

映画 “Molecular Dynamics Investigation of
Antiferrodistortive Structural Phase Transitions”

IBM Zurich Res. Lab. E. Stoll and T. Schneider

この映画は、T. Schneider and E. Stoll: “Molecular-dynamics study of structural phase transitions I. One-component displacement models” Phys. Rev. B13 1216 (1976) の一部を映画化したものである。相互作用のないときの single particle potential が、単一極小のばあいと二つの極小があるばあいが扱われている。二つの極小があるばあいにはよく知られたクラスタの動的振舞があらわれた。一方、単一極小のばあいにはクラスタがある速度をもって移動していくのがみられた。両者を同一画面で同時に並べてみたとき、それらの差異が明らかにみられた。

(名大・工 八田一郎)

SrTiO_3 の構造相転移における熱容量

—— 一軸性歪による crossover 現象 ——

名大・工 八田一郎

構造相転移（強誘電相転移をも含む）の現象論の発展は近年著しいものがある。このばあいオーダ・パラメータに関係した原子の移動は一般には複雑で、モードの凍結などによってあらわれる。多くのばあいオーダ・パラメータと他のモードとのあらゆる結合を考えることにより、相転移と関連してあらわれる種々の量の異常が理解される。しかし、臨界現象をより微視的立場から理解しようとするとき、オーダ・パラメータに関連した原子の数は少ないけれど少ないほど取扱いやすい。さらに、オーダ・パラメータと

八田一郎

格子の相互作用は小さいほどよい。 SrTiO_3 はこのような微視的な立場から構造相転移を理解しようとするときに都合のよい物質の一つである。この 105K 相転移ではペロブスカイト型単位胞中の酸素八面体が相対する酸素の軸のまわりに回転を起す。一つの単位胞と相隣り合う単位胞中の回転は互いに逆になっているので、この相転移は antiferro-distortive phase transition と呼ばれる。このように SrTiO_3 の相転移では酸素原子のみが変位する。また、熱膨張率と弾性率から C_p と C_v の差を見積ることができるが、それは小さく温度によってあまり変化しない。これはオーダ・パラメータと格子の相互作用が小さいことを示す一例といえる。

SrTiO_3 中の Ti 位置に置換した Fe^{3+} の EPR の実験により (K. A. Müller ら), 結晶が単分域状態に相転移をおこすように応力がはたらいているばあい (monodomain 結晶) と多分域状態になるような自由結晶のばあい (polydomain 結晶) とで、微視的な酸素八面体の揺動の異方性が著しくことなることが指摘されている。このことと関連し、Aharony と Bruce は SrTiO_3 の相図を renormalization group theory によって研究し、 $[100]$ 方向にひっぱり応力があるばあいにはイジング的な臨界現象を示し、押しつけ応力があるばあいには XY 的な臨界現象を示し、応力がゼロのばあいには bicritical point でハイゼンベルグ的な臨界現象を示すことを指摘した。すなわち、 SrTiO_3 結晶の $[100]$ 方向にひっぱり応力を加えることにより臨界現象をハイゼンベルグ的から、イジング的に変えることができる (crossover 現象)。押しつけ応力が加えられたときも同じようなことがいえる。

われわれは Müller らの EPR の実験に刺激されて、熱容量の異常が monodomain 結晶と polydomain 結晶で異なるかどうか ac カロリメトリ法によって調べた。その結果、monodomain 結晶では T_c 近傍で大きな異常を示すのに対し、polydomain 結晶では小さな異常しか示さないことがわかった。monodomain 結晶では熱容量の異常が比較的大きいので、臨界指数は 0.1 と 0.2 の間にあることがわかった。これは三次元イジング系が臨界指数 0.125 であることと矛盾していない。一方、polydomain 結晶では熱容量の異常は小さいが、cusp-like の異常を示しているように見え、これも三次元ハイゼンベルグ系が臨界指数 -0.10 であることと矛盾していない。このような熱容量の異常の応力による変化は、相転移点線上に異常点のないばあいの、いわゆる Pippard の関係によっては理解できない。すなわち、相転移点線の上のどこかに異常点が存在し何らかの crossover

を起しているに相異なる。上の事実と考え合わせてみて、 $S_r T_i O_3$ の相転移で期待されている crossover がみつかったと考えるのが自然であろう。

2次元磁性体の磁気臨界比熱

お茶の水大・理 池 田 宏 信

磁性体における相転移点近傍にあらわれる諸種の物理量の異常を統一的に理解するための、理論および実験研究が近年発展してきた。

われわれは、次元、対称性、ポテンシャルレインジと臨界現象との相互関連を調べる目的で、数種の典型的2次元磁性体 ($K_2 Co F_4$, $Rb_2 Co F_4$, $K_2 Ni F_4$, $K_2 Mn F_4$) を用いて磁気臨界比熱の精密測定を行った。結果の詳細は既にいくつか発表してあるので御参照いただきたい。¹⁾ この研究の背景には、(1) 最近になって2次元磁性体として理想的な物質が開発されたこと。(2) 2次元磁性体では、対称性 (Ising, XY, Heisenberg) のちがいでによって相転移の様相が大きく異なること。(3) 2次元 Ising モデルの厳密解が存在すること。²⁾ (4) 近年、AC 法による高感度比熱測定法が確立されたこと。などがあげられる。第1表に、測定に用いた物質の主な特性をいくつかあげている。

$K_2 Co F_4$, $Rb_2 Co F_4$ はイジング型異方性の大きな2次元反強磁性体の典型としてとりあげた。ハミルトニアンを

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j} \{ J_{\parallel} S_i^z S_j^z + J_{\perp} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) \}$$

と書いたとき、 $J_{\perp}/J_{\parallel} \sim 0.3$ 程度の異方的交換相互作用をもつ。詳細な解析の結果、磁気臨界比熱は Onsager によって解かれた対称的 log 発散を示す最初の例であることが確認された。 $J_{\perp} \sim 0.3 J_{\parallel}$ 程度の xy 型交換相互作用があるにも拘らず、臨界比熱が2次元 Ising モデルの厳密解に一致することは、鈴木・田中による厳密解からの展開法による計算³⁾ と一致しており、「普遍性」を実験的に支持するものである。第1図