

非平衡緩和法による 2 次元固液転移の研究

渡辺宙志, 湯川諭, 尾関之康¹, 伊藤伸泰

東京大学工学系研究科物理工学専攻

¹ 東京工業大学理工学研究科物性物理学専攻

2 次元剛体円盤系における Alder 転移の本質について、長い間議論が為されてきたが、まだ決着はついていない。本研究では系の隣接配向秩序の非平衡緩和過程を調べ、動的スケーリングを行うことで 2 回の KT 転移を確認した。これは Alder 転移を 2 回の KT 転移として説明する KTHNY 理論を支持する結果である。また、スケーリングにより決定された 2 つの相転移点は過去のモンテカルロによる結果と良い一致を見た。

1 はじめに

1.1 研究背景

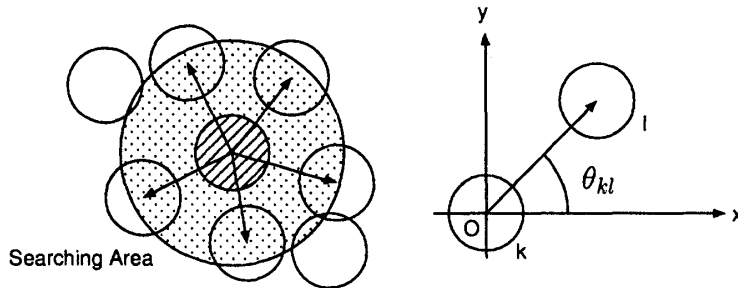
1962 年、Alder と Wainright が 2 次元剛体円盤系を分子動力学法でシミュレーションし、相転移を報告した [1]。これは斥力のみしか相互作用を持たない粒子系で液相－固相相転移が起きることと、初めて分子動力学法という手法を用いたという 2 点に於いて意義深い仕事であった。この相転移は後に Alder 転移と呼ばれるようになる。1966 年、Mermin と Wagner により、短距離相互作用をする系は 2 次元以下かつ有限温度で自発的に連続対称性を破れないという証明がなされた (Mermin-Wagner の定理)[2]。従って、2 次元剛体円盤系には長距離一秩序が存在しない、つまり結晶 (Crystal) を作ることができないことになる。以後、Alder 転移とはどのような転移なのかが議論の対象となってきた。

1972 年、Kosteritz と Thouless(と Berezinskii) がそれまで 2 次元 XY モデルなどで見られた相転移について、くりこみによる評価でそれまで知られていた相転移とは異なる転移が存在することを示した。後に KT 転移 (BKT 転移) と呼ばれるこの転移は、系の秩序変数がベキ的に緩和する領域を持つことを特徴とする。これは、転移点近傍でのみベキになる通常の 2 次転移と異なる特徴をもつ。

さらに 1978 年に Halperin と Nelson[3]、また独立に Young[4] が 1979 年に Alder 転移を 2 回の KT 転移として説明する理論を提唱した。この理論は Kosterlitz-Thouless-Halperin-Nelson-Young の名前を取って KTHNY 理論と呼ばれている。しかし、Chui による一次転移説もあり [5]、まだ決着はついていない。

	Solid	Hexatic	Liquid
Range	$0 < T < T_h$	$T_h < T < T_i$	$T_i < T$
点欠陥 (Dislocations)	Bound in pairs	Free	Free
線欠陥 (Disclinations)	Bound in quartets	Bound in pairs	Free
位置秩序 (Positional order)	Quasi-long	Short	Short
隣接配向秩序 (Bond-orientational order)	Long	Quasi-long	Short

表 1: Summary of predictions of the KTHNY theory



1.2 数値計算による研究

1.3 KTHNY 理論

KTHNY 理論では、系に誘起される 2 種類の欠陥を独立に扱っている。2 種類の欠陥とは点欠陥 (Dislocation) と線欠陥 (Disclination) で、それぞれが 2 次元クーロン気体と同じようなハミルトニアンに従うことを導き、それぞれが KT 転移を起こすために 2 回の KT 転移を予想している。2 回の転移があるために系には 3 種類の相が存在する。KTHNY では Solid と Liquid の他に Hexatic 相を導入する。それぞれの相の特徴を表にまとめる。表によると、隣接配向秩序を見れば 3 つの相を区別できることになる。KTHNY 理論に関しては K. J. Standburg による解説が詳しい [6]。

1.4 隣接配向秩序

配向秩序は粒子同士を結んだ線 (Bond) の向き (Orientation) の秩序を表す量である。具体的には、まず、ある粒子に着目し、その粒子の中心からまわりの粒子の中心へ線を引く。この線と適当な軸との角度を θ とすると、隣接配向秩序 ϕ_6 は以下のように定義される。

$$\phi_6 = \langle \exp(-6i\theta) \rangle$$

系が完全に三角格子を組んでいる場合 $\phi_6 = 1$ 、無秩序な場合は $\phi_6 = 0$ となるため、 ϕ_6 は系がどれだけ三角格子に近いかを表す秩序変数となる。

1.5 非平衡緩和法

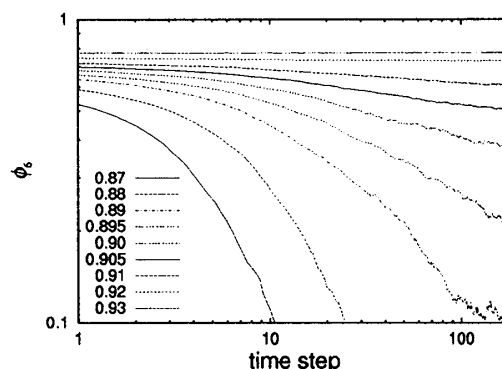
非平衡緩和法 (Non-equilibrium Relaxation Method) は秩序変数の非平衡緩和過程を調べることで平衡状態の情報を得る手法で、これまでスピン系に対して多くの成果を上げてきた [7, 8, 9]。本研究では分子動力学法を用いて時間発展させた粒子系に非平衡緩和法を適用した。

2 数値計算

本研究では計算の便から剛体円盤の代わりに十分硬い Young 率を持つ円盤系を用いて計算し、後に剛体系に外挿した [10]。粒子数 23256 個で、初期状態では完全秩序状態 ($\phi_6(\rho, t=0) = 1$) にそろえておき、ランダムな初期速度を与えて分子動力学法 (MD) で時間発展させた。Alder 転移がおこるとされる密度領域 0.85 から 0.95 について調べた。

2.1 計算結果

得られた ϕ_6 の時間発展の様子を右に示す。低密度では指数関数的に減衰し、高密度では定数になっている様子が見られるが、その間にべき的に緩和する領域 (KT 相) が存在するかどうかの判別は難しい。



2.2 動的スケーリング

そこで、動的スケーリングにより相転移点の決定を行った [11, 12]。臨界点近傍で $\phi_6(\varepsilon, t)$ は特徴的な緩和時間 τ を用いて $\phi_6(\varepsilon, t) = t^{-\lambda} \bar{\phi}_6(t/\tau)$ と表せる。ただし $\varepsilon = |\rho - \rho_c|/\rho_c$ である。くりこみによる解析から相関長 ξ は $\xi = g \exp(-h/\sqrt{\varepsilon})$ という指数的な強い発散を示す。動的スケール関係式 $\tau = \xi^z$ を用いれば $\tau = a \exp(-b/\sqrt{\varepsilon})$ と、 τ も同じ形で書ける。従って、 ϕ_6 は KT 転移点近傍で

$$\phi_6(\varepsilon, t) = t^{-\lambda} \bar{\phi}_6(t \exp(-a/\sqrt{\varepsilon}))$$

と表せる。ただし、この式に従うのは KT 転移点よりも低密度側 (高温側) のみである。従って ϕ_6 を縦軸に $t^{-\lambda}$ 、横軸に $t \exp(-a/\sqrt{\varepsilon})$ にとってプロットすれば、KT 転移以下の密度はスケールされ、KT 転移以上の密度はスケールされないことになる。

スケールした結果を図 2 と図 3 に示す。フィッティングパラメータは転移点と a 、 λ の三つである。どちらも転移点より下側だけがスケールされている。

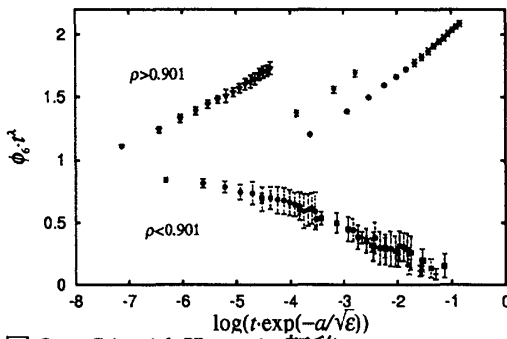


図2 Liquid-Hexatic 転移
転移点は 0.901(2)

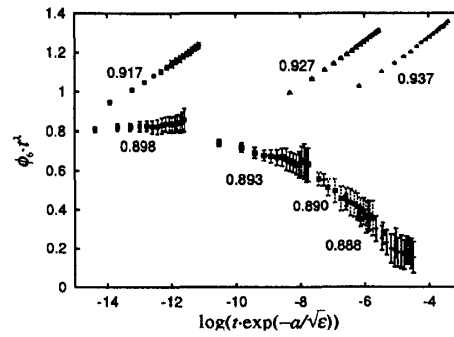


図3 Hexatic-Solid 転移
転移点は 0.910(2)

3 結論及び考察

本研究では隣接配向秩序の非平衡緩和過程を調べ、2回のKT転移を確認した。これはKTHNY理論を支持する結果である。動的スケーリングにより、相転移点は0.901(2)、0.910(2)と求められたが、これはJasterがモンテカルロで求めた結果、0.899(1)、0.91と良い一致を示している[13]。ただし、これらの値は一次転移説を取るほかの研究とは異なっており、これは強い有限サイズ効果によるものだと考えられる。Zollweg等は有限サイズ効果について詳しく調べ[14]、サイズが大きくなるにつれて共存領域が狭くなることを報告している。事実、最初にAlder等が報告した転移密度は0.880と0.912であり、その後計算能力の向上につれ、二つの転移密度は近づいていった。ただし、一次転移説を取る場合は、二つの密度は純粋な液体が実現する最高密度 ρ_i と純粋な固体が実現する最低密度 ρ_m の意味とする。定義から $\rho_m \geq \rho_i$ である。KTHNY説を取る場合は、二つの密度は中間相であるHexatic相の存在範囲($\rho_i \leq \rho \leq \rho_m$)を意味する。Zollweg等は熱力学極限において共存領域が生き残るかどうかはわからないとしているが、本研究において非平衡緩和法で無限系の情報を正しく得ているとするならば、非常に狭い領域ではあるが、共存相(Hexatic相)は存在すると結論できる。最近の研究では、Sengupta等がモンテカルロとくりこみを組み合わせた議論を展開し、KTHNYのくりこみ方程式は一次転移と連続転移が微妙な範囲にあると報告している[15]。それによれば数値計算では二つの転移のクロスオーバーが見えてしまい、どちらか区別するのは難しい。本研究により、KTHNY理論を支持する票を一票投じたことになるが、今後、さらに精度が高く、かつ決定的な証拠の発見が待たれる。

参考文献

- [1] B. J. Alder and T. E. Wainwright, J. Chem. Phys. **27**, 1208 (1957).
- [2] N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966)
- [3] B. I. Halperin and David R. Nelson, Phys. Rev. Lett. **41**, 121 (1978).

- [4] A. P. Young, Phys. Rev. B **19**, 1855 (1979).
- [5] S. T. Chui, Phys. Rev. Lett. **48**, 933 (1982).
- [6] K. J. Strandburg, Rev. Mod. Phys. **60**, 161 (1988).
- [7] N. Ito, Physica A **196** 59 (1993).
- [8] N. Ito, Physica A **192** 604 (1993).
- [9] N. Ito, K. Fukushima, K. Ogawa and Y. Ozeki, J.Phys.Soc.Jpn. **69**, 1931(2000).
- [10] W. Vermöhlen and N. Ito: Phys. Rev. E **51**, 4325 (1996).
- [11] Y. Ozeki, K. Ogawa and N. Ito, in preparation.
- [12] Y. Ozeki and N. Ito; in Proceedings of “Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics XV” ed. D. P. Landau, S. P. Lewis and H.-B. Schüttler, Springer-Verlag (2002).
- [13] A. Jaster, Phys. Rev. E **59**, 2594 (1999).
- [14] J. A. Zollweg, G. V. Chester and P. W. Leung, Phys. Rev. B **39**, 9518 (1989).
- [15] S. Sengupta, P. Nielaba and K. Binder, Phys. Rev. E **61**, 6294 (2000).