

## 論文内容の要旨

論文題目 Entropy-Induced Novel Ordered Phases in Three-Dimensional Systems

(和訳 エントロピーによって誘起される三次元系での新しい秩序形態)

氏名 轟木 義一

フラストレート系などに見られる, 多くの状態が縮退していたり, または, 自由エネルギーの最小値に非常に近い場所に状態がある場合には, ほんのわずかな摂動によっても縮退が解けたり, 自由エネルギーの最小値が入れ替わりする事によって相転移が現れる可能性がある. 本研究では, このような系での, 特に, 三次元系での熱揺らぎ(エントロピー)の効果や量子揺らぎの効果を検討する事によって現れる相転移を取り扱った. このような揺らぎの効果によって現れる相転移は **Entropy-induced phase transition** と呼ばれる. 本研究では **Entropy-induced phase transition** が起ると予想される, 6 状態一般化クロックモデル, 積層三角格子反強磁性イジングモデル, 励起状態間の量子遷移の効果を取り入れた量子 **Blume-Capel** モデルの三つの系を取り扱った. 初めの二つの系では熱揺らぎのために逐次相転移が現れ, 最後の系では量子揺らぎのために古典極限では現れなかった相転移が現れる.

6 状態一般化クロックモデルは,  $Z_6$  対称性を持っているモデルである. そのエネルギーパラメータを調節することによって積層三角格子イジングモデルや 3 状態反強磁性ポッツモデル等の他の  $Z_6$  対称性と同じ秩序相の構造がこのモデルで実現すると思われる. すなわち, このモデルは  $Z_6$  対称性を持つモデルの一般的なモデルと言える. 繰り込み群の研究やシミュレーションを用いた解析の結果, 二次元の場合の  $Z_6$  対称性を持つモデルは一回の 1 次転移か, もしくは 2 回の逐次転移をしてコスタリツースウレス相と呼ばれる二次元特有の相関関数が冪的に振舞う中間相が現れる事が解っている. しかしながら, 3 次元の場合については, 秩序相の構造はあまりよく解っておらず, 中間相が現れるかどうか, 現れたならばその性質はどうか, 2 次元の場合と同じように 3 次元 XY モデルの低温相に対応する相が現れるのかどうかという事などが古くから議論されていたが未だに結論が出ていない問題であった. 3 次元の均等な 6 状態クロックモデルについては, 中間相がなく, 今まで見えていた中間相は, 相関長が有限だが非常に長いためにシミュレーションでは十分なシステムサイズが取れていなかったための見かけ上のギャップ相である事が明らかにされた. さらに,  $Z_6$  対称性を持つモデルの繰り込み群の研究によって  $Z_6$  対称性を持つモデルに特徴的な高温側の転移点付近での繰り込み群の流れの漸近的な振る舞いによる強い有限サイズ効果である事が説明された. さらに, この考察によって得られたスケーリング関数を用いる事によって 3 状態反強磁性 Potts モデルについても同様に中間相がないという事が解っている. しか

しながら、このクロックモデルと Potts モデルはパラメータ空間上の中間相が出にくいパラメータに位置していると考えられるので、この二つのモデルで中間相が出なかったからといって、3次元の  $Z_6$  対称性を持つ全てのモデルで中間相が現れないと結論づけることはできない。そこで我々は6状態一般化クロックモデルにおいて中間相がしやすいエネルギーパラメータを用い、相転移と秩序相について調べた。我々はこのモデルを詳細に調べることにより中間相として熱揺らぎによって隣り合う二つの状態が交じり合うことによって不完全秩序相 1 (IOP1) と呼ばれる安定な相が現れることを明らかにし、また、IOP1 の揺らぎの性質を調べる事により、この IOP1 は二次元系の場合とは異なり、低温相と同じ相関長が有限な堅い相だという事を明らかにした。また、相転移については、二つの転移のうち、高温側の転移は 3D-XY ユニバーサリティクラスに属すること、また、低温側の転移は一次である事を明らかにした。このような結果から、 $Z_6$ モデルの繰り込み群を用いた研究とコンシステントになり、 $Z_6$ 対称性を持つモデルの相転移と秩序相の長年の疑問は解決した。

積層三角格子反強磁性イジングモデルは  $\text{CsCoCl}_3$  や  $\text{CsCoBr}_3$  のモデルとして知られている。これらの物質はフラストレーションのために磁氣的に逐次転移をすることが中性子散乱の実験により解っている。この性質は最初に目片によって次近接相互作用のある三角格子イジングモデルの平均場近似を用いて説明された。目片の結果では、この物質は  $T_{N1}$ ,  $T_{N2}$  と  $T_{N3}(T_{N1} < T_{N2} < T_{N3})$  において3回の2次転移をし、 $T < T_{N1}$  では2つの副格子磁化が同じ大きさの2副格子フェリ磁性相、 $T_{N1} < T < T_{N2}$  では3つの副格子磁化がすべて異なる大きさの3副格子フェリ磁性相、 $T_{N2} < T < T_{N3}$  では三つの副格子のうち一つが秩序化しない部分無秩序相が現れると予想されていた。しかしながら、低温側の転移点  $T_{N1}$  および  $T_{N2}$  では比熱など物理量の異常が実験で観測されていない。また、この系に対して小関らの数値的な研究があり、中性子散乱の実験や比熱の温度依存性をよく再現していたが、中間相の性質や低温側の転移の性質などは明らかになっていなかった。このように、低温側の転移の性質は十分には解っていなかった。そこで我々は、積層三角格子反強磁性イジングモデルについて詳しい解析を行った。その結果、3副格子フェリ磁性相は現れず、部分無秩序相から2副格子フェリ磁性相への転移は1次転移だという結果を得た。もし1次転移だとするならば、なぜ比熱に飛びがないのかという長年の問題に対して、我々は、潜熱に一番寄与していると思われていた  $c$  軸に沿ったドメインウォールの数に関する考察を行った。それによると、副格子ごとでは飛びがあるが、系全体としては3つの副格子の間でちょうど打ち消し合い転移前と後でドメインウォールの数に飛びが見えず、すなわち、 $c$  軸方向の相互作用の寄与がほとんどないことが解った。したがって、この転移はエネルギー的に一番寄与しているドメインウォールの数の変化が打ち消しあうため潜熱が非常に小さい1次転移だという事を明らかにした。また、平均場近似による解析に関しては、クラスター平均場近似を用いて計算をし、クラスターのサイズを大きくしていくと、それに伴って3副格子フェリ磁性相がなくなっ

て行くことを確認した. すなわち, 3 副格子フェリ磁性相は揺らぎに対して安定ではないという結果を得た. 結局, 積層三角格子反強磁性イジングモデルの相転移の機構は, 6 状態一般化クロックモデルと同じであることが解り  $Z_6$  対称性モデルの新しい様相の理解に到達する事ができた.

最後に量子ゆらぎが重要な相転移として, 励起状態間のホッピングの効果を取り入れた量子 Blume-Capel モデルを調べた. Blume-Capel はスピン変数として二つの励起状態と一つの基底状態を持つモデルで隣り合うスピン変数同士は励起状態間に交換相互作用が働く. また, 励起状態と基底状態のエネルギー差は化学ポテンシャルによって与えられている. 我々はまず平均場近似を用いてこのモデルを調べた. このモデルは古典系では化学ポテンシャルが大きい領域では基底状態に落ち込んでしまうので, 秩序相が現れないが, 励起状態間の量子遷移を考慮すると, 量子揺らぎが取り入れられ, その効果によって励起状態が下がり, 有限温度で秩序が現れる事が解った. また, 量子モンテカルロシミュレーションを行い, 平均場近似の結果を確かめた. さらに我々はこのモデルを量子誘電体である  $\text{StTiO}_3$  のモデルとして提案した.  $\text{StTiO}_3$  は絶対零度でも量子揺らぎの為に強誘電相転移を示さず誘電率が低温で大きな値を保って温度変化に対して飽和現象を示す量子常誘電体として知られているが, 酸素同位体置換を行う事によって強誘電相が出現する. しかしながら, TO フォノンのエネルギーを見てみると, 相転移の振る舞いをしておらず, この強誘電転移の機構は明らかになっていなかった. 我々は, 新しい自由度として  $\text{TiO}_6$  クラスターの励起状態を考え, この転移を励起状態間のホッピングの効果を取り入れた量子 Blume-Capel モデルで説明できると考えた.

#### $\text{O}_{16}$ から $\text{O}_{18}$ に同位体置換

する事によって励起状態間のホッピング, すなわち量子効果が抑制されたと考えると, 実験を矛盾なく説明できる事を示した.