

競合する相互作用と悪魔の階段

東北大・工 佐々木一夫

§ 1. はじめに

部分が全体と相似な形状をもつ、いわゆる自己相似な構造が自然界にあふれていることを、近年になって我々が再認識するようになったのは Mandelbrot の有名なエッセイ [1] によるところが大きい。本稿でとりあげる「悪魔の階段 (devil's staircase)」もそのような構造のひとつであり、Mandelbrot の本にもその例が載っている。彼は、この本の中では悪魔の階段の明確な定義を与えていないけれども、ここでは次の定義を採用する。関数 $f(x)$ の微係数 $f'(x)$ が x のある有限の区間 $[a, b]$ にわってゼロになるとき、関数 f のその部分をステップと呼ぶことにする。関数 $f(x)$ がいたるところにステップを持ち、任意の2つのステップのあいだに無数のステップが存在するとき、この関数は悪魔の階段である。有限の区間に無限個のステップがあるという事実は必ずしも悪魔の階段を意味しない (§ 4 でその例をみる) ことを注意しておく。

固体の中には、その固体を形成している結晶格子の周期とは異なる周期構造 (空間変調構造) を示すものがある。変調を受けるのは原子やイオンの変位であることもあるし、磁気モーメントや電気分極の場合もある。変調は空間の一方向に生ずることが多く、この方向に垂直な平面での構造は一様である。温度や圧力、磁場、電場などのパラメタを変えると、格子の周期を好む相互作用と変調構造を好む相互作用とのあいだの競合に変化が生じ、それによってもなつて変調波数も変化する。いくつかの物質では悪魔の階段を思わせるような非常に複雑な波数変化を示す。たとえば希土類元素のエルビウム Er [2] や強誘電体の BCCD (Betaine Calcium Chloride Dihydrate, $(\text{CH}_3)_3\text{NCH}_2\text{COO}^- \cdot \text{CaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) [3] などがそうである。しかし、空間変調構造を示す現実の物質の変調波数のパラメタ依存性が悪魔の階段になっているかどうかという判定を下すのは容易ではない。

そこで空間変調構造を示す簡単なモデルを導入して、変調波数はモデルに含まれるパラメタとともにどの様に変化するか、そして変化の仕方が悪魔の階段になることがあり得るのか、といった問題を調べることに意義を持つ。いくつかのモデルでは確かに変調波数のパラメタ依存性が悪魔の階段になるということがこれまでに知られている。このことを次節で簡単に解説し、§ 4 では Frenkel-Kontorova 型モデルにおける変調波数の変化につ

いて新しく得られた知見を紹介する。§ 3はそのための準備である。

§ 2. これまでに知られていること

変調波数のパラメタ依存性が悪魔の階段になるということが厳密に証明されているモデルがいくつかあるのでそれを紹介しよう。いずれも絶対零度における古典1次元モデルの基底状態に関する研究である。

最初に紹介するのは Frenkel-Kontorova型モデルで、そのエネルギーは

$$E(\{u_n\}) = \sum_n [V(u_n) + W(u_n - u_{n-1})] \quad (1)$$

で与えられる。ここで u_n は粒子の変位、

$$V(u) = V(u + 1) \quad (2)$$

は周期ポテンシャル、 $W(y)$ は距離 y だけ離れた隣接粒子間の相互作用ポテンシャルである。 $W(y)$ が最小値をとる y の値を γ とすると、 V の周期と γ の値が異なるときには、これら2つの長さの間に競合が起こり、基底状態の構造は一般に変調構造となる。

Aubry は次の定理を証明した[4]。モデル(1)において、関数 $W(y)$ が下に凸 (convex) であり、この関数が $-\mu y$ という項 (μ はパラメタ) を含んでいるときには、基底状態における平均粒子間距離 $\omega = \langle u_n - u_{n-1} \rangle$ を μ の関数としてプロットすると、ほとんどすべての有理数 ω においてステップを持つ。しかも、 ω は μ の連続関数である。

$W(y)$ が下に凸のときには、基底状態における粒子の変位は周期が1の適当な周期関数 $g(x) = g(x+1)$ と適当な定数 α を用いて

$$u_n = \omega n + \alpha + g(\omega n + \alpha) \quad (3)$$

と表現できることが知られている[4]ので、平均粒子間距離 ω は変調波数に他ならない。また、任意の2つの有理数の間には無数の有理数が存在するので、上の定理は変調波数のパラメタ μ への依存性は悪魔の階段であることを言っている。この Aubry の定理は、隣接粒子より遠くの粒子間に相互作用がある場合でも、相互作用ポテンシャルが適当な convexity 条件を満たすときには適用できる。

Frenkel-Kontorova型モデルにおける悪魔の階段の例を図1に示す[5]。これは、モデル

(1) において

$$V(u) = [K/(2\pi)^2][1 - \cos(2\pi u)] \quad (4)$$

$$W(y) = (y - \gamma)^2/2 \quad (5)$$

とした場合に基底状態の変調波数 ω を数値的に計算してパラメタ γ の関数としてプロットしたものである($K = 1$ に固定)。この $W(y)$ は Aubry の定理が成立するための条件を満たしている。図には全てのステップが描かれているわけではないが、自己相似な構造を持つ悪魔の階段の特徴がうかがえる。また、図2は二つのパラメタ K と γ を変えたときにどんな変調相が現れるかを示す相図である[5]。図中の数値はそれぞれの変調相の変調波

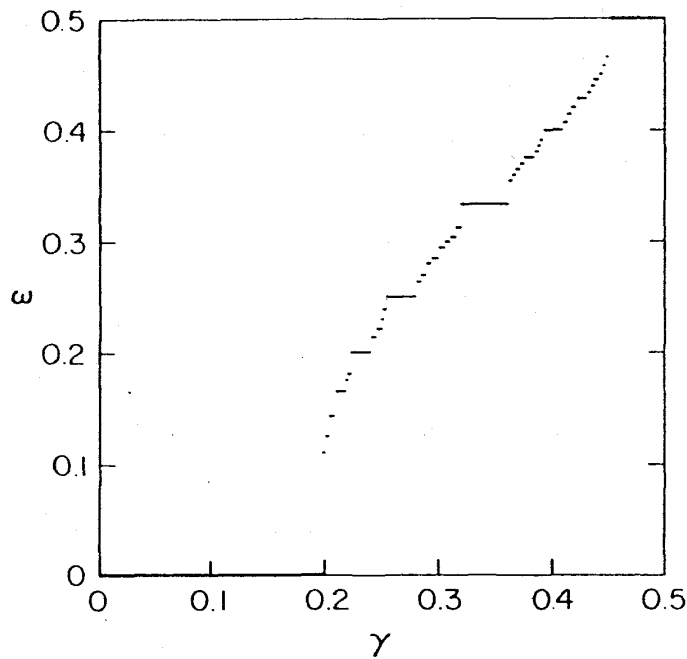


図1

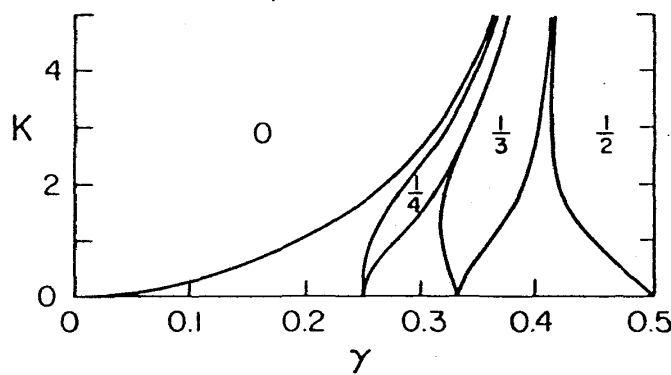


図2

数の値である。図2には4つの整合相（有理数の波数を持つ変調相）の相境界線しか描いていないけれども、この相図の「空白部分」は無数の整合相および不整合相（無理数の波数を持つ変調相）の領域で埋め尽くされているはずである。

Aubry の定理は相互作用関数 $W(y)$ が下に凸でない場合には適用できない。たとえば、カイラルXYモデル

$$E(\{\theta_n\}) = \sum_n [H(1 - \cos \theta_n) + 1 - \cos(\theta_n - \theta_{n-1} - \Delta)] \quad (6)$$

はこの条件を満たさない。ここで θ_n はスピンの回転角、 H は外部磁場、 Δ はカイラリティーを表すパラメタ。外部磁場がないときには隣り合ったスピンの作る角度が Δ となるような「らせん構造」が基底状態である。磁場は全てのスピンを $\theta = 0$ にそろえようとするので、カイラリティーをもつスピン間相互作用との間に競合が生じ、一般にらせんの平均ピッチ $q = \langle \theta_n - \theta_{n-1} \rangle$ ($0 \leq \theta_n - \theta_{n-1} < 2\pi$) が Δ や 0 とは異なる変調構造が基底状態になる。 $u_n = \theta_n/2\pi$ において、(6)を(1)の形に書き換えると $W(y) = 1 - \cos(y - \Delta/2\pi)$ が得られ、 y の値によっては $W'(y) < 0$ となるので、このモデルには Aubry の定理が適用できないことがわかる。

このモデルの (Δ, H) 平面における相図を数値的に計算した結果[6]を図3に示す。図中の数値はそれぞれの相におけるらせんの平均ピッチを 2π で割った量 $\omega = q/2\pi$ を表している。弱磁場領域での相図の構造は、図2とほぼ同じであり (H が K に $\Delta/2\pi$ が γ に対応)、

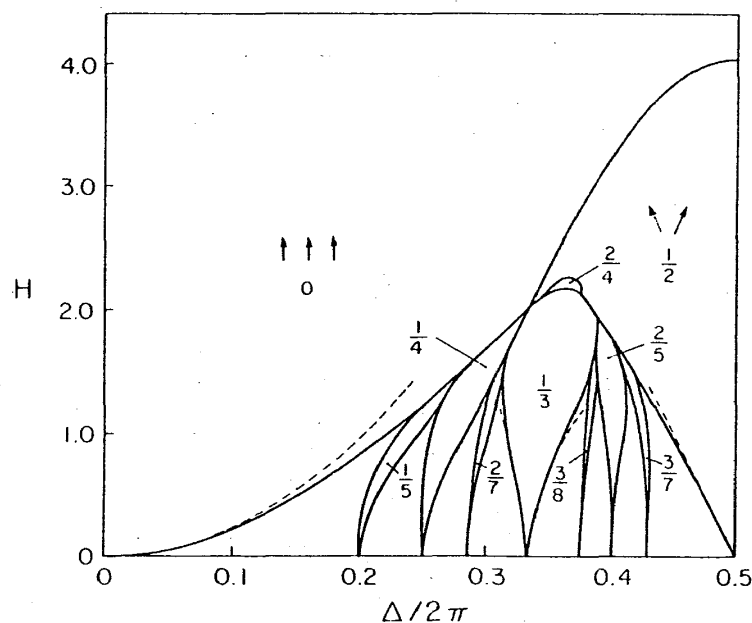


図3

H を一定にして ω を Δ の関数としてプロットすると悪魔の階段が得られる。ところが H が大きい領域では、図2にはみられないような構造が現れている。たとえば $2 < H < 4$ において $\omega = 0$ の強磁性相から $\omega=1/2$ の反強磁性相への2次相転移が起こり、中間の ω を持つ相は現れない。また、 $\omega=1/2$ の相と $\omega=1/3$ の相との境界線上では1次相転移が起こり、やはり中間の ω を持つ相は現れない。これらの相境界線を横切ると ω の値は不連続にジャンプする。より詳細な相図の解析によると、図3で $\omega=1/2$ と $\omega=1/3$ と $\omega=2/5$ の3つの相が集まっているように見える点の近傍には無数の相が存在するが、 ω の変化の仕方は悪魔の階段にはなっていない。そのほかにも、この相図には興味深い構造がいたるところにみられるが、詳しいことは原論文[6]を参照していただきたい。

このように、粒子間の相互作用ポテンシャルが下に凸でないときには、変調波数の変化の仕方には様々なものがあることがわかる。それではどのようなときに悪魔の階段が現れるのだろうか。この疑問に対する一つの解答を次の2つの節で紹介したい。その前に、悪魔の階段が現れることが知られている他のモデルにも触れておく。

Bak と Bruinsma[7]は長距離相互作用のある1次元イジング模型の基底状態における磁化の磁場依存性を議論した。系のエネルギーは

$$E(\{S_i\}) = -\sum_i H S_i + \sum_{i \neq j} J(i-j) S_i S_j, \quad S_i = \pm 1 \quad (7)$$

で与えられる。彼らは、 $J(n) > 0$ (反強磁性的) で、 $J(n)$ が $J(n+1) - 2J(n) + J(n-1) > 0$ (下に凸) ならば磁化の磁場依存性は悪魔の階段になることを証明した。(このモデルでは、 $H > 0$ のとき下向きスピンはほぼ等間隔に並んでおり、下向きスピンの数とスピンの総数との比はスピン配列の変調波数に等しい。 $H < 0$ のときにはもちろん上向きスピンと下向きスピンの役割が入れかわる。) 石村[8]は、 r を $0 < r < 1$ なる定数として $J(n) = J(-n) = r^n$ ($n > 0$) という特別な場合について、詳しい解析を行った。実は、この石村のモデルは、基底状態の性質に関する限り、Frenkel-Kontorova型モデル(1)のうち Aubry が研究した、解けるモデルと等価であることが証明できる [9,10]。

有限温度における3次元系の変調構造を記述するモデルとして、ANNIモデル (Axial Next-Nearest-Neighbor Ising モデルの略であり、Axial のかわりに Anisotropic が使われることもある) と呼ばれる有名なモデルがある。このモデルの相図については多くの研究があり、現実の系への応用も議論されている (詳しくは、最近のレビュー[11]参照)。

分子場近似で得られるANNIモデルの相図は、多くの点で図3に示したカイラルXYモデルの相図に類似している（もちろん異なる点も多い）。

§ 3. 整合欠陥

これからは議論の対象を1次元Frenkel-Kontorova型モデル(1)の基底状態に限ることにする。前節で述べたように、粒子間の相互作用 $W(y)$ が適当な条件を満たすときには Aubry の定理が適用できて、変調波数のパラメタ依存性が悪魔の階段になることがわかっている。この条件が満足されないときには変調波数の変化の仕方を記述する一般的な法則は知られていない。ここでは考察の対象を、狭い範囲の適当なパラメタ領域に限って、その範囲で変調波数の変化が悪魔の階段になるのはどういう条件が満たされるときか、という問題への解答を探る。

パラメタの値を少し変えるとある整合相が不安定になり、別の変調相が出現するような、そういうパラメタ領域を考える。さらに、この変調相の構造が、いま着目している整合相の中に（以下で定義する）整合欠陥が規則正しく並んだものと見なすことができるとしよう。これは Fisher と Szpilka [12] が想定した状況と同じであり、彼らが説明しているように、このような状況は決して特殊なものではない。たとえば、図2と図3に示した例でいうと、我々はこれらの相図の一部分の性質を調べることになるのだが、ここに現れるほとんどの整合相の相境界線の近傍では上に述べた状況が実現している。以下で説明するように、問題の範囲をこのように限定すると、変調波数の変化について云々することは、整合欠陥の数密度の変化を議論することに帰着する。

整合欠陥（他に discommensuration, domain wall, defect, soliton など様々な名称で呼ばれる）について説明しよう。例を示しながら説明するのがわかりやすい。図4 aには欠陥のない整合相の例が模式的に描いてあり、bにはこの整合相に欠陥がひとつ（第5番目の粒子と第6の粒子の間に欠陥の中心がある）入った構を示してある。このような欠陥が2つ（それぞれの中心が粒子5-6と粒子12-13の間にある）並んだ状態を表したのが図4 cである。

一般の整合相における整合欠陥とは次の性質をもった粒子配列 $\{u^n\}$ のことである：基準になる整合相の粒子配列を $\{u^0\}$ として、

$$\begin{aligned}
 u^0_n &\rightarrow u^0_n & \text{as } n &\rightarrow -\infty, \\
 u^0_n &\rightarrow u^0_{n-r} + s & \text{as } n &\rightarrow +\infty.
 \end{aligned}
 \tag{8}$$

ここで r と s は適当な整数。図4の例では、 $r = 2$, $s = 1$ になっている。一方、整合相 $\{u^0_n\}$ というのは、すべての整数 n に対して、関係

$$u^0_{n+Q} = u^0_n + P \tag{9}$$

が成り立つような整数 P と Q が存在する構造のことである。この関係を満足する正で最小の整数 Q を整合相の「周期」と呼ぶ。図4の例では $P = 2$, $Q = 5$ である。いま r と s が(9)を満たすならば、 m を任意の整数として $r' = r + mQ$, $s' = s + mP$ で与えられる整数 r' と s' も(9)を満たす。このことは図4をみて容易に確かめられよう。

整合欠陥が複数個存在するとき、隣り合う欠陥の間の「距離」を、2つの欠陥の間にある粒子の数として定義すると都合がよい。図4 cの例では、2つの欠陥の距離は7である。

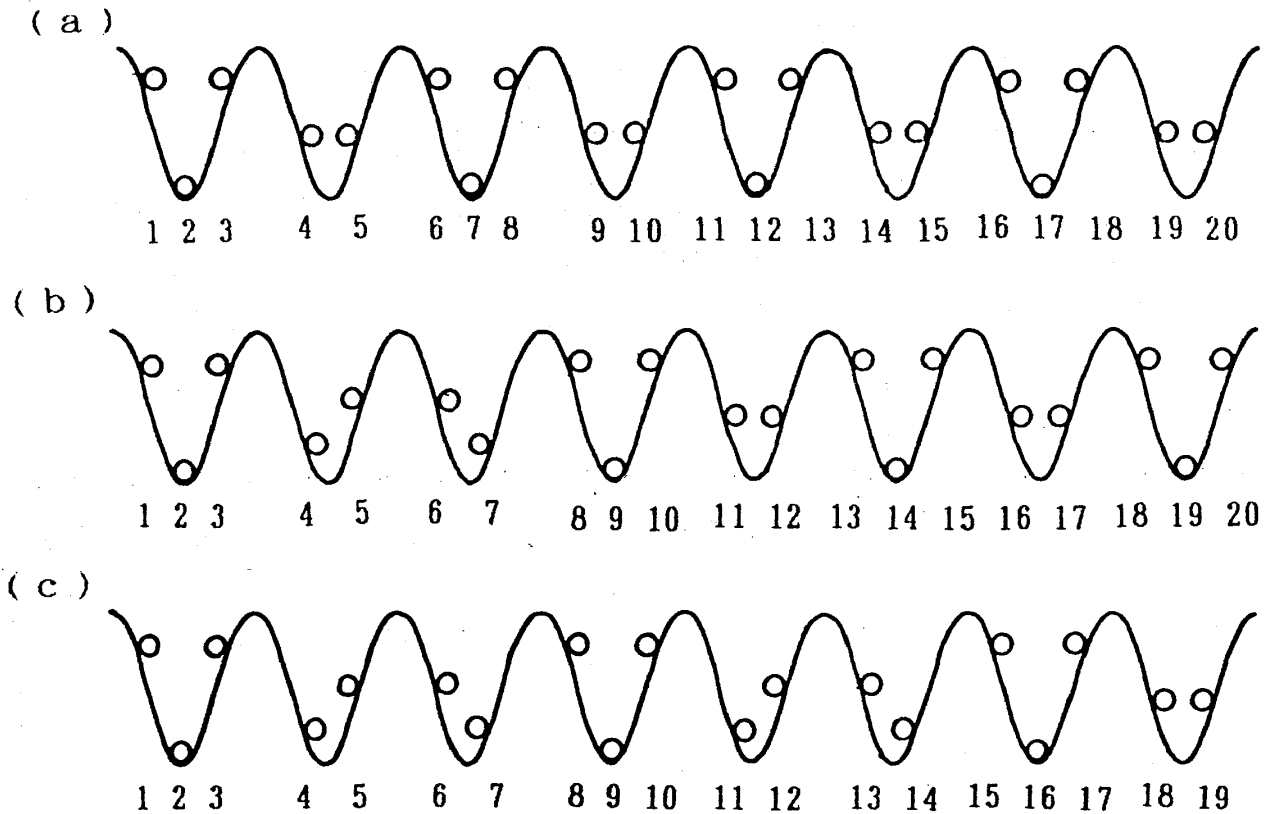


図4

このような定義によると、欠陥間の距離 l は整合相の周期 Q の整数倍ずつしか変化しない。たとえば、図 4 c の右側の欠陥を右方に移動させるためには粒子 15 を左隣りの谷に移し、新たに力の釣合が成立するように粒子の位置を決めればよい。この操作によって右側の欠陥の中心は粒子 17-18 の中間に移動し、2 つの欠陥間の距離は $Q = 5$ だけ増えて 12 になる。欠陥間の距離が 7 と 12 のあいだの値を持つ粒子配列はあり得ないのである。このように、隣り合う欠陥の距離 l は非負の整数 p を用いて

$$l = l_{\min} + pQ \quad (10)$$

と表せることがわかる。ここで $l_{\min}$ は欠陥間の最小距離であり、図 4 の例では $l_{\min} = 7$ 。

さて、整合相の中に整合欠陥が規則正しく（ほぼ等間隔に）並んでできる変調相では、整合欠陥の数密度 η は変調波数に密接に関係している。実際、整合欠陥密度 η と前節で導入した平均粒子間距離 ω との間には

$$\omega - \omega_0 = (s - \omega_0 r) \eta \quad (11)$$

という関係が成り立ち、 $W(y)$ が下に凸の場合には ω は変調波数にほかならなかった。ここで $\omega_0 = P/Q$ は着目している整合相での平均粒子間距離、 s と r は整合欠陥の定義 (8) に現れる整数である。Aubry の定理が適用できる場合は η のパラメタ依存性は悪魔の階段になる。次節では、Aubry の前題条件が満たされない場合も含めて、一般の Frenkel-Kontorova 型モデル (1) における整合欠陥密度 η のパラメタ依存性について調べる。

§ 4. 悪魔の階段が現れる条件

モデルに含まれるあるパラメタ μ を増加したときに、ある整合相における整合欠陥の生成エネルギー E_D が $\mu = \mu_0$ で正から負に変わるとしよう。 $\mu > \mu_0$ では、この整合相は安定な基底状態としては存在し得ず、整合欠陥が適当に並んだ構造の変調相が出現する。我々は、 $\mu = \mu_0$ の近傍での変調相の変化の様子に興味がある。このパラメタ領域では、 μ を適当にスケールすることによって、 E_D を

$$E_D = \mu_0 - \mu \quad (12)$$

と表すことができる。どのような変調構造が基底状態になるか、それは整合欠陥どうしの相互作用によって決まる。相互作用エネルギーもパラメタに依存するけれども、 $\mu = \mu_0$ 近傍の相変化を調べるためには、 $\mu = \mu_0$ における相互作用エネルギーの表式を使えば十分である。

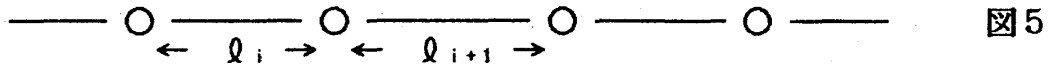
図5に整合欠陥が(左から) $q_1, q_2, \dots$ の間隔で並んだ構造の変調相を模式的に示す。この図で白丸は整合欠陥を、直線は整合相の構造をもつ領域を表す。この変調相のエネルギーは、整合相のエネルギーを基準にして測ると

$$E = \sum_i [E_D + U_2(q_i) + U_3(q_i, q_{i+1}) + \dots] \quad (13)$$

と書ける[12]。ここで $U_N(q_1, q_2, \dots, q_{N-1})$ は連続して並ぶ N 個の欠陥の間に働く N 体の相互作用エネルギーである。全系の粒子数を L とすると

$$L = \sum_i q_i \quad (14)$$

が成り立つ。与えられたパラメタ値に対して基底状態を求めるという問題は、条件(14)の下で E/L ($L \rightarrow \infty$) を最小にする q_i の組を探すという問題に帰着する。



Fisher と Szpilka[12]は $(N+1)$ 体の相互作用は N 体相互作用に比べて小さいと仮定して、まず3体以上の相互作用項を無視したときにどんな変調相が出現するかを明らかにした。次に3体、4体、 $\dots$ の項を順に加えてゆき、相互作用ポテンシャルの性質によってどのような変調相が現れるかを系統的に調べた。このような方法を使って、整合欠陥の数密度 η の変化が悪魔の階段になるのはどういうときか、という問いに答えるためには、近似のレベルを無限に高めなければならない。

筆者は、Frenkel-Kontorova型モデル(1)の任意の整合相における整合欠陥の多体相互作用を与える公式を、欠陥の間隔が大きい場合について導いた。この公式とFisher-Szpilkaの3体近似までの理論と組み合わせることにより、悪魔の階段が現れる条件を明らかにすることができる。 N 体相互作用の公式は次の通り：

$$U_N(q_1, q_2, \dots, q_{N-1}) \approx ab^{N-2} \Lambda^{-p_1-p_2-\dots-p_{N-1}} \quad (N \geq 2). \quad (15)$$

ここで a, b, Λ は実定数 ($|\Lambda| > 1$)。右辺の整数 p_i は左辺の q_i と (10) の関係で結ばれている。この公式に対する補正項は、主要項に比べてオーダー Λ^{-p} の程度 (指数関数的に小さい) である。定数 a, b, Λ の値は、整合相における粒子の配列 $\{u^n_n\}$ と整合欠陥をひとつだけ含む状態での配列 $\{u^n_n\}$ がわかれば計算できる。

$\mu = \mu_0$ 近傍のパラメタ領域において次の条件が満たされるときに、整合欠陥密度 η の変化が悪魔の階段になることが判明した。(i) 2体相互作用 $U_2(q)$ が有限のすべての可能な q に対して $U_2(q) > 0$ であること、そして(ii) 公式(15)に現れる定数 b が正であること。第一の条件は $a > 0$ かつ $\Lambda > 0$ を意味するが、逆は正しくない。というのは(15)は q の値が小さいときには使えないから。整合相はちょうど $\mu = \mu_0$ で不安定になり、 $\mu > \mu_0$ で η の値は悪魔の階段状に増加する。その様子を図 6 a に模式的に示す。

上述の条件のうち第一は成り立つが、第2の条件が満たされない場合、すなわち $U_2(q) > 0$ で $b < 0$ のとき、整合相は $\mu = \mu_0$ で不安定になり、 $\mu > \mu_0$ で整合欠陥の密度 η は図 6 b のように増加する。それぞれのステップは、整合欠陥が等間隔に並んだ構造の変調相に対応している。欠陥の間隔が q であるような変調相を記号 $[q]$ で表すことにする。図 6 b において整合欠陥密度 $\eta = 1/q$ をもつ $[q]$ 相のステップの左隣りのステップは $\eta = 1/(q+Q)$ の $[q+Q]$ 相に対応しており、途中の η の値をもつステップは存在しない。従って、この場合には $\mu = \mu_0$ の点に向かって、無数のステップが集積しているけれども、図 6 b は悪魔の階段ではない。 $[q]$ 相のステップの μ 方向の長さ $\Delta \mu(q)$ は近似的に

$$\Delta \mu(q) \approx a(q/Q)(1-\Lambda^{-1})^2 \Lambda^{-p+1} \quad (16)$$

で与えられる。 q の値が大きくなる (η の値が小さくなる) に従ってステップの幅は指数関数的に小さくなる。

2体相互作用がある有限な距離で負になるような場合、すなわち

$$\min_q U_2(q) = U_2(q_n) < 0 \quad (17)$$

が成り立つときには、整合欠陥の生成エネルギーがゼロになる少し手前のパラメタ値

$$\mu \approx \mu_0 + U_2(q_n) < \mu_0 \quad (18)$$

で整合相から変調相 $[q_n]$ への一次相転移が起こる。したがって、このときの整合欠陥密度の変化は図 6 c のようになる。

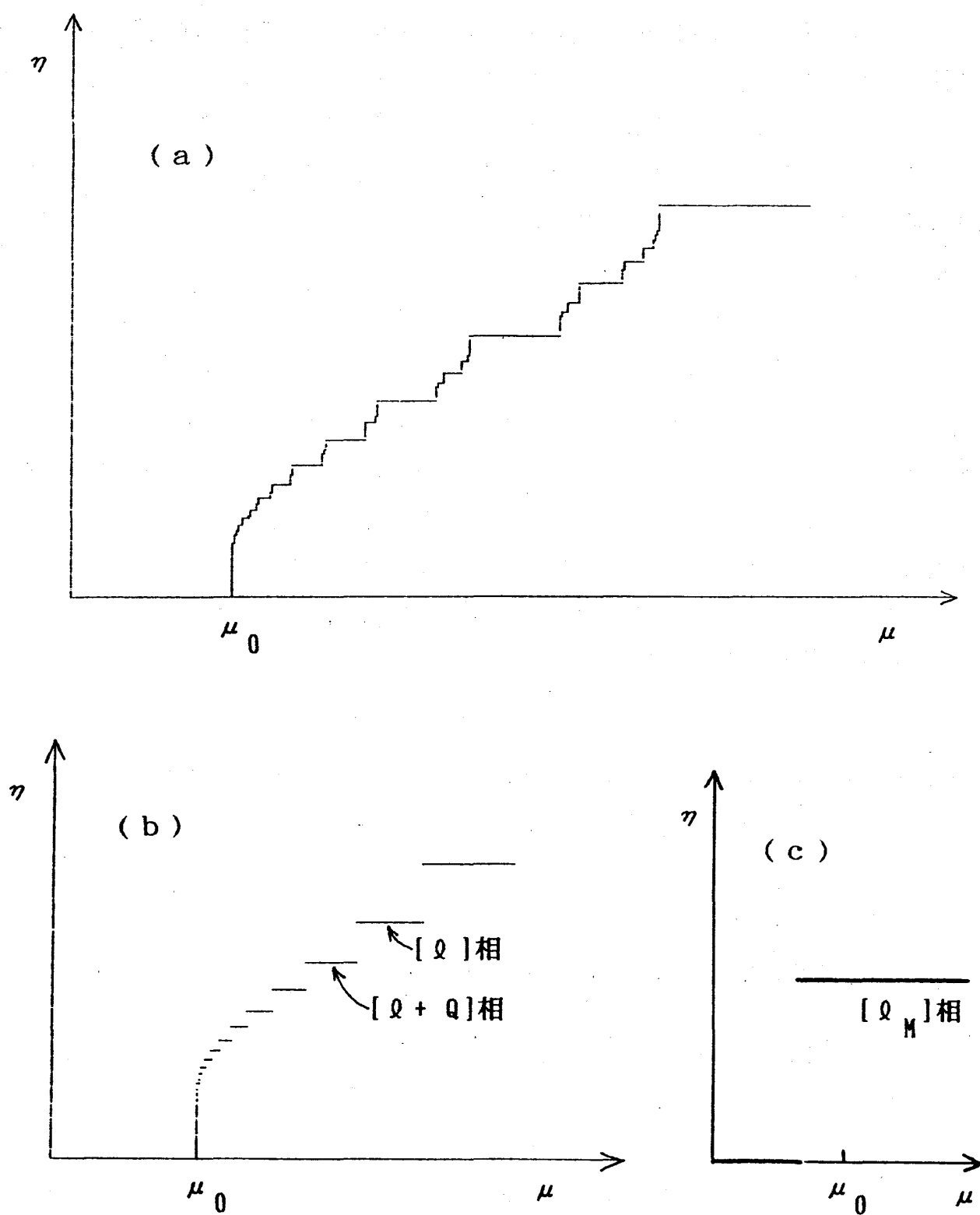


図 6

前節第2段落で述べたような前題条件が成り立っている場合には、上に示した3つのタイプの階段が、Frenkel-Kontorova 型モデルの整合欠陥密度のパラメタ依存性のすべての可能性を尽くしている。ここで注意しておかなければならないのは、我々は非常にせまいパラメタ領域（ある整合相が不安定になるパラメタ値の近傍）だけを考えているということである。パラメタの広い範囲にわたって変調波数の変化を調べてみると、ある領域では悪魔の階段になっており、ほかの領域では図6 bやcのようになっているということもあり得るのである。

§ 5. おわりに

空間変調構造を記述する簡単な1次元モデルが示す変調波数の変化の様子に関しては、いろいろなことが分かってきた。こうした研究で得られた知識が、より複雑な現実の物質で観測される現象を理解するのに役立つことを期待する。

筆者は、Carnegie-Mellon 大学の R.B. Griffiths 教授及びその共同研究者たちとの議論を通じて、ここで取り上げた問題やそれに関連した問題について多くのことを学んだ。ここに感謝の気持ちを表します。

-
- [1] B.B. Mandelbrot, The Fractal Geometry of Nature (Freeman, New York, 1982).
 - [2] D. Gibbs et al., Phys. Rev. B34, 8182 (1986).
 - [3] R. Ao et al., Phys. Rev. Lett. 62, 183 (1989).
 - [4] S. Aubry, Physica 7D, 240 (1983).
 - [5] W. Chou and R.B. Griffiths, Phys. Rev. B34, 6219 (1986).
 - [6] C.S.O. Yokoi et al., Phys. Rev. B37, 2173 (1988).
 - [7] P. Bak and R. Bruinsma, Phys. Rev. Lett 49, 249 (1982); R. Bruinsma and P. Bak, Phys. Rev. B27, 5824 (1983).
 - [8] N. Ishimura, J. Phys. Soc. Jpn. 54, 4752 (1985).
 - [9] S. Aubry, J. Phys. C16, 2497 (1983).
 - [10] K. Sasaki and R.B. Griffiths, J. Stat. Phys. 53, 1031 (1988).
 - [11] W. Selke, Phys. Rep. 140, 213 (1988).
 - [12] M. Fisher and A.M. Szpilka, Phys. Rev. B36, 644 (1987).