

修士論文で何がなされているか
従つてその固有値の近傍で級数展開すると Onsager 方程式からの deviation が生ずるであろう。

今後の問題として HBr 等の回転相転移を考えてみたいと思つておる。

強誘電体に於ける相転移の問題

— 秩序・無秩序型相転移に対する格子振動の影響 —

吉 光 浩 二 (松原研)

強誘電体に於ける相転移には変位型と秩序・無秩序型との二つがあり、これらの転移の機構は atomic な level で dynamical には解決されていない。そこで変位型の BaTiO_3 と秩序無秩序型の NaNO_2 について格子振動の面から調べてみた。

変位型の BaTiO_3 は、格子振動の或 mode (特に波数 $k=0$, optical mode) の不安定性により説明されているが、unharmonicity の取扱いが困難でまだ解決していない。

ここでは秩序無秩序型の NaNO_2 について簡単な model をえて転移の機構を調べて見た。 NaNO_2 は、 NaNO_2 に関する body centred orthorhombic system で NO_2 の配向に関する order-disorder type の相転移を行い、 $T_C = 163^\circ\text{C}$ で T_C 上約 1°C の温度中で sinusoidal antiferro 相が存在する。分極反転は NO_2 基の回転が主と考えられている。

ここで図の様に NO_2 基の回転を b 面内とし、 NO_2 基に二つの Na に一つの平衡点を仮点し、 NO_2 基がどちらの平衡点にいるかを (従つて向きを) 指定する変数 $P_n (= \pm 1)$ を導入

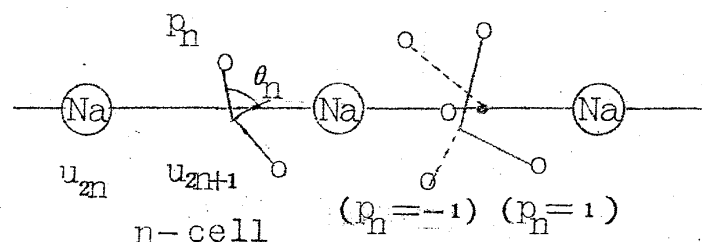


図 1

し、双極子相互作用を $-\sum J_{nn'} P_n P_{n'}$ と表わす。更に平衡点で Na 及び NO₂ の重心に変位 u_{2n}, u_{2n+1} を、NO₂ の回転に θ_n を許すと、Hamiltonian は、双極子相互作用、格子振動及びその coupling の項で表わせる。(coupling は格子振動の一次及び二次ともにある。) 但し、atom 間にその距離 r に依存する potential $\phi(r)$ (short range + long range) と仮定した。

この結果、格子振動の方では、転移に primary に効くと予想された、変位 u と回転 θ との coupling は Potential を harmonic 近似とする限り存在せず (特に波数 $k=0$ に対して) unharmonicity を考慮しても、 $u\theta\theta$, $uu\theta\theta$ の type の coupling しか存在せず、重要な効果を持つとは思われない。

一方 Partition function を計算し、格子振動のみを消して、格子振動の双極子相互作用への影響を調べると、ordered state と disordered state との各 mode の frequency の違いによつて、一次転移の可能性がある、又、 T_c の変化、order parameter S_0 の立ち上りの変化、susceptibility χ の変化等を引き起し、更に平衡点のずれによるひずみによつても T_c を上げる効果をもつ。

例えば、ordered state ($T < T_c$) で frequency が下ると

- T_c は上る。
- S_0 は frequency の上 ; 下に関係なく立上る。(図 2 の点線)
- χ は大きくなる (図 3)
- 平衡点のずれは常に T_c を上げる。

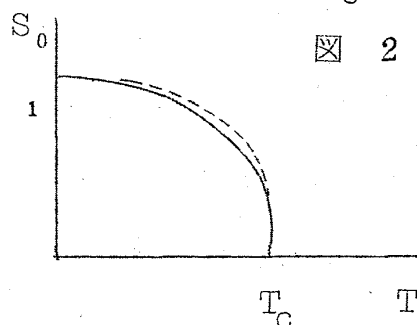


図 2

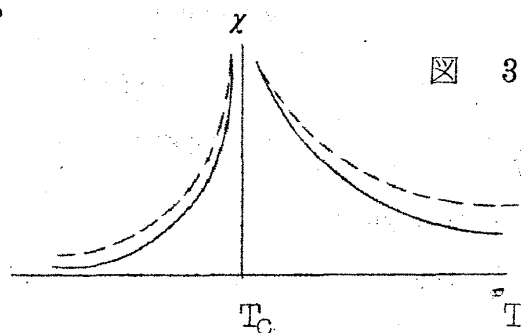


図 3

(二次転移の場合)