

「二次相転移に於ける比熱の異常性について」

鈴木 増 雄 (東大理)

複素温度平面に於ける零点分布と比熱の異常性との関係を議論する。この問題はいろいろな人によって調べられているが、^{1~6)} 今までの議論は、零点分布が一次元分布 (又は、その単なる重ね合せ) の場合について行なわれて来た。ここでは、二次元分布の場合を調べ、一次元の場合と本質的に違った特徴が現われることを示す。⁷⁾ 即ち、転移点の上・下で、比熱の異常性の index α , α' が異なり得ることが示される。具体的な例として、Wuによって解かれた、modified Slater KDP モデルの零点分布をとりあげる。

さて、今、状態和 Z_N が温度 T の適当な関数 $z = z(T)$ の多項式で表わされる場合を考えよう (Ising モデルでは、 $z = \tanh(J/kT)$, Slater モデルでは、 $z = e^{-\epsilon/kT}$, etc.). $Z_N = 0$ の根を $\{z_k\}$ とすると、状態和は、

$$Z_N(z) = Z_N(0) \prod_k (1 - z/z_k) \quad \dots\dots\dots (1)$$

と表わされ、 $N \rightarrow \infty$ の極限で、free energy は、

$$F(z) = F(0) - kT \iint \ell_0 g \left(1 - \frac{z}{x+iy} \right) g(x, y) dx dy \quad \dots\dots\dots (2)$$

と書ける。ここに、 $g(x, y)$ は、 z -plane 上の点 $x + iy$ に於ける零点分布を表わす。Hamiltonian のエルミート性より、

$$g(x_1 - y) = g(x, y) \quad \dots\dots\dots (3)$$

がなり立つ。この対称性を用いると、(2) は、

$$F(z) - F(0) = -\frac{kT}{2} \iint \ell_0 g \left(\frac{(z-x)^2 + y^2}{x^2 + y^2} \right) g(x, y) dx dy \quad \dots\dots (4)$$

となる。これより、系のエネルギーは、

$$E = \frac{\partial}{\partial(\frac{1}{T})} \left(\frac{F}{T} \right) = -k \frac{\partial z}{\partial(\frac{1}{T})} E_{\sin g}(z) + \frac{\partial}{\partial(\frac{1}{T})} \left(\frac{F(0)}{T} \right) \quad \dots\dots\dots (5)$$

と書ける。ここに,

$$E_{\text{sing}}(z) = \iint \frac{z-x}{(z-x)^2 + y^2} g(x,y) dx dy \quad \dots\dots\dots (6)$$

である。

まず, 始めに, 零点分布が, 中心対称の場合を考えてみよう。即ち,

$$g(x,y) = g(r) \quad \dots\dots\dots (7)$$

(6) 式より,

$$E_{\text{sing}}(z) = \frac{1}{z} \int_0^\infty g(r) dr \int_0^\pi \left(r + \frac{z-ar}{a-\cos\varphi} \right) d\varphi \quad \dots\dots\dots (8)$$

ここに,

$$a = (z^2 + r^2) / (2zr)$$

定積分の公式

$$\int_0^\pi \frac{d\varphi}{\sqrt{a^2 - \cos\varphi}} = \frac{\pi}{\sqrt{a^2 - 1}} \quad (a > 1) \quad \dots\dots\dots (9)$$

を用いると, (8) は, 簡単になり,

$$E_{\text{sing}}(z) = \frac{2\pi}{z} \int_0^z g(r) r dr \quad \dots\dots\dots (10)$$

と表わされる。この結果は, 静電場の analogy を用いると, 次のように解釈される。即ち, $E_{\text{sing}}(z)$ は, xy plane に垂直な方向には, 一様な電荷分布 $g(r)$ によって作られる静電場である。

(10) に対応する比熱は,

$$C_{\text{sing}}(z) = \frac{1}{z} \frac{d}{dT} \{ z E_{\text{sing}}(z) \} = 2\pi g(z) \frac{dz}{dT} \quad \dots\dots\dots (11)$$

「二次相転移に於ける比熱の異常性について」

となり、零点の分布関数の異常性が、そのまま、比熱の異常性に反映されることがわかる。図1～3のようないろいろな異常性が考えられる。それに対応して、比熱も同じ異常性を示す。一般に、 $g(r)$ が、 $(n-1)$ 次の微係数まで連続で、 n 次が発散又は不連続となる場合には、系は、 $(2+n)$ 次の相転移を表わす。

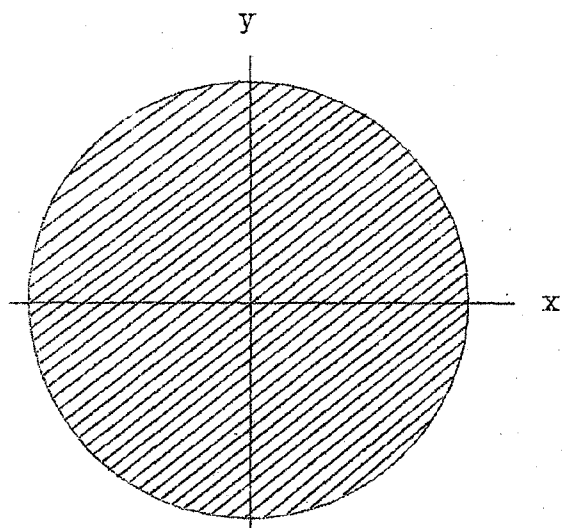


Fig. 1-a

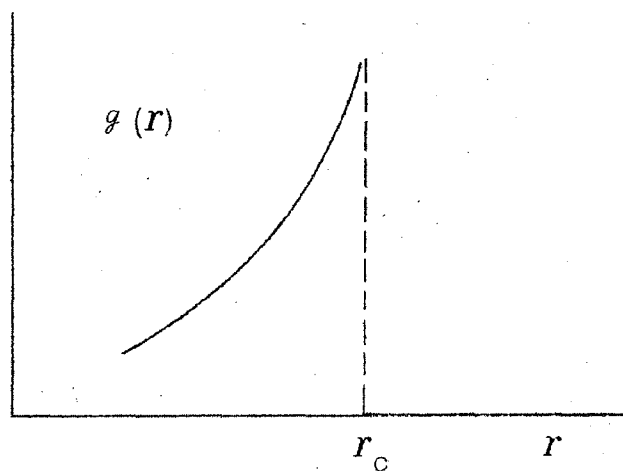


Fig. 1-b

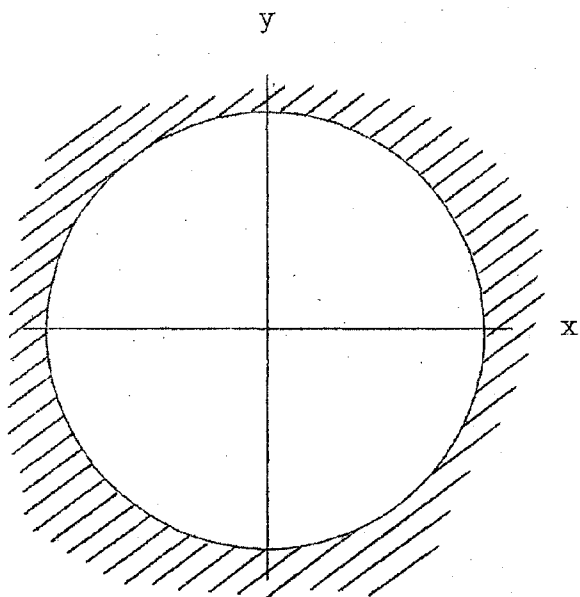


Fig. 1-a

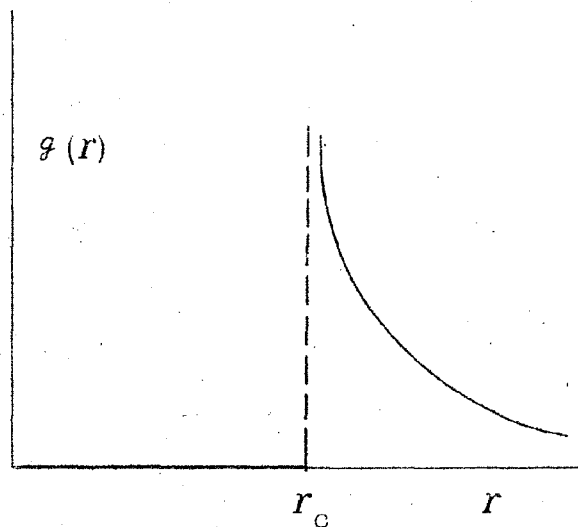


Fig. 1-b

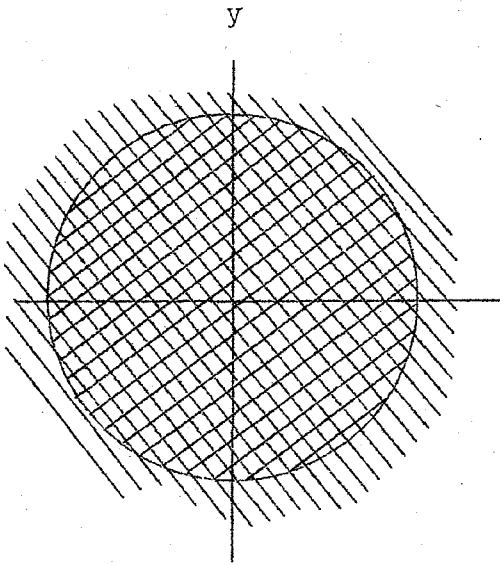


Fig. 3-a

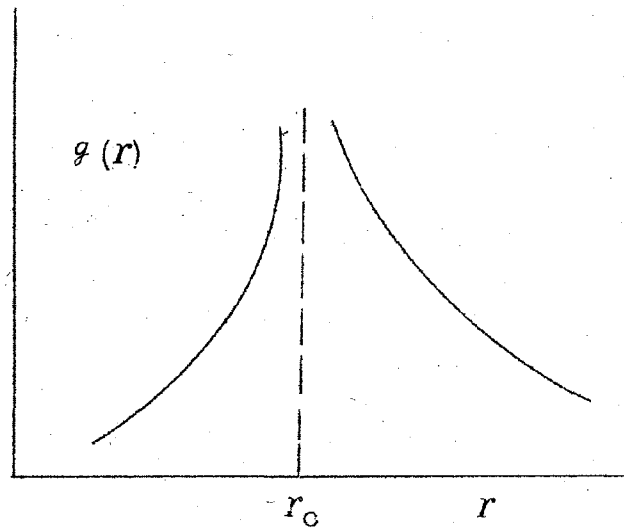


Fig. 3-b

次に，分布関数が，一般に φ にも依存する場合を考えてみよう。対称性(3)より，Legendre の多項式を用いて，次のように展開される。

$$g(r, \varphi) = g(r, -\varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} g_n(r) P_n(\cos \varphi) \quad (12)$$

ここに，

$$g_n(r) = \frac{2n+1}{2} \int_0^{\pi} g(r, \varphi) P_n(\cos \varphi) \sin \varphi \, d\varphi \quad (13)$$

energy の singular part は，(6)式より，

$$E_{\text{sing}}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} E_{\text{sing}}^{(n)}(z) \quad (14)$$

ここに，

$$E_{\text{sing}}^{(n)}(z) = \frac{1}{z} \int_0^{\infty} g_n(r) \int_0^{\pi} \left(r + \frac{z-ar}{a-\cos \varphi} \right) P_n(\cos \varphi) \, d\varphi \, dr \quad (15)$$

Legendre 多項式の漸化式を用いて，

「二次相転移に於ける比熱の異常性について」

$$\int_0^\pi \frac{1}{a - \cos \varphi} P_n(\cos \varphi) d\varphi = \frac{A_n(a)}{\sqrt{a^2 - 1}} + B_n(a) \quad (16)$$

という性質が容易に導かれる。ここに、 $A_n(a)$ 、 $B_n(a)$ は、 a の多項式である。依って、中心対称の場合と同様にして、比熱は、

$$C_{\text{sing}}(z) \simeq 2 \sum_{n=0}^{\infty} A_n(1) \frac{dz}{dT} \cdot g_n(z) \quad (17)$$

となり、零点の分布関数が、直接、比熱の異常性に反映する。

次に、例として、modified Slater KDP モデル^{8,9)} を考えてみる。original な Slater モデル⁸⁾ では、図のようにすべての lattice bond に矢印をつけた diamond-type lattice を考える。KDP の相転移のメカニズムとして、矢印のつけ方に、次の規則を与える。一つの格子点には、必ず、二つの矢が向かい、二つの矢が出て行くように配列する。結局、図4のように6つの configuration がある。結晶の異方性を反映させ、図4のように6つの configuration の中、二つの状態には energy 0 を、残りの4つには、energy $\epsilon > 0$ を与える。

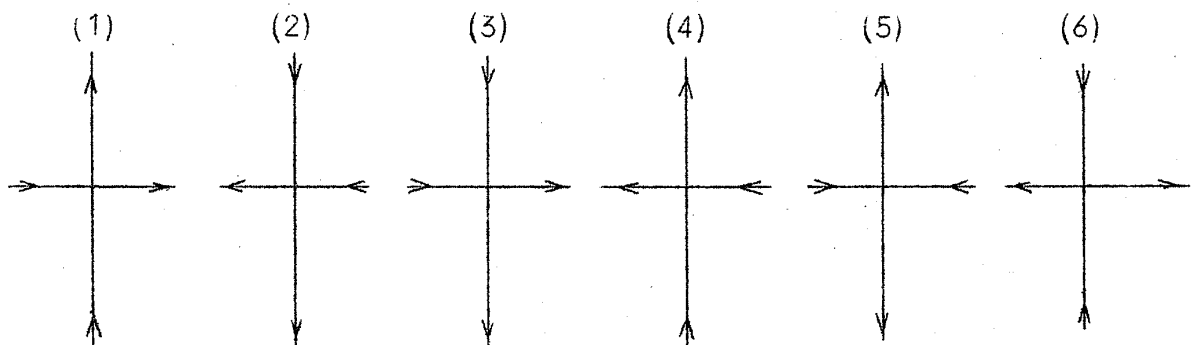


Fig. 4

W_u は、zero-energy configuration の中、一つを exclude したモデルの解を、次のように厳密に求めた。⁹⁾ 今の問題に便利な型に整理して書くと、

$$\log Z = \frac{N\epsilon}{kT} + \frac{N}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \log f(\theta, \varphi, z) d\theta d\varphi \quad \dots\dots\dots (18)$$

となり、ここで、

$$f(\theta, \varphi, z) = [z - (\cos\theta + \cos\varphi)]^2 + (\sin\theta + \sin\varphi)^2 \quad \dots\dots\dots (19)$$

ここで、 $z = z(T) = e^{\epsilon/kT}$

状態和の零点は

$$Z = x + iy = \cos\theta + \cos\varphi \pm i(\sin\theta + \sin\varphi) \quad \dots\dots\dots (20)$$

と考えられるから、分布関数は、(20) の対応の 2 価性を考慮して、

$$\begin{aligned} g(x, y) &= 2 \cdot \frac{\partial(\theta, \varphi)}{\partial(x, y)} \cdot \frac{1}{8\pi^2} \\ &= \frac{1}{\pi^2 r \sqrt{4-r^2}} \quad \dots\dots\dots (21) \end{aligned}$$

となり、中心対称性をもっており、(7) の良い例になっている。 $r=2$ が singular point で、 $r > 2$ では、 $g(r) \equiv 0$ となり、図 1 にあたる。依って、比熱は、

$$\begin{cases} C^+ = \frac{\epsilon^2}{\pi k T^2} \left(e^{-2\epsilon/kT} - \frac{1}{4} \right)^{-\frac{1}{2}} \text{ for } T > T_c, \\ C^- = 0 \text{ for } T < T_c ; \quad T_c = \epsilon / (k \log 2) \quad \dots\dots\dots (22) \end{cases}$$

となる。このように、二次元的零点分布の場合には、比熱の異常性の index が T_c の上・下で異なる ($\alpha = 1/2$, $\alpha' = 0$) 場合があり得ることは注目すべきことである。

「二次相転移に於ける比熱の異常性について」

References

- 1) M. E. Fisher, Lectures in Theoretical Physics VII C.
(1965) p. 1
- 2) G. L. Jones, J. Math. Phys. 7 (1960) 2000.
- 3) R. Abe, Prog. Theor. Phys. 38, no. 2 (1967).
- 4) S. Ono, Y. Karaki, M. Suzuki, and C. Kawabata, Physics Letters 24A (1967) 703.
- 5) S. Katsura, to be published in J. math Phys.
- 6) M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. no. 7701 (to be published).
- 7) M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. no. 7818 (to be published).
- 8) J. C. Slater, J. Chem. Phys. 9 (1941) 16.
- 9) F. Y. Wu, Phys. Rev. Letters 18 (1967) 605.

Figure Captions

- Fig. 1-a. zeros distribute inside the circle of the radius r_c
- Fig. 1-b. Illustrating a schematic distribution function which is divergent just below r_c
- Fig. 2-a. Zeros distribute outside the circle of the radius r_c
- Fig. 2-b. Illustrating a schematic distribution function which is divergent just above r_c
- Fig. 3-a. Zeros distribute both inside and outside the circle of the radius r_c
- Fig. 3-b. Illustrating a schematic distribution function which is divergent both above and below r_c
- Fig. 4. Energies $e_1 = e_2 = 0$, $e_3 = e_4 = e_5 = e_6 = \epsilon > 0$ are associated with the six configurations.