相転移の過程と時分割散乱実験

基礎工学部　　山　田　安　定（豊中4685）

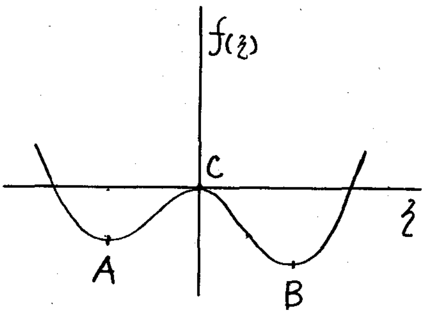
§1.　1次相転移とパターン形成

固体の相転移現象は、外部環境のわずかな変化で固体の状態に目ざましい変化を生ずるので、大変興味があり、長らく固体物理学の中心的課題のひとつであったといえる。このうち2次相転移については、熱平衡を保ったままいくらでも相転移点に近づけるから、平衡系、又はそのまわりの線型ゆるぎの統計的性質を問題にすればよく、その立場から臨界現象が議論されて来た。

一方1次の相転移は、ひとつの準安定状態から安定状態への転移であるから、自由エネルギーの非線型性が重要な役割を演ずる非平衡系の問題であり、本質的な困難をかかえているのでなかなか手がつけられなかったが、最近ようやく種々の分野で進展の気運が見えて来ている。[1)]

1次相転移の大きな特徴は、最近の準安定状態および最後に到達する安定状態が空間的にhomogeneousであるとしても、その途中の過程では必ず空間的にheterogeneousなあるパターンを形成することである。

その理由は既に古典的ないわゆる核生成－成長理論で暗黙のうちに了解されていたことであって、一様な状態A（第1図参照）から一様な状態Bに達する最も〃楽〃な道筋は一様に状態Cを通るのではなく、先ず小さなBのドメインを形成し、次にこのドメイン境界を移動させればよいことによっている。



第1図
1次相転移点附近での局所自由エネルギー曲線。準安定A状態から安定B状態へ転移するのに、全空間にわたり一様にC状態を通る必要はない。

1次相転移の物理学はこの意味でパターン形式とその発展に関する問題であるといってよいであろう。このようなパターンの空間的スケールは、初期段階ではセミミクロなサイズ、又発展の時間的スケールは外的条件によって極端にかわり、nsec領域からhr の領域迄かわり得る。そこでこれを研究するひとつの手段として時間的に区切られた範囲でのX線や中性子線の散乱パターンを解析することが直ちに考えられる。殊に最近はシンクロトロン放射光源や2次元検出器などの技術的進歩によって極めて短時間の散乱パターン情報を相当よい精度で得られるようになって来ている。これが動的構造解析の手法で1次相転移のパターンの時間発展の問題にも適用されて来ている。

§2　1次相転移におけるスケーリング則と指数則

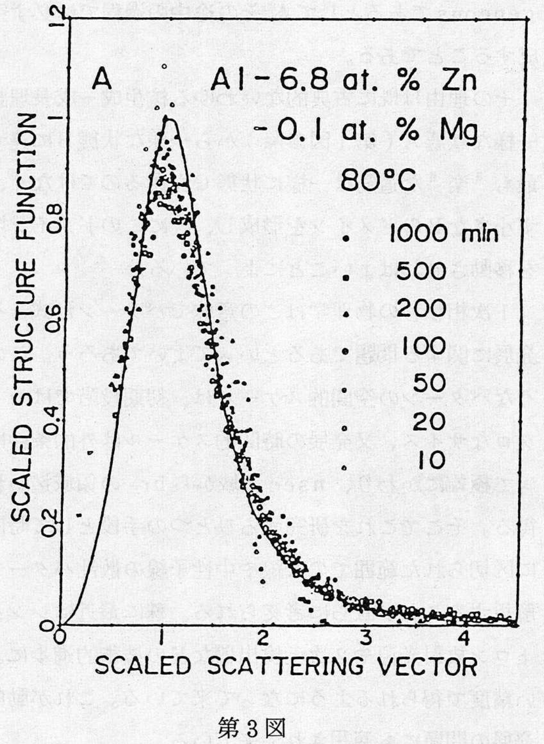
1次相転移を議論する上で最も重要な概念は、空間的パターンの「スケーリング」の仮説である。これは端的にいえばパターンの成長発展過程において、勿論パターンそのものは時間と共に変化するが、しかし「適当に時間および空間のスケールを変換すると常に同一のパターンになる」ことを仮説として主張するものである。

第2図は電子顕微鏡でFeAl合金の相分離過程の時間発展を見たもの[2]であるが、パターンそのものは非常に複雑であるが確かにある自己同一性が成立っているように見える。又第3図はAlZn合金の相分離過程[3]の中性子小角散乱のパターンが逆空間のスケール変換によって、只ひとつのuniversal関数（図の実線）に還元されることを示したものである。図の実線はFurukawa[4]によって理論的に予想されたスケーリング関数であり、具体的に、

$$\tilde{S}(x) = \frac{x^2}{1+x^6}$$

という簡単な関数形をもっている。

第2図
FeAl合金の相分離過程の電子顕微鏡像の時間変化。パターンに相似性が見られる。



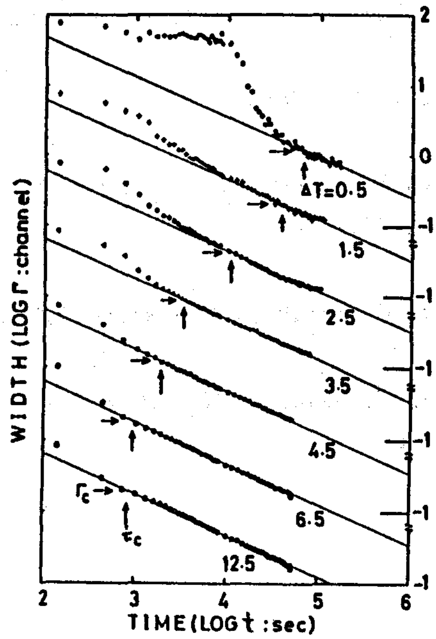
第3図
AlZn合金の相分離過程に見られる散乱スペクトルのスケーリング則（文献(3)による）。実線はFurukawaによる理論的予測。

指数則はスケーリング則に附随してあらわれる。上のようなスケーリング則が成立つためには、各時刻においてパターンを特徴づける只ひとつの空間的スケール$\hat{R}(t)$が存在しなければならない。この$\hat{R}(t)$の時間依存性の漸近的振舞いが

$$\hat{R}(t) \longrightarrow t^{a}$$

とかけるとすると、aの値は個々の系にそれ程はよらない普遍的常数と考えられ、次元性、秩序変数の保存性など基本的な性質のちがいに応じて$a = 1/2,\ 1/3,\ 1/5,\ 1/6$ などの値が提唱されている。第４図は、Cu_3Au合金で散乱スペクトル巾$\Gamma(t)$（物理的に$\hat{R}(t)$の逆数に相当する）の対数プロットであるが[5]、tの大きい所で理論的に予測されている$a = 1/2$に一致するのが見られる。

これらの普遍的性質：スケーリング則と指数則が実際成立つかどうかは１次相転移の発展過程の統一的理解のためにきわめて重大な問題であるから、最近計算機実験をふくめて種々の系について検証が進められている。結果はおおむね肯定的であることが多いようである。



第４図
Cu_3Au合金の配置秩序化過程における指数則。スペクトル巾$\Gamma(t)$はドメインサイズ$R(t)$の逆数を与える。実線は指数$a = 1/2$に対応する。後期過程ではクエンチ温度によらず$a = 1/2$に一致するのが見られる。

§３. フラストレーション系と時間発展

２次元三角格子上のスピン配列に典型的に見られるように、すべてのスピン対相互作用エネルギーを最低にするような只ひとつのつじつまの合う配列がなく、基底状態附近に殆んど無限に多くの縮退をふくむ時は、相転移現象はいろいろと奇妙な振舞いを示す。配列のカオス的振舞い、秩序形成の異常な slow down などである。

もともとカオス状態とは非線型系で位相空間内の trajectory が初期条件の無限小の変化に対してきわめて敏感で、時間とともに急激にはなれてしまうことで特徴づけられる。フラストレーション系での空間的カオス状態ではこれに対応して、境界にあるひとつのスピン状態を少しかえると、他のスピンは全くその配列の様相をかえることを意味している。現実の物質では境界条件をコントロールすることはできないから、実測されたスピン配列のパターンは一見「渾沌」として、それがもともとは決定論的な方程式から決められた状態とはとても見えない。このようなカオス状態からの散乱パターンは規則的なブラッグ散乱ではなく、きわめて広く分布した散漫散乱を与える（ただし、この散乱は２次相転移の近傍での秩序のゆらぎによる散漫散乱とは異なり、強度は非常に強い）。

又、このようなカオス状態では平衡状態とエネルギー的に殆んど縮退した多くの状態のひとつであ

るから、系を真の平衡状態に到達させるための駆動力は殆んどなく、従って非常にゆっくりした緩和が見られる。これはスピングラス系での緩和の slow down と同じ性質のものと考えてよく、その物理的特徴を明らかにすることは今後の興味ある課題のひとつである。

参 考 文 献

1) 1次相転移の最近の review として
J.D. Gunton, M.S. Miguel and P.S. Sohni: *Phase Tronsitions and Critical Phenomena* Vol.8, ed. C. Domb and J.L.Lebowitz, Academic Press (1983).

2) 文献(1)より転載.

3) S. Komura, K. Osamura, H. Fujii and T. Takeda: Phys. Rev. B **30**, 2944(1984).

4) H. Furukawa: Physica **123** A, 497(1984).

5) Y. Noda, S. Nishihara and Y. Yamada: to be published in J. Phys. Soc. Jpn.