

3. 量子強誘電体の臨界現象

加 藤 裕 治

二次相転移を示す系では臨界点で比熱 C や感受率 χ などの物理量が特異な振舞いをする。これらの物理量の温度 T (圧力一定) の依存性は、臨界点 T_c に近づくに従って統計力学での平均場近似 (これは感受率の Currie-Weiss 則を導く) の予測からはずれてくる。これを以下では臨界現象と呼ぶ。臨界現象を記述するパラメーターとして臨界指数が定義される (表 1)。平均場近似からのはずれようは定量的には臨界指数で示される。Wilson はくりこみ群の方法を使って臨界指数を原理的に計算する理論を与えた (ref. [1])。[但し、臨界指数の計算そのものは摂動展開項の高次項を無視した近似である。] 計算された臨界指数は平均場近似の値よりも良くなっている (表 2)。

一方、強誘電体では臨界現象が顕著に表れないことが実験結果から知られている (誘電率 [感受率] が臨界点付近でも Currie-Weiss 則に乗る)。これは強誘電体において影響の大きい dipole-dipole 相互作用の異方的でなおかつ長距離力的な性質によるものであると考えられていた。Aharony (ref. [2]) は強磁性体のモデルである Ising-spin 系に dipole-dipole 相互作用を取り入れて、これにくりこみ群の方法を適用して臨界指数を計算した。[強磁性体で dipole-dipole 相互作用の影響が表れないのはその相互作用定数 G が短距離相互作用定数に比べて小さいからである。] $t \equiv (T - T_c)/T_c$ と有効温度を定義すると、 $t \ll G$ の温度範囲では dipole-dipole 相互作用により臨界指数が変化し、系の空間次元 $d=3$ (臨界指数は一般に d に依存する、表 2) の場合 log 発散の部分を除いて臨界指数は平均場近似の値になる。強誘電体で臨界現象が観測されにくいのは、dipole-dipole int. が大きく臨界現象が現れる領域 (揺動領域) では常に $G \gg t$ であるため、観測されにくい (M.F.A. との) log 発散の違いしか現れないからである。

強誘電体は一般に常圧では臨界温度 T_c が高くこれを統計力学で扱うには古典統計で十分である。[量子効果は無視できる] しかし中には T_c が 0 に近く (但しこのときの圧力は常圧とは限らない)、量子効果を考慮しなければならない (量子統計で扱わねばならない) ような強誘電体 [量子強誘電体] の存在が予想される。Schneider (ref. [3]) は非調和格子振動系 (dipole-dipole 相互作用は考えない) で T_c が 0 になるときを考え、量子統計によって系のハミルトニアンを扱うことによりそのときの臨界指数が古典統計で扱ったときと比べて変化することを示した。但し Schneider が示したのは $T=0$ で相互作用定数を温度の代わりの変数としたときの臨界指数である。このときの臨界指数も dipole-dipole 相互作用のときと同じように $d=3$ では log 発散を除いて平均場近似の値になる。

本論では強誘電体のモデルとして dipole-dipole 相互作用を取り入れた非調和格子振動系を考える。系のハミルトニアンは (1) 式で与える。

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{H}_{int}; \\ \hat{H}_0 &\equiv \sum_i \left\{ \hat{p}_i^2 / 2m + m\omega_0^2 \hat{q}_i^2 / 2 + B \hat{q}_i^4 (\vec{r}_i) \right\} \\ \hat{H}_{int} &\equiv - \left\{ S \sum_i \sum_{\vec{a}} \hat{q}_i(\vec{r}_i) \hat{q}_i(\vec{r}_i + \vec{a}) + G \sum_i \left(\partial^2 / \partial z^2 \right) \hat{q}_i(\vec{r}_i) \hat{q}_i(\vec{r}_i) \right\} \\ |\vec{a}| : \text{格子定数} \quad \omega_0, B, S, G \text{ も定数} \end{aligned} \quad (1)$$

ここで $\hat{q}_i(\vec{r}_i)$ は i 番目の格子点にあるイオンの $T > T_c$ での平衡値からの熱振動 (と、量子効果も考えれば 0 点振動) による変位 (ゆらぎ) 演算子を表す。一般的にこれを秩序変数と呼ぶ。 $\hat{p}$ はイオンの運動量演算子、 m は質量である。 $\hat{H}_{int}$ の第一項は短距離相互作用を表し、二項目は dipole-dipole 相互作用を表す。

最初に、くりこみ群の方法の簡単な説明を兼ねて T_c が高いと仮定した上で (こ

ここでは臨界指数を求めることに主眼を置き T_c を求める議論はしない)(1)式を古典統計で扱い(演算子をC-数として扱う), Aharonyが示した方法に沿ってdipole-dipole相互作用が臨界指数を変えることを示す. また, このときになぜdipole-dipole相互作用が臨界指数を変えるのかを説明する.

つぎに, $T_c \sim 0$ と仮定した上で(1)式を量子統計で扱う. このとき演算子で表示されているハミルトニアン(1)を経路積分の方法でC-数で表示した形に書き換える. Schneiderはdipole-dipole相互作用を考えず, 温度に関する臨界指数も議論しなかった. 温度領域によって量子効果やdipole-dipole効果が顔を出す範囲(cross-over領域)を考えるためにも, 温度に関する臨界指数を計算できる形(有効ハミルトニアン)に(1),(2)を書き換える必要がある(これはclassicalなときにも行う). ここでは有効ハミルトニアンの定義をLandau, Bruceに求める(ref.[4][5]).

量子強誘電体の臨界現象は以下のようになると予想される($G \gg t$ は満たされているとする).

$$T_c > 2T_1/(3\sqrt{3}) : kT_1 \equiv h(R/m)^{1/2} \quad k \text{はボルツマン定数, } h \text{はプランク定数,}$$

R は相互作用定数のオーダーをもつ量

の場合は, いかなる温度領域でも臨界現象に量子効果は現れない. 一方,

$$T_c < 2T_1/(3\sqrt{3}) \text{の場合は, 量子効果の現れる温度領域が以下の範囲で存在し, } t \gg (T/T_1)^2$$

この領域では, 臨界指数 α, γ は $d=3$ 次元系でM.F.A.の値になる(このとき, $\log$ 発散もない). $T_c \neq 0$ の場合は, 臨界温度に近づくに従って, 熱的なゆらぎが大きくなり, 量子効果がみられなくなる. この場合の臨界指数は,

$$\alpha = 0(\log), \quad \gamma = 1 + 0(\log)$$

と $\log$ 発散が入るようになる. $T_c = 0$ であれば, 量子効果は最後まで現れて, $d=3$ 次元系でも臨界指数はM.F.A.の値に従い, 比熱の発散は起こらない, と予想される.

References

- [1] K.G.Wilson and J.Kogut, Phys.Rep.12C,76(1974)
- [2] A.Aharony, Phys.Rev.B8,3363(1973)
- [3] R.Morf, T.Schneider and E.Stoll, Phys.Rev.B16,462(1977)
- [4] Landau and Lifshitz, 統計物理学(下)
- [5] A.D.Bruce, Adv.Phys.29,111(1980)

表 1

物理量	臨界指数	定義	
C	$\alpha(t>0), \alpha'(t<0)$	$C \propto t^{-\alpha}$	ここでは α と γ だけ示す(考える温度範囲は $T \geq T_c$).
χ	$\gamma(t>0), \gamma'(t<0)$	$\chi \propto t^{-\gamma}$	
etc.			

表 2

臨界指数	Experiment	3-d Ising (数値計算)	2-d Ising (厳密解)	Mean field theory	Wilson
α	0-0.1	0.12	0(log)	0	0.077
γ	1.2-1.4	1.25	1.75	1	1.244

* Experiment: ferro- and antiferromagnets, liquid-gas transitions, binary - alloys, superfluid helium

Wilsonは3-d Ising系での値をくりこみ群の方法で求める(臨界指数の計算は摂動展開の二次の近似). *