとする。住みにくいサイト (ε', δ') の種類は何種類あってもよい。住みやすいサイトの濃度を C と



する。 $c \equiv e^{-\gamma/p}$ と書けば $\gamma > 0$ である。

以下、転移点の近傍だけを考えよう。例として C1-IC を挙げる。

(ε, δ) — 住みやすいサイト — がずらりと並んだ領域のうち、最大のものから相転移が始まる。領域の横方向のひろがり pL と書く。この領域内での状態密度

$$g_L(E) \equiv \sum_{\nu=1}^{L-1} \delta \left[E - 2 \sin^2 \frac{\pi \nu}{2L} \right] \quad \text{を定義する。}$$

住みやすいサイトの状態密度は、乱れについて平均をとって

$$g(E) = cp \sum_L e^{-\gamma L} g_L(E)$$

相転移の近傍では

$$\int_0^{E_F} g(E) dE = \rho \equiv n/L$$

で定義される E_F は小さい。 $E \rightarrow 0$ では

$$g(E) \cong \frac{\pi cp}{\sqrt{2}} E^{-3/2} \exp\left(-\frac{\pi \gamma}{\sqrt{2}} E^{-1/2}\right)$$

で ρ と E_F の関係は $\rho \sim (2cp/\gamma) \exp\left(-\frac{\pi \gamma}{\sqrt{2}} E_F^{-1/2}\right)$ 。

乱れについて平均を採った自由エネルギーは、相転移の近傍で

$$\langle f(\rho) \rangle \cong -(\mu - \delta)\rho - \frac{k_B T}{\pi} \int_0^{E_F} g(E) \cdot \ln |1 + 2\zeta(1-E)| dE$$

(ただし $\zeta \equiv e^{-\beta(\varepsilon - \delta)}$)

で与えられる

$$\begin{aligned} \langle f(\rho) \rangle \cong & - \left[(\mu - \delta) + \frac{k_B T}{\pi} \cdot \ln(1 + 2\zeta) \right] \cdot \rho \\ & + \frac{k_B T \cdot cp}{\sqrt{2}} \int_0^{E_F} dE \cdot E^{-1/2} \cdot \exp\left(-\frac{\pi \gamma}{\sqrt{2}} E^{-1/2}\right) \frac{2\zeta}{1+2\zeta} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \langle f(\rho) \rangle}{\partial E_F} = 0 \quad \text{より} \quad E_F \propto \tau \equiv \frac{T - T_c}{T_c} \quad \text{が得られ}$$

$$\langle f_{\text{equil.}} \rangle \begin{cases} \propto \tau^{3/2} \exp(-a \tau^{-1/2}) & ; \tau > 0 \\ \equiv 0 & ; \tau < 0 \end{cases} \quad (a \text{ は正の定数})$$

が得られ、従って比熱は $\tau \rightarrow 0^+$ で $C \propto \tau^{-3/2} \exp(-a \tau^{-1/2})$ 、低温側では $C \equiv 0$ のようになる。

なおこの理論の構造は、細胞膜の相転移の理論 (T. Izuyama, J. Phys. Soc. Jpn, 51 (1982) 3449) と相似である。相転移を特徴付ける量は $\rho \equiv$ disorder parameter で、細胞膜の場合、秩序相 $\rho = 0$ では細胞は死んでしまう。生理機能は $\rho > 0$ で営まれ、そこいらへな凝臨界現象がある。生命は秩序を作ろうとして作り切れない、そのぎりぎりのあがきの中で維持されている。