

秩序化過程の動力学

— 界面と渦糸の運動と統計 —

豊 木 博 泰

秩序化過程の動力学

—— 界面と渦系の運動と統計 ——



豊木博泰

1986年 1月

< 目 次 >

第 1 章	序論	
第 1 節	はじめに	3
第 2 節	秩序形成の動力学の構成	6
	(I) 不安定, 準安定状態の熱力学	
	(II) 動力学のモデル	
第 3 節	スカラー場の秩序形成の熱力学	16
	(I) 動力学の分類	
	(II) 線形理論	
	(III) LBM 近似	
第 2 章	欠陥の運動方程式	29
	(I) 界面の運動方程式	
	(II) 渦系の運動方程式	
第 3 章	界面の熱力学 :	
	非保存スカラー場の秩序化過程	
第 1 節	平均場理論	49
第 2 節	1 場理論	51
第 4 章	動的 Ising モデルのシミュレーション	
第 1 節	モデルと方法	60
第 2 節	シミュレーションの結果と本理論との比較	64
第 5 章	界面の運動とフラクタル次元 :	
	界面の離散的モデル	78

第6章	渦系の動力学： 複素場の秩序化過程	
第1節	平均場理論	84
第2節	u 場理論の適用	86
第7章	まとめ	90
付記		92
謝辞		93
付録	A	94
	B	99
文献		102

第 1 章 序 論

第 1 節 はじめに

熱力学的に不安定あるいは準安定な状態にある系が、安定状態へ変化していく過程についての研究は古くから行われてきた。スピノーダル分解や核生成と呼ばれる現象はその代表例である。それらに対する熱力学的考察は、すでに Van der Waals や Gibbs によって行われている。しかし、動力学が研究されはじめるのは新しく、約30年前のことである。¹⁾ 当初の理論は、秩序変数の運動に関する線形理論で、系が不安定状態から変化しはじめる初期の段階では有効である。しかし、線形理論では、い、たゝ変化したした秩序変数は成長するだけで落ち着くところを知らない。不安定状態から出発し平衡状態に至る動的過程は本質的に非線形な現象なのである。

最近の十数年、非線形的時間発展についての研究が精力的に行われるようになった。この分野の膨大な仕事はいくつかの総合報告にまとめられている。²⁾ 様々なモデルが登場し様々な手法が用いられているが、それらの相互関係を明確にし、統一的モデルに基づいて理解できるまでには至っていない。どこまで統一的モデルに基づいて議論できるかについても意見はわかれるであろう。本論文では連続場の理論的モデルに基づいて、熱平衡秩序への動的過程を統一的に理解しようと試みる。

今日まで、スピノーダル分解・核生成の問題といえば、秩序変数がスカラーである系に対象が限られていた。

しかし、相転移に伴う秩序形成という課題はもと多様な対象を含んでいる。⁴⁾Heの超流動相は量子力学的波動関数の巨視的秩序と考えられるから、局所的秩序変数は複素数である。また液晶系では、局所的秩序変数はテンソル量になる。これらの、多自由度な秩序変数をもつ体系の動力学も含むモデルを考える必要がある。

その際、動的臨界現象の研究の成果は大変参考になる。臨界領域における体系の動的ふるまいは体系の微視的な個性によらず、大きな普遍性をもつ。³⁾それは (i) 空間の次元、(ii) 秩序変数の対称性、(iii) 相互作用の距離依存性、(iv) 秩序相における巨視的集団運動モードの性格によって分類される。(i)~(iii)は静的臨界現象における普遍性クラスの指標でもある。臨界現象では、秩序変数の巨視的ゆらぎが本質的に重要な役割をはたす。体系を構成する原子・分子の性質は (i)~(iv)の点を通じて巨視的運動に反映される。そこで、それぞれのクラスに対応する現象論的運動方程式が考案された。これらの方程式はTDGLW方程式 (Time-dependent Ginzburg-Landau - Wilson equation) と総称される。また、それから臨界現象を説明する理論体系は動的くりこみ群理論と呼ばれる。理論と実験との一致は見事である。³⁾本研究で対象とする非平衡状態からの秩序形成の問題も、同様な時間・空間スケルでの現象であるから広い普遍性が存在するはずである。また、それを総合的に理解する上で、TDGLW方程式タイプの連続場モデルに基づく理論体系を考えることは意義深いであろう。この観点にたって、考えうる現象の整理を次の節で行う。

理論の目標は、巨視的変数の時間発展を、それらの初期状態と終状態における値のみをパラメータとして含む関数たちで与えることである。とくに秩序変数の二点相関

関数が重要な量であるか、それらが求められることは稀である。本研究の主たる対象である秩序 - 無秩序転移をおこす系を急冷したときの動力学は、最も単純な体系であるゆえに、その稀な成功例の一つとなった。それに次ぐ簡単な体系は、先にあげた ^4He のような複素数の秩序変数をもつ体系であり、本研究の才二のテーマはこの体系の動力学である。これはまだ完成されていないので、途中までの成果を述べることに留める。

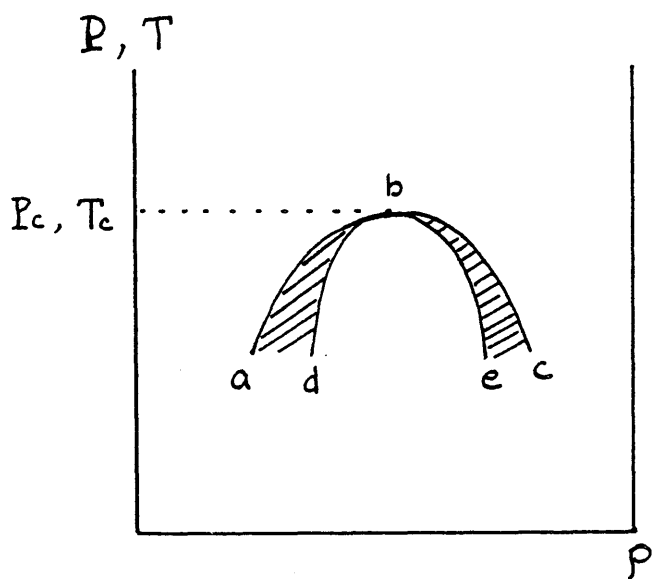
本論文の構成は以下のものである。次節では秩序形成の動力学について、連続場モデルに基づく普遍性クラスのカテゴリを試みる。才4節では、最もよく研究されているスカラー場のスピノーダル分解と核生成の問題に関する従来の理論的成果について述べる。ここには、スカラー場が保存量である場合も非保存量である場合も含まれる。後者は才2章以降で研究される体系である。以上の節で秩序形成の動力学における本研究の意義を明らかにする。才2章においては、秩序化過程の後期の段階における欠陥の運動の重要性について述べ、それらに対する運動方程式を導く。欠陥が消失していく過程が秩序化過程である。才3章では、秩序 - 無秩序転移を起す体系の秩序形成の動力学理論を述べる。この系の欠陥である界面の動力学理論（ η 場理論と呼ばれる）を展開する。才4章では動的 Ising モデルを用いて、秩序 - 無秩序転移の動力学のシミュレーションを行い、その結果を理論と比較する。才5章では、界面の離散的モデルを考える。連続体界面の運動方程式は非線形性が強く、特殊な形状についてしか解くことができないので、連続体界面の運動に類似な離散的界面のモデルを考察し、初期界面の幾何学的形状と時間変化の指数との関係について述べる。最後に才6章では、秩序変数か複素数である体系の秩序化過程

について検討する。3次元の場合にはこの体系の欠陥は渦糸である。第2章(II)において導かれた渦糸の方程式に基づき、界面に対する4場理論と同様の方法を用いて統計的考察を進める。第7章では全体のまとめを行う。

第2節 秩序形成の動力学の構成

(I) 不安定・準安定状態の熱力学

秩序化過程の熱力学モデルを得るため、相転移を起す系の平衡熱力学について考察する。二元溶液や合金などの相分離を例にとりて考える。二元物質の場合、体系の状態は圧力 P ・温度 T ・2元の濃度差 ρ によって指定される。臨界点付近の相図は1-1図のようになる。二相共存は、二相の T ・ P および化学ポテンシャル μ が等しい場合、すなわち図中の線 abc の上で起こり、したがってこの線は共存曲線と呼ばれる。 T_c あるいは P_c 以下で、 $(\frac{\partial \mu}{\partial P})_{T, \rho} = 0$ によって表される曲線はスピノーダル曲線と呼ばれる。その線の内側では $(\frac{\partial \mu}{\partial P})_{T, \rho} < 0$ で、体系は熱力学的に不安定である。共存曲線とスピノーダル曲線の間では、体系は準安定である。体系が均一にこの状態をとるより二相に分離したときの方が自由エネルギーが低くなるのである。



1 - 1 図

曲線 abc が共存曲線を，曲線 dbe がスピノーダル線を表す。
 P_c, T_c は圧力，温度の臨界値である。

(II) 動力学のモデル : TDGLW 方程式

不安定あるいは準安定な状態から安定状態へ移行する過程を支配する動力学の原理を導入しなければならない。体系の状態を記述する変数として秩序変数を用いられる。二相分離の場合は密度差 ρ がそれにあたる。体系の変化は不均一におこるから、秩序変数は場所の関数とする必要がある。以後秩序変数を一般に $\phi(r)$ で表す。二相分離では $\phi(r)$ は密度というスカラー量であるが、ベクトルやテンソルも現れる。 $\phi(r)$ の従う運動方程式を導こう。 $\phi(r)$ が粒子数密度のような保存量の場合と、強磁性体における局所的な磁化のような非保存量の場合とで多少異なる。まず保存量の場合を考えよう。 $\phi(r)$ は連続の方程式

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \quad (1.2.1)$$

を満たすのである。 \vec{j} は ϕ の流れを表し、化学ポテンシャルの勾配に比例すると考えられる:

$$\vec{j} = -\Gamma \vec{\nabla} \mu \quad (1.2.2)$$

(1.2.1), (1.2.2) より

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \Gamma \nabla^2 \mu \quad (1.2.3)$$

が得られる。 μ は自由エネルギー関数 $F(\{\phi(r)\})$ の ϕ についての微分で与えられる:

$$\mu(r) = \frac{\delta F(\{\phi(r)\})}{\delta \phi(r)} \quad (1.2.4)$$

一方、 ϕ が保存量ではないとき、それを動かす熱力学的力は単に自由エネルギーの微分で表されると考えられる：

$$\frac{\partial \phi(\vec{r})}{\partial t} = -\Gamma \frac{\delta F(\{\phi(\vec{r})\})}{\delta \phi(\vec{r})} \quad (1.2.5)$$

さらに、 $\phi(\vec{r})$ に働く熱的揺動力も取入れて、

$$\frac{\partial \phi(\vec{r})}{\partial t} = -\Gamma (-i\vec{\nabla})^\alpha \frac{\delta F(\{\phi(\vec{r})\})}{\delta \phi(\vec{r})} + \Theta(\vec{r}, t) \quad (1.2.6)$$

が成立つものとする。但し、 $\phi(\vec{r})$ が保存量するとき $\alpha=2$ 、非保存量するとき $\alpha=0$ である。 $\Theta(\vec{r}, t)$ は $\phi(\vec{r})$ にくらべて非常に速くランダムに変動する揺動力であり、そのスペクトルは白色であるとしてよい。また揺動散逸定理

$$\langle \Theta(\vec{r}, t) \Theta(\vec{r}', t') \rangle = 2k_B T \Gamma (-i\vec{\nabla})^\alpha \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t') \quad (1.2.7)$$

が成立つと考える^(*)。

(*) 揺動散逸定理は体系が定常、つまり体系の振舞が時間の原点のとり方によらない場合に成立つことか示されるものである。これを非定常な体系の動力学に用いることには、きりした根拠があるわけではない。本研究では、揺動力の性質が問題になるような体系の議論はしない。

本研究では $\phi(\vec{r})$ がベクトルの場合のみを考え、その i 成分を $\phi_i(\vec{r})$ と記し、 $F(\{\phi\})$ とし

$$F(\{\phi\}) = \int d^d r \left[\frac{1}{2} c |\nabla \vec{\phi}(\vec{r})|^2 + f(|\vec{\phi}(\vec{r})|) \right] \quad (1.2.8)$$

$$f(|\vec{\phi}|) = -\frac{1}{2!} r |\vec{\phi}|^2 + \frac{1}{4!} u |\vec{\phi}|^4 - \vec{h} \cdot \vec{\phi} \quad (1.2.9)$$

を用いる。 r は温度 T の減少関数で、 T_c 以下で正の値をとる。 \vec{h} は $\vec{\phi}$ に共役な外場である。(1.2.6) ~ (1.2.9) 式は、動的臨界現象に用いられた TDGLW 方程式に他ならない。本研究では r が正で大きいときの動的ふるまいに注目する。

われわれが知りたいのは $\{\phi(\vec{r})\}$ すべてではなく、秩序変数の平均値 $|\langle \vec{\phi}(\vec{r}) \rangle|$ やその同時刻相関 $\langle \phi_i(\vec{r}) \phi_j(\vec{r}) \rangle$ 、また体系の自由エネルギーなど巨視量の時間発展である。

まず平衡状態について考えてみよう。秩序変数の平衡値 $|\langle \vec{\phi}(\vec{r}) \rangle_{eq}|$ は単に $\partial f / \partial |\vec{\phi}| = 0$ を解くことにより求められる。また、二体相関関数 $\langle \phi(\vec{r}) \phi(\vec{r}') \rangle_{eq}$ とそのフーリエ変換

$$S_{ij}(k) = \int \frac{d^d r}{(2\pi)^d} e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} \langle \phi_i(\vec{r}) \phi_j(\vec{0}) \rangle_{eq} \quad (1.2.10)$$

は、平衡分布 $e^{-F(\{\phi\})/k_B T}$ で平均することによって与えられる。 T_c よりず、と離れた温度における r を

$r_H (T > T_c)$, $r_L (T < T_c)$ と記す。それぞれの温度での平衡状態は、 $r = r_H$ のとき

$$|\langle \vec{\phi} \rangle_{eq}| = 0, \quad (1.2.11)$$

$$S_{ij}(k) = \frac{C_0 \delta_{ij}}{k^2 + |r_H|/C} \quad (C_0: \text{定数}), \quad (1.2.12)$$

$r = r_L$ のときは

$$|\langle \phi \rangle_{eq}| \equiv \pm \phi_{eq} = \pm \sqrt{6 r_L / u} \quad , \quad (1.2.13)$$

$$S_{||}(k) = \langle \delta \phi_{||}(\vec{k}) \delta \phi_{||}(-\vec{k}) \rangle_{eq} = \frac{C_{||}}{k^2 + \xi_{||}^{-2}} \quad (1.2.14)$$

($C_{||}$: 定数),

$$S_{\perp}(k) = \langle \delta \phi_{\perp}(\vec{k}) \delta \phi_{\perp}(-\vec{k}) \rangle_{eq} = \frac{C_{\perp}}{k^2} \quad (1.2.15)$$

(C_{\perp} : 定数),

で表される。但し, $\delta \phi_{||}(\vec{k})$, $\delta \phi_{\perp}(\vec{k})$ はそれぞれ秩序変数の平衡値からの縦方向, 横方向のゆらぎの波数 k の成分である。縦方向の相関距離 $\xi_{||}$ は十分低温 ($r_L \gg C$) では

$$\xi_{||}^{-2} \approx \left. \frac{\partial^2 f}{\partial |\phi|^2} \right|_{|\phi|=\phi_{eq}} / C = \frac{2 r_L}{C} \quad (1.2.16)$$

で与えられる。

このモデルに基づけば, 不安定状態からの秩序形成の課題は次のように言える。⁴⁾ 最初に体系は (1.2.11), (1.2.12) 式で表される平衡状態にあったとする。急激に r を r_H から r_L に変化させたときの体系のその後の変化が問題である。そのときの運動方程式は (1.2.6) ~ (1.2.9) 式で与えられる。そして落ち着く先は (1.2.13) ~ (1.2.15)

式で表される。

この動力学はいくつかの普遍性クラスに分けられる。それらの分類と興味ある体系を整理してみよう。

普遍性クラスを分かつ指標は

- i) 空間次元 d と秩序変数の次元 n
- ii) 秩序変数が保存量か否か。

という二点が基本的であるが、準安定状態からの秩序化過程の問題を含めれば、

- iii) 初期状態が不安定か準安定か。

という指標も加えられる。i), ii) は臨界現象におけるクラス分けの指標と同じである。

i) によって秩序相の対称性が決まり、またその秩序を壊す欠陥の性格も決定される。欠陥は秩序をこわす存在であるから、無秩序な状態を欠陥が無数に存在する状態と考えることもできる。このような観点にたつと、秩序化過程とは、欠陥が消失していく過程と捉えることができる。i) に基づく体系の分類を 1-1 表に掲げる。このうち本研究では、界面 ($n=1, d \geq 2$) と渦糸 ($n=2, d=3$) の動力学を取り上げて論ずる。1次元物体の界面 — キンク — の動力学は長井と川崎によって研究されているが、²⁾ それは2次元以上の体系における界面の動力学と本質的に異なる。 $d \geq 2$ の界面は主として、表面張力に由来する力によって運動するのに対し、1次元系では表面張力は考えられないので、キンクはキンク間の相互作用だけによって運動する。その結果、体系の特徴的長さ（平均的なドメインの大きさ）が1次元では $\log t$ で、

2次元以上では $t^{1/2}$ で成長するという定性的な違いが現れるのである。秩序変数が2成分ベクトル($n=2$)の場合にも同様な事情がある。2次元系の欠陥である渦点の駆動力は点間の対数的相互作用に由来する。一方、3次元系においては、2次元系には現れない渦系の曲率に比例した力が現れる。このように、欠陥が点である場合と線以上の拡がった対象である場合とでは動力学的に本質的な差異が存在するのである。 $n \geq 3$ の秩序変数をもつ体系の秩序化過程はまたほとんど研究されてはいないが、 n が大きくなるにつれて欠陥の動力学的という描像の適格さが失われるように思われる。⁴⁾ すでに $n=2$ の場合そうであるように、秩序変数の空間的歪が欠陥の周辺に局在しえなくなるからである。従って、秩序変数が多成分ベクトルである場合には、連続場の時間発展そのものを追いかける必要があるであろう。

ii)の指標による違いは、方程式の上では(1.2.6)式の α の値に現れるが、i)は系の静的な特徴であったのに対しii)は純粋に動的な指標である。秩序変数が保存量であるときは、保存則に起因する欠陥間の長距離相互作用が現われ、著しく取り扱いが困難になる。二成分液体や二元合金の相分離や気相-液相転移の動力学的はこの例であるが、本研究では保存系にはあまり立ち入らない。

準安定状態からの秩序化過程は、従来核生成と呼ばれ、共存線とスピノーダル線の間に系をおいたときに生ずる現象と考えられてきた。しかし、連続場モデルでは、 $\partial^2 f / \partial \phi^2 = 0$ をみたす状態は何ら特別な意味をもつ状態ではなく、その意味でスピノーダル分解と核生成の間には明確な境界は存在しないと考えられている。今のところそれを統一的に理解する理論は存在しないようである。

上記の指標によって分けられた普遍性クラスの中でも、

急冷する温度など外的条件によつて異なつた動的振舞が生ずる。最初の温度と急冷された後の温度がそれぞれ臨界領域にあるのか、それと遠く隔たつた所にあるのかによる違いは興味ある問題である⁸⁾。定性的な議論を $n=1$ の場合について行ふか、大雑把に言えば、臨界領域の温度にあるとき、運動の初期の段階では連続場の運動方程式(1.2.6)そのものを扱う必要があり、それ以外ではそれは欠陥の運動方程式に歸着される。

1-1 表

秩序変数がベクトルである物理系とその欠陥

* は保存系, それ以外は非保存系

n	d	欠 陥	物理系の例
1	1	キンク	一次元的磁性体 ・ 秩序 - 無秩序転移をす合金 ・ 二相分離する合金系*, 二成分 溶液*
	2	界面	
	3	ゝ	
2	1	なし	*He の超流動 (2次元) 〃 (3次元)
	2	渦点	
	3	渦系	
3	2	"インスタントン" ^カ	Heisenberg 強磁性体* (2次元)
	3	点欠陥	〃 * (3次元)

カ) 相対論的場の理論のモデルとされる
ときの呼び名.^{5), 6)}

第3節 スカラー場の秩序形成の動力学

スカラー場の秩序形成の理論は特に最近の10年間に著しく発展した。本研究も主としてこれを対象とするが、本節ではこれまでの理論を概観する。

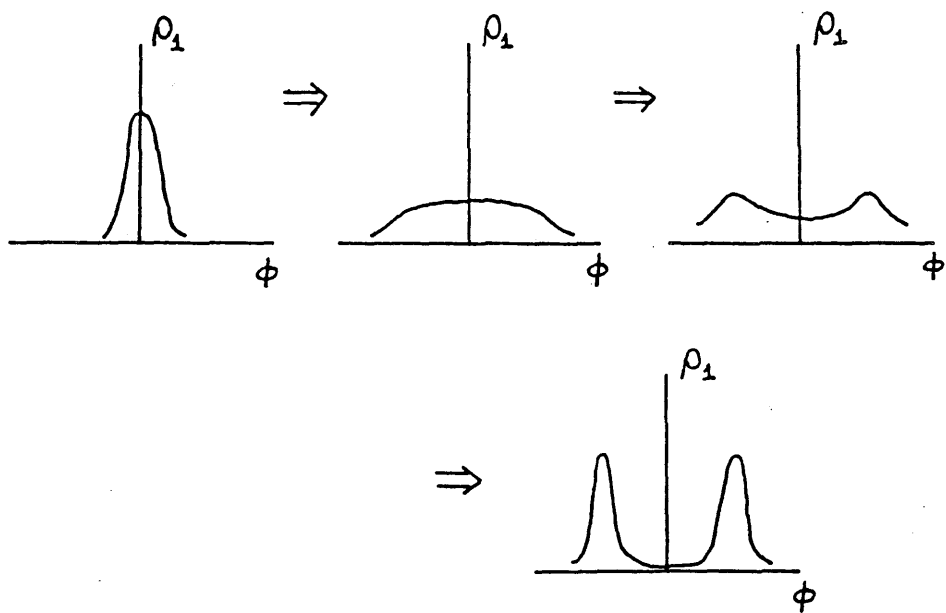
I) 動力学の分類.

動力学の性質は主として次の3つの観点から分類される:

- a) 秩序変数の保存, 非保存
- b) 不安定状態からの成長か, 準安定状態からの成長か.
(便宜上、スピノーダル分解, 核生成と呼ぶことにする。)
- c) 安定相領域(ドメイン)の大きさ $l(t)$ と境界層の厚さ ξ の比。

スピノーダル分解について考えよう。 $T < T_c$ において $\phi = 0$ の不安定状態から、時間とともに $\phi = \pm \phi_{eq}$ の状態に緩和していく様子は、まず一価分布関数 $\rho_1(\phi)$ の時間変化として捉えられ、1-2図のような変化が期待される。^(*)

(*) 一変数のランジュバン方程式の確率分布関数のこのような変化は鈴木によって研究された。⁹⁾



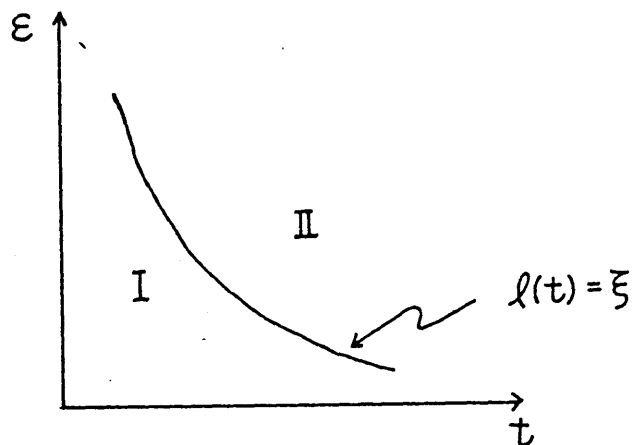
1-2 図

一体系分布関数の時間変化の概念図

時間かたつとともに二つの安定相に対応するピークが鋭くなつていき、体系の大部分が安定相になり、二つの安定相のドメイン間の界面が明確になる (2-1 図¹⁴⁾)。ドメインの特徴的長さを $l(t)$ 、界面の平均的厚みを $\delta(t)$ としよう。 $l(t) \gg \delta(t)$ の場合には、場の方程式をそのまま扱うより界面の運動に注目する方が妥当である。2章で述べるように、 $\delta(t)$ は早い段階で平衡状態での相間距離 (1.2.1.6) と同程度になる。従つて温度が低い程、界面の描像が成立つ時間範囲が伸びる。模式的に書けば 1-3 図のようである。領域 (I) では場の方程式をそのまま扱わなければならず、(II) では欠陥の運動という描像が成立つ。(I), (II) の境界で、相関関数の動的ふるまいにクロスオーバーがおこると考えられる。

核生成の場合も同様で、 δ が小さい程、体系の変化を界面の運動として論ずることが妥当になる。

a) ~ c) の三つの観点で分類された名々の領域において成立つ理論の名々を 1-2 表に掲げる。Langer, Bar-on, Miller は、TDGLW 方程式に基づいて保存系の動的ふるまいを論じた (LB M 近似)¹³⁾。Billotet と Binder は¹⁴⁾、それを非保存系にも適用したか、非保存系の場合には局所的な平衡が早期に実現されてしまうので、領域 (I) は非常に狭くなると考えられる。実際、それに該当する実験的なシミュレーションは存在しないようである。領域 (II) の動力学を論ずるために、Allen と Cahn¹⁵⁾ とか TDGLW 方程式に基づいて界面の方程式を導出した。その後、川崎¹⁶⁾、太田および Bausch, Dohm, Janssen, Zia¹⁷⁾ は互いに独立に揺動力の効果含めて考察を行った。彼らは非保存系について論じたか、その後さらに川崎、太田は保存系に対する界面の運動方程式を導いた¹⁸⁾。それには流体力学的相互作用の効果も取入れられている。流体力学的効果は



1-3 図

領域 I では $l(t) < \xi(t)$, 領域 II では $l(t) > \xi$
 $\varepsilon = (T_c - T) / T_c$. 臨界領域では $\xi \propto \varepsilon^{-\nu}$

1-2 表

急冷されたスカラー場の秩序形成に関する理論。
保存系は前・中・後期に，非保存系は前・後期
に分けられる。系の特性的尺度の時間変化：

$$l(t) \propto t^\mu$$

	前期	中期	後期	
保存系	<ul style="list-style-type: none"> ・ クラスターダイナミクス (Binder & Stauffer など)^{10)~12)} $\mu = 1/(d+3)$ ・ LBM 近似 $\mu = 1/6 \sim 1/5$ 	<ul style="list-style-type: none"> ・ 液滴の蒸発と凝縮 (Lifshitz & Slyosov) $\mu = 1/3$ ・ 液滴の合体 (Siggia) $\mu = 1/3$ 	<ul style="list-style-type: none"> ・ 表面張力による効果 (Siggia) $\mu = 1$ 	
$l(t)/\xi$	1	10		
	前期	後期		
非保存系	<ul style="list-style-type: none"> ・ LBM 近似 (Billotet & Binder) 	<ul style="list-style-type: none"> ・ 界面の動力学 <ul style="list-style-type: none"> 平均場近似 (Allen & Cahn) u 場理論 (Ohta, Jasnow and Kawasaki など。本論文第3章で述べる。) 		$\mu = 1/2$

二元液体の相分離では考慮に入れなければならない。

非保存系とは違って、保存系では運動が局所的には決らないので取扱いが著しく困難である。非保存系の動力学は「ハ場理論」と呼ばれる方法によって解明された。

保存系に対しては界面の運動方程式ではなく、界面の運動の現象論的考察がなされている。その場合、安定相の成長過程として一つは安定相のクラスターか原子の蒸発・凝縮によって成長・縮小する過程^{19) 20)}、もう一つはクラスターの運動による合体の過程²¹⁾が考えられる。どちらも論じられているが、ここでは保存系には深く立ち入らないことにする。

以下で初期の過程の連続場理論を一瞥しておこう。

II] 線形理論

(1.2.6)式は線形近似では

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \Gamma (-i \vec{\nabla})^\alpha (r \phi + \nabla^2 \phi) + \theta \quad (1.3.1)$$

と書かれる。ここで、 $C=1$ とした。フーリエ変換

$$\phi_k = \int \frac{d^d r}{(2\pi)^d} e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} \phi(\vec{r}) \quad (1.3.2)$$

を施せば

$$\frac{\partial \phi_k}{\partial t} = \Gamma k^\alpha (r - k^2) \phi_k + \theta_k \quad (1.3.3)$$

となる。 Θ_k は重要ではないので無視すると

$$\phi_k(t) = \phi_k^{(0)} e^{D(k)t} \quad (1.3.4)$$

$$D(k) = \Gamma k^\alpha (r - k^2) \quad (1.3.5)$$

となる。相関関数

$$I(|\vec{r} - \vec{r}'|, t) = \langle \phi(\vec{r}, t) \phi(\vec{r}', t) \rangle \quad (1.3.6)$$

を考えてみよう。 $\langle \dots \rangle$ は初期分布 $\{\phi(\vec{r}, 0)\}$ についての平均と考える。(1.2.7)式を考慮すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} I(|\vec{r} - \vec{r}'|, t) &= 2\Gamma(-i\vec{\nabla})^\alpha (r + \nabla^2) I(|\vec{r} - \vec{r}'|, t) \\ &\quad + 2k_B T \Gamma \nabla^\alpha \delta(\vec{r} - \vec{r}') \end{aligned} \quad (1.3.7)$$

が導かれる。 $\phi(\vec{r})$ と $\Theta(\vec{r}, t)$ との相関は、運動の時間スケールが違うので無視した。 $I(|\vec{r} - \vec{r}'|, t)$ にフーリエ変換

$$S(k, t) = \int \frac{d^d r}{(2\pi)^d} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} I(|\vec{r}|, t) \quad (1.3.8)$$

を施せば

$$\frac{\partial S(k, t)}{\partial t} = 2\Gamma k^\alpha (r - k^2) S(k, t) + 2k_B T \Gamma k^\alpha \quad (1.3.9)$$

が導かれる。(1.3.9)式の解は

$$S(k, t) = A_0(k) e^{2D(k)t} - \frac{k_B T \Gamma k^\alpha}{D(k)} \quad (1.3.10)$$

と書かれる。初期において、相関距離が無限小であったとすれば、 $S(k, 0)$ は k によらない定数であるから

$$S(k, t) = \frac{2 k_B T}{r - k^2} (e^{2D(k)t} - 1) + A, \quad (1.3.11)$$

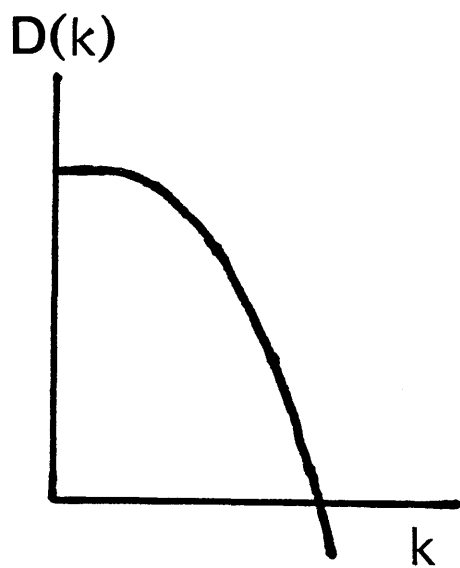
(A: 定数)

が得られる。

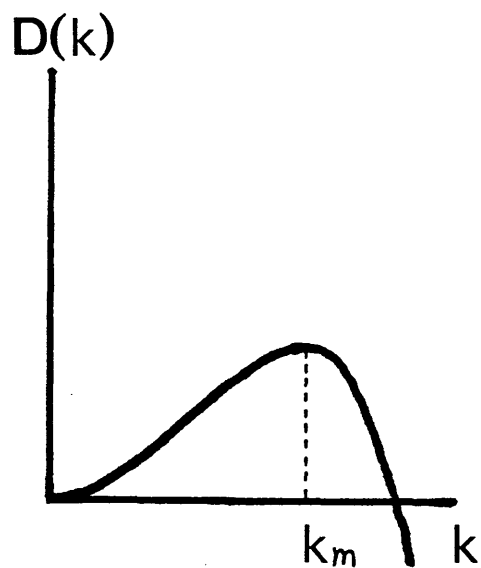
これらの結果の意味を考えてみよう。 ϕ_k の成長率 $D(k)$ を図示すると 1-4 図のようになる。最も速く成長するモード k_m は、秩序変数が非保存の場合には $k_m = 0$ 、保存する場合には $k_m = \sqrt{r/2}$ である。^(*) 線形理論は初期におけるそれぞれのモードの不安定性を表わしているにすぎない。実際、実験やシミュレーションによれば、相関関数 (1.3.11) のピークの位置 k_m (その逆数は体系の特性的長さを表す) は時間とともに減少していく。非保存系の場合も相関関数のかたちはシミュレーションと一致しない。^(**)

(*) 但し、保存系の場合揺動力の影響で k_m より少し大きい方へずれるが、これは本質的に重要ではない。

(**) 非保存系の特性的尺度を表す量は一義的ではないが、 $S(k, t)$ の一次モーメント $k_1 = \int_0^\infty k S(k, t) dk / \int_0^\infty S(k, t) dk$ の逆数などによって表される。(1.3.11)式に基づいて計算してみると $k_1 \propto t^{1/2}$ が得られる。この指数 $1/2$ は実験と一致する。しかし、本来このような時間変化は線形理論によっても表せないと考えられるので、この一致は偶然である。



非保存量の場合
($\alpha = 0$)



保存量の場合
($\alpha = 2$)

1-4 図

Ⅲ] LBM 近似¹³⁾

Langer・Bar-on・Miller の方法は、不安定状態からの時間発展の初期段階を記述する最も代表的なものである。彼らは、TDGLW 方程式 (1.2.6) ~ (1.2.9) 式より導かれる相関関数の従う方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} S(k, t) = -\Gamma k^\alpha [(k^2 - r) S(k, t) + \frac{U}{3!} S^{(3)}(k, t)] \quad (1.3.12)$$

$$+ 2k_B T \Gamma k^\alpha$$

を考察した。ここでも、ステップネズ定数 C を 1 とした。 $S^{(3)}(k)$ は

$$S^{(3)}(k, t) = \int \frac{d^d r}{(2\pi)^d} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \langle \phi(\vec{r})^3 \phi(0) \rangle \quad (1.3.13)$$

によつて与えられる四体相関関数を表す。自由エネルギー密度 $f(\phi)$ が四次以上の項を含んでおれば、さうに高次の二点相関関数も現れるが、それらは重要でない。

(1.3.13) を計算するのに必要な二点分布関数 $\rho_2(\phi(\vec{r}), \phi(\vec{r}'))$ に対して、Langer は次のような近似を用いた：

$$\rho_2(\phi(\vec{r}), \phi(\vec{r}')) \approx \rho_1(\phi(\vec{r})) \rho_1(\phi(\vec{r}'))$$

$$\times \{1 + \gamma(|\vec{r} - \vec{r}'|) \phi(\vec{r}) \phi(\vec{r}')\} \quad (1.3.14)$$

ここで、 $\rho_1(\phi(\vec{r}))$ は一体分布関数である。この近似は ρ_2 の $\phi(\vec{r})$ に関するべき展開の最低次近似と考えられるが、こうすることにより、非線形効果は同位置相関のみで表わされる：

$$\frac{\partial S(k,t)}{\partial t} = -2\Gamma k^\alpha (k^2 + A(t)) S(k,t) + 2k_B T \Gamma k^\alpha, \quad (1.3.15)$$

ここで、

$$A(t) = -r + \frac{u}{3!} \frac{\langle \phi^4 \rangle}{\langle \phi^2 \rangle}. \quad (1.3.16)$$

である。 $\rho_1(\phi)$ に対して Langer S は二つの Gaussian 分布の和を仮定して、数値計算を行い 1-5 図のような結果を得た。時間かたつにつれて $\rho_1(\phi)$ の二重のピークが顕著になり、 $S(k,t)$ のピークは k の小さい方へ移動していく。この傾向はシミュレーションの結果と定性的に一致する。^{23, 26)}

Langer S は保存系 ($\alpha=2$) についてだけ計算を行ったが、Billotet, Binder などの近似法を用いて非保存系 ($\alpha=0$) についても計算を行った。¹⁴⁾

LB M 近似の問題点として、まず第一に適用限界について考えてみよう。この近似は $l(t) \sim \xi$ で有効であることは先に述べたが、この領域ではドメイン概念が意味を失い、体系の特性を示す長さは ξ だけである。LB M 理論における体系の特性を表す指標が相関関数 (これは) のピーク位置 $k_m(t)$ だけであることと合致する。しかし、LB M 理論では全過程を通じて $k_m(t)$ が現れるのみであり、 $l(t)$, $\xi(t)$ という二つの長さが現れるわけではなく、理論の中にその限界を示す指標となるものは存在しない。限界が $l(t) \sim \xi$ によって表されるというのは素朴な推論に過ぎない。^(*)

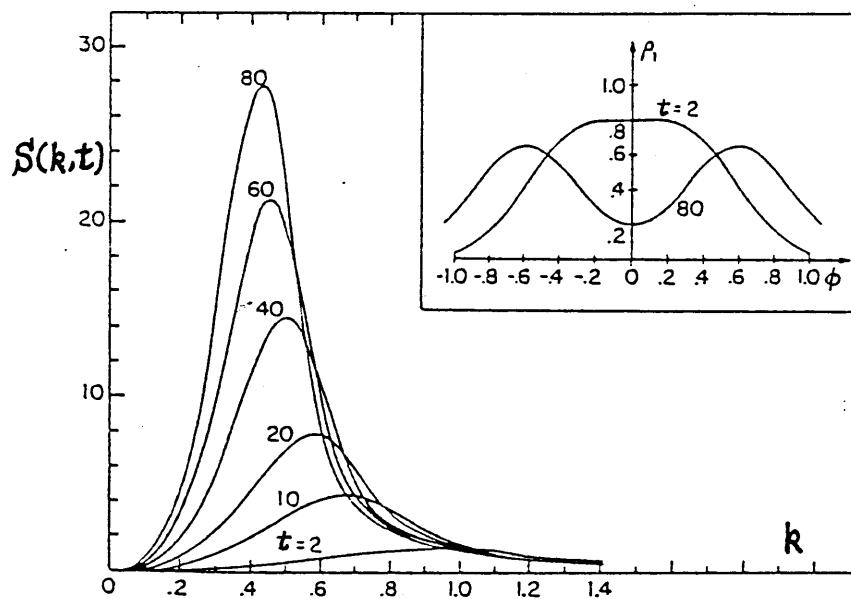
(*) Siggia は限界を $l(t) \sim \xi$ としているが根拠は示していない。²¹⁾

次の問題は、スピノーダル線の存在にかかわることである。Langer³は初期条件を古典的なスピノーダル線上に設定して、即ち $\partial\phi/\partial\phi^2=0$ を満たす ϕ の近傍における Taylor 展開

$$f_s(\delta\phi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\partial^n f}{\partial \phi^n} \right)_{\phi=\phi_0} (\delta\phi)^n, \quad \left(\frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} \right)_{\phi=\phi_0} = 0 \quad (1.3.17)$$

に基づいて数値計算を進めた。得られた相関関数は、その時間変化が遅くなるものの定性的な性質は変わらなかった。このことから彼らは、スピノーダル領域から核生成領域への移り変わりは緩慢なものであると結論した。しかし、スピノーダル線上にある体系を (1.3.17) で表現する根拠は不明確である。今のところ $\langle\phi\rangle \neq 0$ の初期状態から急冷した場合に於いては、説得力に富む理論は存在しない。^(*)

(*) 動的 Ising モデルによるシミュレーションは行われている。その結果、臨界濃度の場合 ($\langle\phi\rangle=0$) に比して非臨界濃度 ($\langle\phi\rangle \neq 0$) の場合には LBM 理論との不一致が顕著になることが示されている。但し、明確なスピノーダル線が存在しないという結論では一致している。²⁵⁾



1-5 図

一体系分布関数 ρ_1 と構造関数 $S(k, t)$ の
時間変化

(文献 13 より引用)

第2章 欠陥の運動方程式

第1章第2節で述べたように急冷の度合が著しい場合には、連続場の運動方程式は欠陥のそれに帰着される。この章では、秩序変数かスカラー ($n=1$) および複素数 ($n=2$) であるような非保存系について欠陥の方程式を導き出す。

I] 界面の運動方程式 ($n=1$)

秩序変数 ϕ がスカラーである場合について考える。以下では、安定状態における秩序変数 ϕ の値は (1.2.13) 式によって与えられ、局所的にはこの式から与える二つの値 $\phi = \pm \sqrt{6r/u}$ のいずれかをとる。その結果、これらの二つの領域の間に界面が現れることになる。界面の厚さは温度や物質のスティッフネス定数に依存するが、ここではこの厚さが曲率半径に比して十分小さく、また至るところ一定であると仮定する (2-1図)。

自由エネルギー汎関数

$$F(\{\phi(r, t)\}) = \int d^d r \left[\frac{1}{2} c (\nabla \phi)^2 - \frac{1}{2} r \phi^2 + \frac{1}{4!} u \phi^4 \right] \quad (2.1)$$

に基づき、定常解を与える方程式として

$$0 = \frac{\delta F}{\delta \phi} = c \nabla^2 \phi + r \phi - \frac{1}{6} u \phi^3 \quad (2.2)$$

を得る。界面におけるそれと垂直な方向の $\phi(x)$ の変化は、近似的に (2.2) 式の 1次元の場合の解

$$\phi_{\text{kink}} = \phi_{\text{eg}} \tanh[(x-x_0)/\xi] \quad , \quad (2.3)$$

$$\xi = \sqrt{\frac{2c}{r}} \quad (2.4)$$

によって与えられる。定数 x_0 は界面の位置を与え、 ξ は界面の厚さを表す。現実には定常状態になっていないのであるから、 ξ は (2.4) の値ではなく場所によって違うか、それは無視してよい。このように考えると、自由エネルギーは界面の面積だけの関数として表される：

$$F = \sigma A = \sigma \int d^{d-1}a \quad , \quad (2.5)$$

ここで、 a は界面上の曲線座標を表し、積分は全界面について行う。 σ は単位表面積あたりのエネルギーあるいは表面張力であり、

$$\sigma = \frac{c}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial \phi_{\text{kink}}}{\partial x} \right)^2 dx \quad (2.6)$$

によって与えられる。(2.1)式を用いると、

$$\sigma = \frac{2}{3} c \phi_{\text{eg}}^2 \xi^{-1} = 2^{3/2} r^{3/2} c^{1/2} u^{-1} \quad (2.7)$$

が導かれる。

TDGLW方程式

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\Gamma \frac{\delta F(\{\phi\})}{\delta \phi} \quad (2.8)$$

に基づいて界面に対する運動方程式を導こう。界面 $\vec{r}(\vec{a}, t)$ の法線方向速度を $v(\vec{r}(\vec{a}, t))$ とし、2-2図のように、 $\phi(\vec{r}) = \phi_{eg}$ の領域から $\phi(\vec{r}) = -\phi_{eg}$ の領域へ向くように単位法線ベクトル $\vec{n}(\vec{a}, t)$ を定義する。また、曲率 $K(\vec{r}(\vec{a}, t))$ の符号は、界面の曲率半径の中心が $\phi(\vec{r}) = -\phi_{eg}$ の領域中にある場合に正になるように定める。界面の厚さを ξ とすると、 ϕ の時間変化は

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} \approx |\nabla \phi_{\text{kink}}| v(\vec{r}(\vec{a}, t)) \rho(\vec{r} - \vec{r}(\vec{a}, t)) \quad (2.9)$$

のように、汎関数微分は

$$\frac{\delta}{\delta \phi(\vec{r})} \approx |\nabla \phi_{\text{kink}}|^{-1} \rho(\vec{r} - \vec{r}(\vec{a}, t)) \frac{\delta}{\delta(\xi \vec{r}(\vec{a}, t))} \quad (2.10)$$

のように書かれる。但し、

$$\rho(\vec{r}) = \begin{cases} 1 & (|\vec{n} \cdot \vec{r}| < \xi) \\ 0 & (|\vec{n} \cdot \vec{r}| > \xi) \end{cases} \quad (2.11)$$

である。(2.9), (2.10) 式を用いると、(2.8)式は

$$|\vec{\nabla} \phi_{\text{kink}}| \propto \rho(\vec{r} - \vec{r}(\vec{a}, t))$$

$$\approx -\Gamma |\vec{\nabla} \phi_{\text{kink}}|^{-1} \rho(\vec{r} - \vec{r}(\vec{a}, t)) \xi^{-1} \frac{\delta F}{\delta \vec{r}(\vec{a}, t)} \quad (2.12)$$

と表される。界面の領域では

$$|\vec{\nabla} \phi_{\text{kink}}| \approx \phi_{0g} / \xi \quad (2.13)$$

としてよく、また界面の微小変化に対する面積の変化率は平均曲率 K を用いて

$$\frac{\delta}{\delta \vec{r}(\vec{a}, t)} \int d^{d-1} a = -K(\vec{r}(\vec{a}, t)) \vec{n}(\vec{a}, t) \quad (2.14)$$

のように与えられるから、²⁷⁾最終的に

$$v(\vec{r}(\vec{a}, t)) = \frac{2}{3} c \Gamma K(\vec{r}(\vec{a}, t)) \quad (2.15)$$

が導かれる。このように法線方向速度が曲率に比例するということはかなり古くから述べられていたが、TDGLW方程式に基づいて導いたのは Allen と Cahn が最初である (1979年)¹³⁾。彼らも指摘しているが、(2.15)式と現象論的に書かれた従来の式との間には相違点がある。従来の式では v と K との間は比例係数として表面張力 σ が用いられているが、(2.15)式ではそれに代って $c\Gamma$ が現れている。^(*) c と σ の間には $\sigma \propto c^{1/2}$ ((2.7)式)の関係が得られ

(*) Allen と Cahn の研究以来、 v と K の比例係数は \nearrow

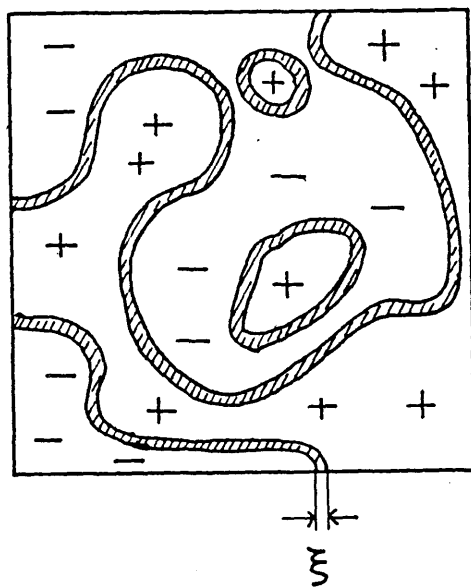
こいることを注意しておく。 Γ の温度依存性は考えなく
てよい。^(**)以後、長さの単位を適当に選んで、(2.15)式
に代る

$$v(\vec{r}(\vec{a}, t)) = \Gamma K(\vec{r}(\vec{a}, t)) \quad (2.16)$$

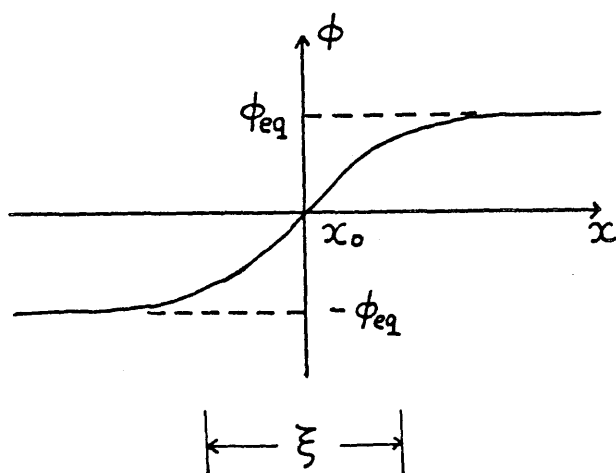
を用いることにする。

↓ Γ のみによるという誤解も生れた。これは $c=1$ とし
たことによるが、体系の静的な性質にも依存するは
ずで、実際ここでも示したようにバルクのスティッフ
ネス定数にも比例するのである。

(**) 動的くりこみ群理論によれば、 $n=1$ の体系では臨界
領域でも Γ は有限に保たれることがわかってゐる。

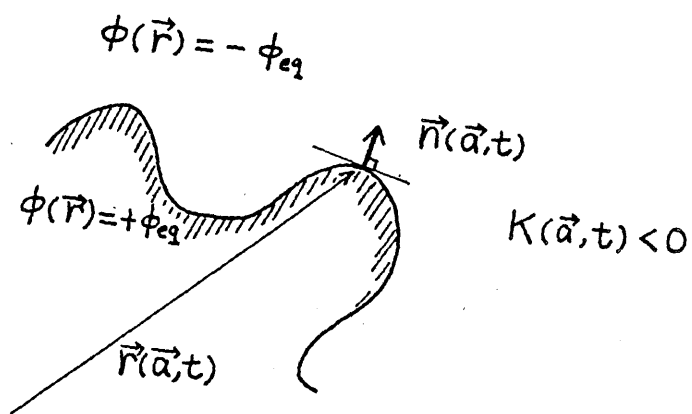


(a) 2次元における界面



(b) 界面付近のφの変化

2-1 図



2-2 ☒

II] 渦系の運動方程式 ($n=2$)

$\phi(r)$ が複素場の場合には、自由エネルギーは

$$F(\phi, \phi^*) = \int d^d r \left\{ \frac{1}{2} c |\nabla \phi \cdot \nabla \phi^*| + f(|\phi|) \right\} \quad (2.18)$$

$$f(|\phi|) = -\frac{1}{2} r |\phi|^2 + \frac{1}{4!} u |\phi|^4 \quad (2.19)$$

によって与えられる。 $f(|\phi|)$ については、 $n=1$ の場合と同様に谷が十分深い場合を考える (2-3 図)。このとき $\phi = \Phi e^{i\theta}$ で定義される振幅 Φ と位相 θ で表す方が便利である：

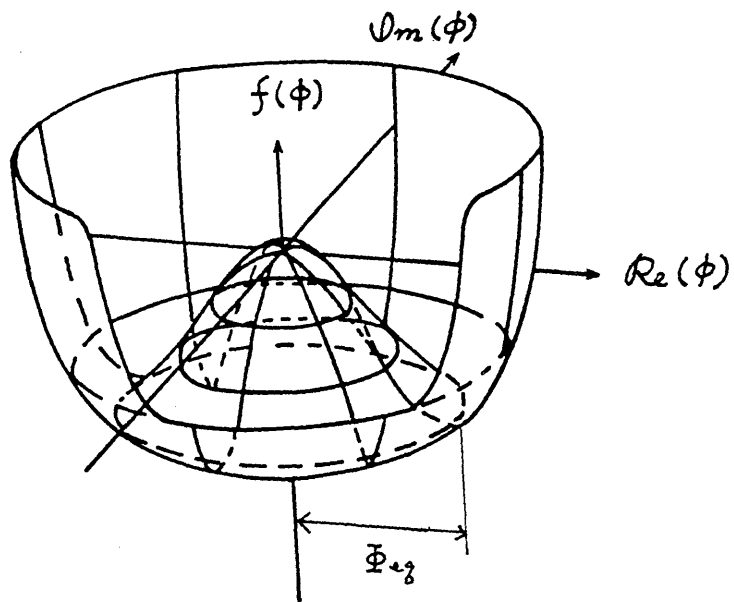
$$F = \int d^d r \left\{ \frac{1}{2} c |\nabla \Phi|^2 + \frac{1}{2} c \Phi^2 |\nabla \theta|^2 + f(\Phi) \right\} . \quad (2.20)$$

$\phi(r)$ がスカラーのときは、 $\phi(r)$ の空間的歪が界面の部分に集中していた。複素場の場合も同様に考えられる。Tc 以上の対称性の破れていない体系を急冷して 2-3 図のようなポテンシャルの状態においたとしよう。各底が深いとき、初期の段階においてほとんどの所で $\Phi = \Phi_0$ が実現されるが、位相はまだ無秩序のままであろう。そのような状態にある $\phi(r)$ の空間的歪を考えてみよう。

定常解を与える方程式として、 $\delta F / \delta \phi = 0$ より

$$2 \nabla \Phi \cdot \nabla \theta + \Phi \nabla^2 \theta = 0 \quad , \quad (2.21)$$

$$c \nabla^2 \Phi - c \Phi |\nabla \theta|^2 + r \Phi - \frac{1}{6} u \Phi^3 = 0 \quad (2.22)$$



2-3 図

複素場の局所自由エネルギー

$$\Phi_{e2} = \sqrt{6r/u}.$$

が導かれる。まず、 $f(\Phi)$ の谷が無限に深い場合を考察する。このとき、ほとんどいたる所で $\Phi = \Phi_0$ が成立つと考えられる。 Φ が一定であるとするとき(2.21)式は

$$\nabla^2 \Phi = 0 \quad (2.23)$$

となる。これを満たす正則な解は $\Phi = \text{一定}$ しか存在せず、一樣でない解には必ず特異点や特異線が存在する。 Φ の値域は $[0, 2\pi)$ であることから、特異な領域は2次元では点、3次元では線であることがわかる。それは完全流体の力学でよく知られている渦芯に対応する。3次元中に直線状の特異線があるとき、それを中心として円筒座標 $r = (z, \rho, \varphi)$ をとると、(2.23)の解は

$$\Phi(r) = l\varphi + \Phi_0, \quad l \text{ は 整数} \quad (2.24)$$

となる。(2.24)式は $\Phi(r)$ が $\rho=0$ を中心として同心円状に分布する解である。 ^4He の超流動相では、 $\Phi(r)$ は超流動の速度ポテンシャルにあたる。超流動速度は、 m を ^4He 原子の質量として

$$\vec{v}_s = \frac{\hbar}{m} \vec{\nabla} \Phi \quad (2.25)$$

によって与えられ、(2.24)式を代入すると

$$\vec{v}_s = \frac{l\hbar}{m} \frac{1}{\rho} \hat{\varphi} \quad (2.26)$$

となる。但し $\hat{\varphi}$ は Φ の変化する方向の単位ベクトルを表

す(2-4図)

谷の深さか有限である場合には、重き重₀の領域が渦系のまわりにできる。それから $n=1$ のときの界面の厚みに相当するもので、系の曲率が小さいときその形は(2.22)式の軸対称解に近似される。重を ρ のみの関数とすれば、(2.22)式は

$$\left[C \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{C}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{C l^2}{\rho^2} + r - \frac{1}{6} u \Phi^2 \right] \Phi = 0 \quad (2.27)$$

と書き直される。この非線形方程式を解くことは困難であるが、漸近形としては、 $l = \pm 1$ (単位渦)の場合には

$$\Phi \approx \rho \quad : \rho \ll 1, \quad (2.28a)$$

$$\Phi \approx \Phi_0 \left(1 - \frac{C}{2r} \rho^{-2} \right) \quad : \rho \gg 1 \quad (2.28b)$$

を導くことができる。2-5図にその概略の様子を示す。(2.28b)は渦芯の大きさか C/r とともに変化することを示しており、これは界面の場合に C/r か厚みを与えたのと同じ事情である。

渦芯の大きさか系上の場所に依存せず一定であるとするれば、自由エネルギーは系の位置 $F(r)$ だけの関数として表される。TDGLW方程式より渦系の方程式を導く試みは川崎によつて行われた。^{29),30)}以下、その研究について概略を述べる。

$\phi(r)$ の空間変化によるエネルギーは(2.20)式のオ1項とオ2項によつて表される。オ1項に現れる重の歪は渦芯にだけ生ずるか、オ2項の $|\nabla \phi|^2$ は渦芯から離れた所でも有限である。よつてそれらを分けて、次のように書

< :

$$F = F_c + F_K \quad (2.29)$$

$$F_c = \int d^d r \left[\frac{c}{2} \Phi^2 \left(1 - \frac{\Phi^2}{\Phi_{eq}^2} \right) |\vec{\nabla} \theta|^2 + \frac{c}{2} |\vec{\nabla} \Phi|^2 \right. \\ \left. + f(\Phi) - f(\Phi_{eq}) \right] \quad (2.30)$$

$$F_K = \frac{c}{2} \Phi_{eq}^2 \int d^d r |\vec{J}_s(\vec{r}, t)|^2 \quad (2.31)$$

ここで

$$\vec{J}_s = \left(\frac{\Phi}{\Phi_{eq}} \right)^2 \vec{\nabla} \theta \quad (2.32)$$

である。(2.29)式では定数項 $f(\Phi_{eq}) \int d^d r$ を無視した。

F_c, F_K はそれぞれ渦芯のエネルギーと超流動成分の運動エネルギーを表す。^(*) 系の曲率半径が渦芯の太さに対して大きいとき,

$$F_c = \epsilon_c \int d\tau = \epsilon_c L \quad (2.33)$$

$$\epsilon_c = 2\pi \int_0^\infty d\rho \rho \left\{ \frac{c}{2} \frac{1}{\rho^2} \Phi^2 \left(1 - \frac{\Phi^2}{\Phi_{eq}^2} \right) + \frac{c}{2} \left(\frac{d\Phi}{d\rho} \right)^2 \right. \\ \left. + f(\Phi) + f(\Phi_{eq}) \right\} \quad (2.34)$$

と表される。但し、(2.34)式における $\Phi(\rho)$ は (2.28) 式のように

(*) \vec{v}_s は渦中心で発散するか、 \vec{J}_s は 2-6 図のように渦芯では $|\vec{J}_s| \sim \rho$ となり特異な振舞は示さない。 \vec{J}_s は超流動成分の運動量に比例する量と考えられる。

な軸対称解である。Lは体系全体における系の長さであり、 ϵ_c は系の単位長さあたりのエネルギーを表す。一方 \vec{J}_s の1本の単位渦をとりまわ線積分に対し

$$\oint_{\text{芯の外側}} d\vec{s} \cdot \vec{J}_s = \pm 2\pi \quad (2.35)$$

が成り立つから、 \vec{J}_s は渦芯に強さ 2π の定常電流が分布しているときの磁場に該当する。 H_K は磁場のエネルギーに対応するので、

$$H_K = \frac{1}{2} c \Phi_{q0}^2 \sum_{i,j} L_{ij} \quad (2.36)$$

$$L_{ij} = \frac{\pi}{2} \int d\tau_i \int d\tau_j \frac{\vec{r}(\tau_i)' \cdot \vec{r}(\tau_j)'}{|\vec{r}(\tau_i) - \vec{r}(\tau_j)|} \quad (2.37)$$

が導かれる。³¹⁾ 但し $\vec{r}' = \frac{d\vec{r}(\tau)}{d\tau}$ である。また、 τ_i は i 番目の渦系リング上の座標を表す。アニペールの法則と同等になるように τ_i の正の向きを決めれば、渦と反渦を区別する必要はない。以上で自由エネルギーを渦系の位置 $\{\vec{r}(\tau_i)\}$ で表すことができた。渦系の運動方程式は次のように書くことができるであろう：

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \vec{r}(\tau_i) = -\Gamma_s \frac{\delta H}{\delta \vec{r}(\tau_i)} \quad (2.38)$$

これは、 $\{\vec{r}(\tau_i)\}$ を巨視的変数とした素朴な TDGLW 方程式である。 $\Phi(F)$ に関する TDGLW 方程式よりこれを導出することは難しいが、物理的には妥当な仮定と言えよう。

(2.38)式を具体的に書くと次のようになる：

$$\frac{\partial \vec{F}(\tau)}{\partial \tau} = \vec{X}_c + \vec{X}_k, \quad (2.39)$$

$$\begin{aligned} \vec{X}_c &= -\Gamma_s \frac{\delta F_c}{\delta \vec{F}(\tau)} \\ &= \Gamma_s \epsilon_c K(\tau) \vec{n}(\tau) \end{aligned} \quad (2.40)$$

$$\begin{aligned} \vec{X}_k &= -\Gamma_s \frac{\delta F_k}{\delta \vec{F}(\tau)} \\ &= \Gamma_s \vec{t}(\tau) \times \vec{v}(\vec{r}(\tau)) \end{aligned} \quad (2.41)$$

但し、

$$\vec{v}(\vec{r}(\tau)) = -\frac{\pi}{4} c \Phi_0^2 \sum_j \int d\tau_j \frac{\vec{t}(\tau_j) \times (\vec{r}(\tau) - \vec{r}(\tau_j))}{|\vec{r}(\tau) - \vec{r}(\tau_j)|^3}, \quad (2.42)$$

である。また $\vec{t}(\tau)$, $\vec{n}(\tau)$ はそれぞれ渦系上 τ における単位接線ベクトル, 単位法線ベクトルを表し、

$$\vec{t}(\tau) = \frac{d\vec{r}(\tau)}{d\tau}, \quad \vec{n}(\tau) = \frac{d\vec{t}(\tau)}{d\tau} / \left| \frac{d\vec{t}(\tau)}{d\tau} \right| \quad (2.43)$$

によ、定義される。 $K(\tau)$ は系の曲率で

$$K(\tau) = \left| \frac{d\vec{t}(\tau)}{d\tau} \right| \quad (2.44)$$

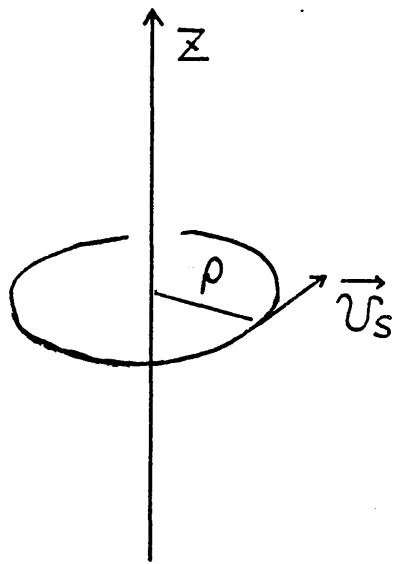
によ、与えられる。 \vec{X}_c は曲率に比例する力であり、法

線方向に作用する界面の駆動力と同様な力である。 X_L は超流動³²⁾ ^4He の現象論においてよく知られている Magnus 力に対応する。 $\vec{v}(\vec{r})$ は渦系 $\{\vec{r}(t_i)\}$ が作り出す超流動速度場にあたり、 X_L は系と速度場に垂直な方向を向く。^(*)

以上で界面と渦系の運動方程式を知ることができたが、おわりに、長距離相互作用の有無に基づく両者の運動の定性的な違いについて言及しておこう。界面は常に単純化する方向へ運動する。乱雑力の効果を考慮に入れなければ、界面がつながったり切れたりすることは起らない。曲率の絶対値が大きい程界面は速く動くからである。

(2-7図)。従って界面の初期のトポロジはその界面が消失するまで同一に保たれる。この点が非保存系の界面の特質である。一方、渦系には合体や分離が起り得る。2-8図のように、 X_L は接線ベクトルの内積 $\vec{z}(t) \cdot \vec{z}(t')$ が負のときに引力であるから、 X_L との競合に勝てば合体や分離が起る。このため次のことが予想される。体系全体に複雑ではあるが、つなげた界面があるとき、その界面は無限の時間をかけて単純化していく。それは自己相似的發展を期待させる。一方、渦系の場合には、複雑にからみあった初期状態を与えられると、組ないうりリングに分離してしまい、界面に期待できるような自己相似的發展が生ずるかどうかが疑問である。初期の状態および X_L と X_c の大きさによって様々な様相を呈しそうである。

(*) この力は電磁気学における Ampère の力あるいは Lorentz の力に該当する。 \vec{v} は定常電流が作る磁場に相当するか、散逸系の動力学における変分原理の形式と古典力学におけるそれとは異なる。その理論的連関が考察されているのかどうかは不明である。



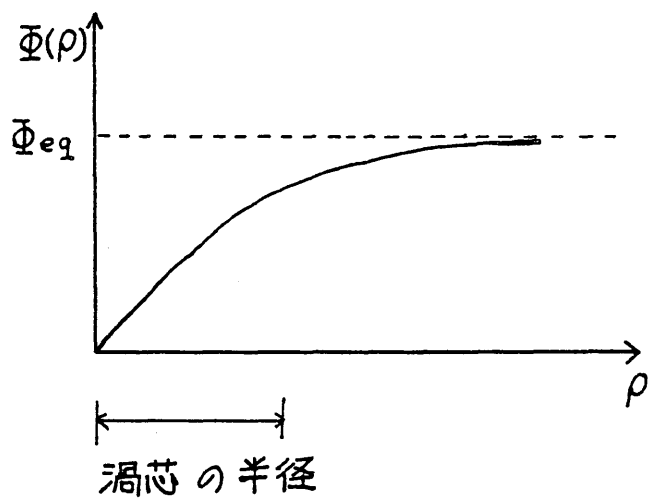
2-4 図

渦系のまわりの速度場.

$$\vec{v}_s = \frac{1}{m} \frac{1}{\rho} \hat{\varphi},$$

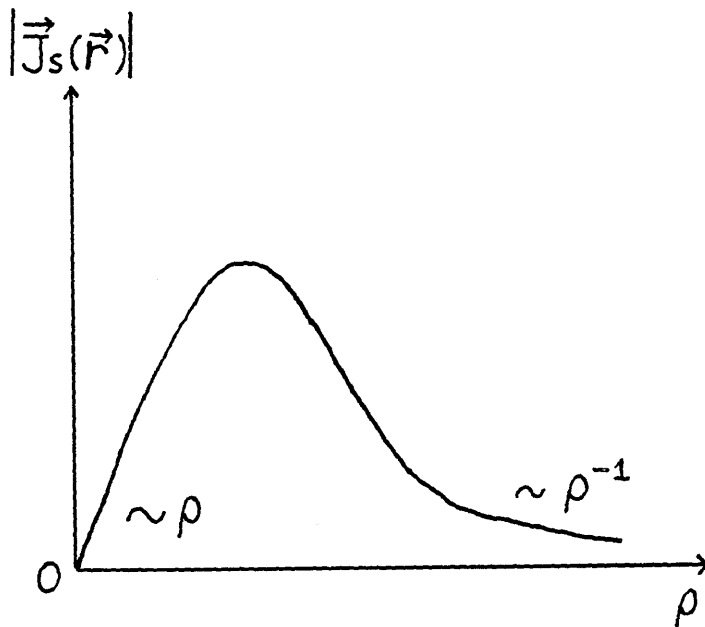
$$\hat{\varphi} = \hat{z} \times \hat{\rho}$$

$\hat{z}, \hat{\rho}$ はそれぞれ z 方向、動径方向の単位ベクトル.



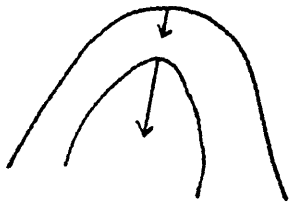
2-5 図

渦心付近の Φ の変化

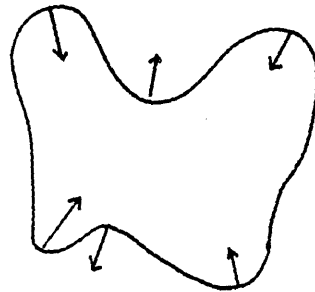


2-6 図

渦芯付近の \vec{J}_s の様子

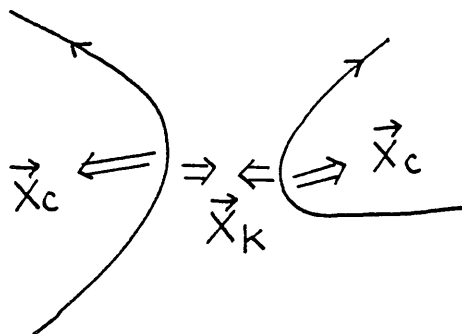


内側の方が速い。



「くびれ」はなくなっていく。

2-7 図 : 界面の運動



2-8 図 : 渦系に働く力

第3章 界面の動力学

—— 非保存スカラー場の秩序化過程 ——

非保存スカラー場の秩序変数をもつ体系を急冷したときの動力学は界面のそれとして記述できることを2章の(I)で述べた。その方程式は(2.16)式で与えられる。急冷した直後の界面は不規則に入りくんで分布しているであろう。本章ではこのような初期分布をもつ界面の時間発展を論ずる。

第1節 平均場理論¹⁵⁾

界面の法線方向速度 $v(F(a,t))$ と曲率 $K(F(a,t))$ が与えられているとき、単位体積あたりの界面の面積 A の時間変化を支配する方程式

$$\frac{dA}{dt} = - \int_{\text{全界面}} K v d^{d-1}a \quad (3.1.1)$$

に(2.16)式を代入すれば

$$\frac{dA}{dt} = - \Gamma \int K^2 d^{d-1}a \quad (3.1.2)$$

が導かれる。右辺を曲率の2乗平均 $\langle K^2 \rangle$ で置きかえる

と

$$\frac{dA}{dt} = -\Gamma \langle K^2 \rangle A \quad (3.1.3)$$

と簡単化される。 $\langle K^2 \rangle$ は長さの2乗の逆数、 A は長さの逆数の次元をもつから

$$\langle K^2 \rangle = \alpha A^2, \quad \alpha \text{ は定数} \quad (3.1.4)$$

が成立つと考えられ、 A は

$$\frac{dA}{dt} = -\alpha \Gamma A^3 \quad (3.1.5)$$

に従うであろう。この解として

$$A(t) = (A(0)^{-2} + 2\alpha \Gamma t)^{-1/2} \quad (3.1.6)$$

が導かれる。特に、初期の界面が無限に複雑に入りこんでいる場合は $A(0) = \infty$ に相当するから

$$A(t) \propto t^{-1/2} \quad (3.1.7)$$

となる。この結果は Allen と Cahn の述べているように、合金系の実験で証明されている。³³⁾

第2節 U場理論^{34)~36)}

第1節で述べたように、体系の特性的尺度が $t^{1/2}$ で発展することは次元解析的考察によっても判明するが、本節では空間的不均一性も取り入れて理論的考察を進めよう。このような理論は太田, Jasnow, 川崎によつてはいじめて提出され³⁴⁾、導かれた相関関数はシミュレーションとよく一致した³⁷⁾³⁸⁾。その後急冷後の温度が動力学に及ぼす影響³⁹⁾⁴⁰⁾や界面に働く揺動力の影響³⁵⁾なども調べられた。本研究では動力学の初期秩序変数に対する依存性を調べ、今までの理論で不十分だった点を補う。

界面の形状は曲率 $K(\vec{r}(a,t))$ を用いて表される。簡単のために2次元の界面を考えると、 K と a の従う運動方程式は

$$\left. \frac{dK}{dt} \right|_{\vec{n}} = \left(K^2 + \frac{\partial^2}{\partial a^2} \right) v \quad (3.2.1)$$

$$\frac{da}{dt} = - \int_0^a K(\vec{r}(a',t)) v(\vec{r}(a',t)) da' \quad (3.2.2)$$

と書かれる⁴¹⁾⁴²⁾。この2つの幾何学的関係式に v の表式(2.16)式を加えれば方程式は完結し、問題を解決することになるが、方程式の非線形性のために任意の初期条件のもとで解くことは不可能に近く、統計的性質の分析も困難であるから、次のような考え方を採用する。

あるスカラー場 $u(\vec{r},t)$ を導入し、 $u(\vec{r},t)$ の節面、即ち $u(\vec{r},t)=0$ を満たす面を界面に一致させ、節面の運動を論ずるのである。まず法線方向速度を $u(\vec{r},t)$ を用いて表わそう。法線方向の単位ベクトルは

$$\vec{n} = \vec{\nabla} u / |\vec{\nabla} u| \quad (3.2.3)$$

と表される。界面と共に動く座標を用いると、 $du/dt = 0$ であるから、

$$\frac{\partial u(\vec{r}(\vec{a}, t))}{\partial t} + \vec{\nabla} u(\vec{r}(\vec{a}, t)) \cdot \frac{d\vec{r}(\vec{a}, t)}{dt} = 0 \quad (3.2.4)$$

が導かれ、これに (2.16) 式

$$\frac{d\vec{r}(\vec{a}, t)}{dt} = v(\vec{r}(\vec{a}, t)) \vec{n}(\vec{r}(\vec{a}, t))$$

と (3.2.3) とを用いると

$$v(\vec{r}(\vec{a}, t)) = - \frac{\partial u(\vec{r}(\vec{a}, t))}{\partial t} / |\vec{\nabla} u(\vec{r}(\vec{a}, t))| \quad (3.2.5)$$

が得られる。曲率 $K = -\vec{\nabla} \cdot \vec{n}$ ⁴³⁾ にも (3.2.3) 式を用いると

$$\begin{aligned} K &= -\vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\vec{\nabla} u}{|\vec{\nabla} u|} \right) \\ &= -\frac{\nabla^2 u}{|\vec{\nabla} u|} + \frac{1}{|\vec{\nabla} u|^3} \sum_{\alpha, \beta} \nabla^\alpha u \nabla^\beta u \nabla^\alpha \nabla^\beta u \end{aligned} \quad (3.2.6)$$

が導かれる。(3.2.5), (3.2.6) 式を (2.16) 式に代入することにより、

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Gamma \nabla^2 u - \Gamma \vec{n} \vec{n} : \vec{\nabla} \vec{\nabla} u \quad (3.2.7)$$

が得られる。右辺第2項の $:$ はテンソルのスカラー積を表す。これは節面について得られた方程式であるが、 $u(\vec{r}, t)$ 全体がこの式に従うものと仮定する。(3.2.7)式に線形近似を適用することにする。十分に乱雑な界面の統計的性質に注目するのであるから、 \vec{n} の各成分に対して

$$\langle n_\alpha n_\beta \rangle = \frac{1}{d} \delta_{\alpha\beta} \quad (3.2.8)$$

とすると

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Gamma \left(1 - \frac{1}{d}\right) \nabla^2 u \quad (3.2.9)$$

と線形化される。このように、界面の運動は拡散方程式に従うスカラー場の節面の運動として記述されることになった。今後 $\Gamma(1 - \frac{1}{d})$ を単に Γ と書く：

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Gamma \nabla^2 u \quad (3.2.10)$$

界面が複雑に入りこんでいる状態を、 $u(\vec{r}, t)$ の分布がガウシアンであることと解釈する。以下に見るように物理量は $u(\vec{r}, t)$ の相関関数によって表される。 $u(\vec{r}, t)$ の平均値を $\langle u(\vec{r}, t) \rangle = U$ とし、2点相関関数

$$C(r, t) = \langle \delta u(\vec{r}, t) \delta u(\vec{0}, t) \rangle, \quad \delta u = u - U \quad (3.2.11)$$

を定義すると、それについては

$$\frac{\partial C(r,t)}{\partial t} = 2\Gamma \nabla^2 C(r,t) \quad (3.2.12)$$

が成立ち、初期の界面の相関距離を表すパラメータを α とすると

$$C(r,t) = B(t+\alpha)^{-d/2} \exp[-r^2/8L(t+\alpha)] \quad (3.2.13)$$

が導かれる。秩序変数 $M(t) = \langle \phi(\vec{r},t) \rangle$, 界面の面積 $A(t)$, および秩序変数の相関関数 $I(r,t) = \langle \phi(\vec{r},t) \phi(\vec{0},t) \rangle$ はそれぞれ

$$M(t) = \frac{1}{V} \int d^d r \langle \epsilon(\vec{r},t) \rangle \quad (3.2.14)$$

$$\begin{aligned} A(t) &= \frac{1}{V} \int d^d r \int d^{d-1} a \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}(a,t)) \rangle \\ &= \langle |\vec{\nabla} u| \delta(u(\vec{r},t)) \rangle \end{aligned} \quad (3.2.15)$$

$$I(r,t) = \langle \epsilon(u(\vec{r},t)) \epsilon(u(\vec{0},t)) \rangle \quad (3.2.16)$$

と表される。但し $\epsilon(x)$ は階段関数

$$\epsilon(x) = \text{sgn}(x) \quad (3.2.17)$$

である。簡単のために、 M の平衡値 $M(\infty)$ は 1 とした。いずれも $u(\vec{r},t)$ の多体相関が含まれているが、すべて体相関の積で表される。計算の詳細は付録 A に述べる。結

果として $M(t)$, $A(t)$ について

$$M(t) = \operatorname{sgn}(U) 2\pi^{-1/2} \operatorname{erf}\left(\left(\frac{U^2}{2\langle\delta u^2\rangle}\right)^{1/2}\right) \quad (3.2.18)$$

$$A(t) = N_d \left[\frac{\langle(\vec{\nabla}u)^2\rangle}{d\langle\delta u^2\rangle} \right]^{1/2} \exp\left(-\frac{U^2}{2\langle\delta u^2\rangle}\right) \quad (3.2.19)$$

が得られる。ここで $\operatorname{erf}(x)$ は

$$\operatorname{erf}(x) = \int_0^x e^{-z^2} dz \quad (3.2.20)$$

によって定義される誤差関数であり、 N_d は

$$N_d = \frac{(d-1) \Gamma((d-1)/2)}{2 \pi^{1/2} \Gamma(d/2)} \quad (3.2.21)$$

で与えられる。但し $\Gamma(x)$ はガンマ関数である。^(*) (3.2.18), (3.2.19) 式中の $\langle\delta u^2\rangle$ と $\langle(\vec{\nabla}u)^2\rangle$ は (3.2.13) 式より

$$\langle\delta u^2\rangle = B(t+\alpha)^{-d/2} \quad (3.2.22)$$

$$\langle(\vec{\nabla}u)^2\rangle = d[4\Gamma(t+\alpha)]^{-1} \langle\delta u^2\rangle \quad (3.2.23)$$

と計算される。従って (3.2.18), (3.2.19) は

(*) Γ がガンマ関数を表すのは (3.2.21) 式においてのみであり、他の箇所では TDGLW 方程式の運動係数を表す。

$$\eta_U(t) = \frac{2U^2}{B} (t+\alpha)^{1/2} \quad (3.2.24)$$

$$l(t) = [8\Gamma(t+\alpha)]^{1/2} \quad (3.2.25)$$

を用いて

$$M(t) = \operatorname{sgn}(U) \frac{2}{\pi^{1/2}} \operatorname{erf}(\eta_U(t)^{1/2}) \quad (3.2.26)$$

$$A(t) = \sqrt{2} N_d l(t)^{-1} e^{-\eta_U(t)} \quad (3.2.27)$$

のように表される。同様に相関関数に対しては

$$I(r, t) = \frac{2}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} A_n(\eta_U(t)) [y(r, t)]^n \quad (3.2.28)$$

が導かれる。但し

$$A_n(\eta) = \begin{cases} \frac{1}{n!} \left\{ \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2m+n-1)!!}{(2m+1)!} (-\eta)^{m+\frac{1}{2}} \right\}^2; n \text{ が偶数}, \\ \frac{1}{n!} \left\{ \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2m+n-2)!!}{(2m)!} (-\eta)^m \right\}^2; n \text{ が奇数}, \end{cases} \quad (3.2.29)$$

$$y(r, t) = e^{-r^2/l(t)^2} \quad (3.2.30)$$

である。 $U=0$ のときは $\eta=0$ であり

$$M(t) = 0 \quad (3.2.31)$$

$$A(t) = \sqrt{2} N_d l(t)^{-1} \quad (3.2.32)$$

$$I(r,t) = \frac{2}{\pi} \text{Arcsin}(\gamma(r,t)) \quad (3.2.33)$$

となる。このとき $I(r,t)$ は $r/l(t)$ のみの関数となりスケール則を満たす。

このような巨視量の時間変化は次のように解釈される。界面の特徴的な変化を 3-1 図に示す。(a) と (b) とでは最初界面の面積はほとんど変わらないが、時間かたつとも大きく異なってくる。界面は曲率が大きい程速く縮み、また正の曲率の部分と負の曲率の部分とがつかないという界面では両者の均質化が進むから、(a) のようにつかない界面の方がはるかに速く消失する。 $U=0$ のときは、 $\phi(F)=1$ の領域も $\phi(F)=-1$ の領域も体系全体にわたる大きなクラスターを作っているのに対し、 $U \neq 0$ のときは、優越した相の海に劣等相の孤立した島が浮かぶという様相になると考えられる。このような描像より、 $U=0$ の場合は $A(t) \propto t^{-1/2}$ となり、 $U \neq 0$ のとき $A(t)$ は指数関数的に減少することから理解される。シミュレーションにみられる空間的パターンはこのような描像に合致する(4-1 図)。

この理論に含まれるパラメータ U と α とは、体系の初期状態を表す物理量 $M(0)$ 、 $A(0)$ と関係がある。即ち、(3.2.26)、(3.2.27) で $t=0$ とおくと

$$M(0) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \text{erf} \left(\frac{U}{\sqrt{2B}} \alpha^{d/4} \right)$$

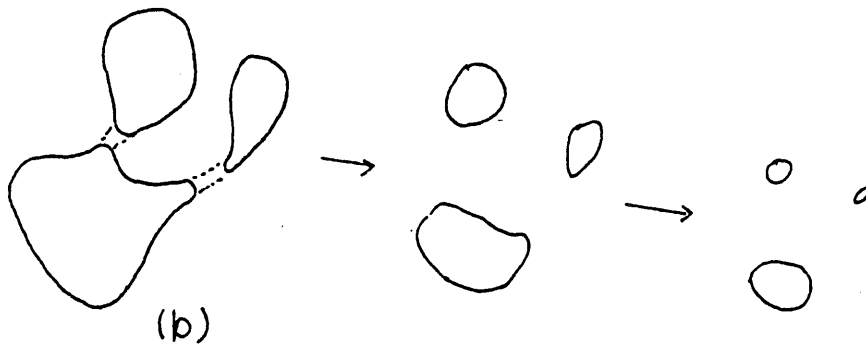
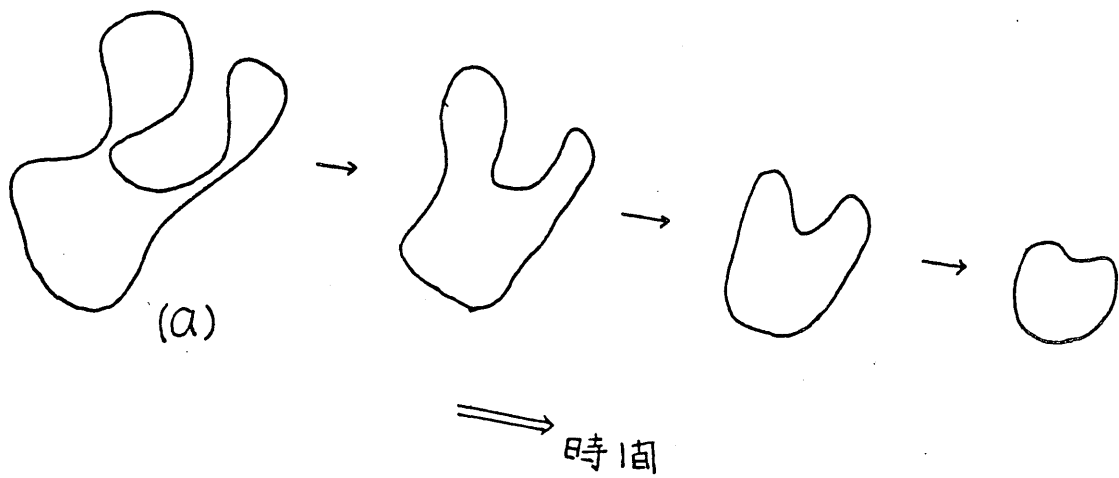
$$A(0) = Nd (4\Gamma\alpha)^{-1/2} \exp \left(-\frac{U}{\sqrt{2B}} \alpha^{d/4} \right)$$

が導かれるのである。 $M(0) \ll 1$ の場合には近似的に

$$\alpha \approx \frac{N_d^2}{4\Gamma} A(0)^{-2} \quad (3.2.34)$$

$$U \approx \left(\frac{\pi B}{2} \right)^{1/2} (2\pi N_d^2)^{-d/4} M(0) A(0)^{d/2} \quad (3.2.35)$$

が成立つ。このようにして巨視的変数の時間発展が、これらの初期値のみによって決定された。もし $\alpha = 0$ であると、 U は $M(0)$, $A(0)$ の関数として定まらず、任意のパラメータになってしまう。われわれが注目したい時間領域は α が無視できる $\gg \alpha$ の領域であるために、従来の理論は最初なる $\alpha = 0$, 即ち $\langle u(\vec{r}, 0) u(\vec{0}, 0) \rangle = \delta(\vec{r})$ としていた。本研究においてはその点を改善することにより U の意味を解明するとともに、これまで求められていなかった $M(t)$ の時間変化や $U \neq 0$ のときの $I(r, t)$ を求めることに成功した。



3 - 1 図

界面のつながり方によて収縮の速さが大きく異なる。

第4章 動的 Ising モデルのシミュレーション

第1節 モデルと方法

本章では、非保存スカラー量の秩序変数をもつ体系の秩序化過程に対するシミュレーションを実行し、得られた結果を3章で述べた1場理論と比較する。その目的にかなう最も単純化されたモデルは動的 Ising モデルと呼ばれるものである。

Ising モデルのハミルトニアンは

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (4.1.1)$$

によって与えられる。スピン変数 σ_i は ± 1 の値をとる。格子は正方格子とし、相互作用は最近接のスピン間だけに考える。 $J > 0$ とすれば強磁性体や一軸性強誘電体を急冷したモデルになり、 $J < 0$ の場合は反強磁性体や秩序-無秩序転移をおこす AB 合金などのモデルとなる。この場合、 $\sigma_i = 1$ は i 格子に A 原子が、 $\sigma_i = -1$ は i 格子に B 原子が占めることを意味する。秩序変数は強磁性系の場合には

$$M(t) = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i \quad (4.1.2)$$

反強磁性系の場合には

$$M_s(t) = \frac{1}{N} \sum_i (-1)^i \sigma_i \quad (4.1.3)$$

と定義される。

動力学の原理を次のように考える。体系全体は恒温槽に接しており、その温度に応じた熱揺動力によってスピンの反転する。反転の素過程としては、強磁性系と反強磁性系とで異なるものを考える必要がある。なぜなら、二元合金のモデルとしての反強磁性系では、原子数が保存することを考慮に入れなければならないからである。格子点 A, B いずれかの原子で占められているから、いくつかの原子が循環的に入れかわるという形式でのみ原子の移動が起る。そのうち最も単純な、最隣接の原子が入れかわる運動だけを考えると、反強磁性モデルにおいて、それは最隣接スピンの交換に対応する。従ってこのような動的モデルはスピン交換ダイナミクスと呼ばれる。一方強磁性系では、スピン反転に対して何ら制限はないから各々のスピンは独自に運動する。従ってこれはスピン反転ダイナミクスと呼ばれる。

体系全体のスピン配列 $\{\sigma\}$ に対する確率分布関数 $P(\{\sigma\}, t)$ の従う方程式は

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\{\sigma\}, t)}{\partial t} = & -P(\{\sigma\}, t) \sum_{\{\sigma'\} \neq \{\sigma\}} W(\{\sigma\}, \{\sigma'\}) \\ & + \sum_{\{\sigma'\} \neq \{\sigma\}} P(\{\sigma'\}, t) W(\{\sigma'\}, \{\sigma\}) \quad (4.1.4) \end{aligned}$$

によって与えられる。但し、 $W(\{\sigma\}, \{\sigma'\})$ は $\{\sigma\}$ から $\{\sigma'\}$ への遷移確率である。 W は、体系が非平衡状態にあるか平衡状態にあるかに関係なく恒温槽の温度だけに依存すると考えれば、あらゆる時間に時間を含まず、熱平衡にある体系には詳細釣り合い

$$P_{eq}(\{\sigma\}) W(\{\sigma\}, \{\sigma'\}) = P_{eq}(\{\sigma'\}) W(\{\sigma'\}, \{\sigma\}) \quad (4.1.5)$$

が成立つことにより、

$$\frac{W(\{\sigma\}, \{\sigma'\})}{W(\{\sigma'\}, \{\sigma\})} = e^{-[H(\{\sigma'\}) - H(\{\sigma\})]/k_B T} \quad (4.1.6)$$

が導かれる。 $P(\{\sigma\}, t)$ の時間発展を数値的に求めるためにはすべてのスピン配列に対する遷移確率を各時間ステップごとに計算しなければならず、實際上そのようなことは困難である。そこで Monte-Carlo 法 (MC 法) と呼ばれるシミュレーションの方法が用いられる⁴⁴⁾。それは次のような手順で行われる。

- 1) 初期のスピン配列を設定する。
- 2) 計算機の擬似乱数を用いて一つの格子点 i (反強磁性系では格子点対) を選ぶ。
- 3) i 格子点のスピン σ_i を確率 $W(\sigma_i; \{\sigma\}', -\sigma_i; \{\sigma\})$ で反転させる。
- 4) 全格子数 N だけ 2), 3) をくり返す過程を単位時間とする。

$W(\sigma_i; \{\sigma\}', -\sigma_i; \{\sigma\})$ は σ_i だけを反転させ、その他のスピン $\{\sigma\}$ を動かさないでおく確率であり、(4.1.6) より

$$W(\sigma_i; \{\sigma\}', -\sigma_i; \{\sigma\}) = \frac{e^{-\Delta H/k_B T}}{1 + e^{-\Delta H/k_B T}} \quad (4.1.7)$$

と導かれる。但し、

$$\Delta H = H(\sigma_i; \{\sigma_j\}) - H(-\sigma_i; \{\sigma_j\}) \quad (4.1.8)$$

である。

本研究では、強磁性系を絶対零度に急冷した場合についてだけシミュレーションを実行する。初期値の違いによる動的振舞いを調べるためにはこれで十分なのである。^(*)

スピンの初期配列は高温の無秩序状態に対応するように、 $[0, 1)$ 区間の擬似乱数列 $\{x_i\}$ を用いて

$$0 \leq x_i < \frac{M(0)+1}{2} \quad \text{のとき} \quad \sigma_i = 1$$

$$\frac{M(0)+1}{2} \leq x_i < 1 \quad \text{のとき} \quad \sigma_i = -1$$

のように設定する。このようにすれば、秩序変数 $M(0)$ の不規則な配列が得られるのである。

シミュレーションによって得られたスピン配列 $\{\sigma_i(t)\}$ に対して、秩序変数は (4.1.2) のように、また界面の面積と構造関数はそれぞれ

$$A(t) = -\sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i(t) \sigma_j(t) - 1) / 2, \quad (4.1.9)$$

(*) 強磁性系の秩序変数 $M(t)$ も反強磁性系の秩序変数 $M_S(t)$ も両方とも保存量ではないので、巨視的にみれば同様な非保存系と考えられる。Zhang, Valls, Mazenko はマスタ-方程式 (4.1.4) に基づく理論とシミュレーションにより、 $M(0)=0$ の場合についてそのことを示した。⁴⁵⁾

$$S(k, t) = \frac{1}{N} \left| \sum_i e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \sigma_i(t) \right| \quad (4.1.10)$$

(\vec{r}_i は i 格子点の空間ベクトル)

のように与えられる。

なお、体系の大きさは、2次元については 135×135 、3次元については $45 \times 45 \times 45$ とする。

第2節 シミュレーションの結果と本理論との比較

本節ではまず、われわれが行った $M(0) \neq 0$ の場合についての結果を述べ、後で本研究では計算しなかった相関関数について、Phani らと Sahni らが行ったシミュレーションの結果を述べる。

スピンの配列の時間変化の一例を 4-1 図に示す。初期条件を $M(0) = 0$ とした場合 (a) と $M(0) \neq 0$ とした場合 (b) との違いは一見して明瞭である。(a) の場合、ほとんどの格子点が体系全体に拡がったクラスターに属している。それは $\sigma = 1$, $\sigma = -1$ いずれの相についても言えることである。一方、(b) の場合には、支配的な相の「海」の中にもう一方の相の「島」がこまかく分断されて存在するパターンが見られる。両者の違いは、才3章において界面の運動という観点から説明した事実と一致する。4-2図、4-3図に示すように $M(0) = 0$ のとき界面の面積 $A(t)$ は $t^{-1/2}$ に従って減少するが、 $M(0) \neq 0$ のときはそれよりはるかに速く減少している。後者の理論の結果のような指数関数的振舞を示しているかどうか調べるために、 $M(0) \neq 0$ の場合と $M(0) = 0$ の場合の比 $A(t)/A_0(t)$ を片対数プロットしてみる。それらを 4-4図に示す。2次元、3次元

ともに理論の結果

$$A(t) \propto t^{-1/2} e^{-\gamma t^{d/2}} \quad (4.2.1)$$

と一致する。4-1表に掲げるように初期値 $A(0)$ の違いは $M(0)$ のそれにくらべて僅かであるが、この僅かな差によって先の時間変化が大きく変わることは、界面のつながり方が本質的に大事だという3章で述べた見地と一致している。

次に、理論より得られる指数関数のパラメータ γ と $M(0)$, $A(0)$ との関係

$$\gamma \propto U^2 \propto [M(0)A(0)^{d/2}]^\delta, \quad \delta = 2 \quad (4.2.2)$$

が成立つかどうか調べてみよう。4-4図より求められる γ と、 $M(0)A(0)^{d/2}$ とを両対数プロットしたのが4-5図である。結果として、2次元系では $\delta = 2.2$, 3次元系では $\delta = 2.3$ が得られた。サンプル数が少ないために統計的処理は行っていないが、4-4図・4-5図の点のばらつきからみて、誤差は10%程度と見積られる。その程度の誤差とすると2次元と3次元との差異の有無ははっきりしないが、両方とも理論値より僅かに上へずれていることは確からしい。このずれは、(3.2.9)式において無視した非線形項をとり入れることによって説明されうるものと思われるが、また実行してはいない。

秩序変数の時間変化の典型例を4-6図に示す。(3.2.24), (3.2.26)式によれば、時間およびパラメータ α を

$$\tau = (U/\sqrt{2B})^{4/d} t, \quad \alpha_s = (U/\sqrt{2B})^{4/d} \alpha \quad (4.2.3)$$

とスケールすることにより、

$$M(\tau) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \operatorname{erf}(\tau + \alpha_s)^{d/4} \quad (4.2.4)$$

と書かれる。 τ と $M(0)$, $A(0)$ の関係は (4.2.2) 式で表されるから

$$\tau = 10 [M(0) A(0)^{d/2}]^{2\delta/d}, \quad \delta = 2; d=2 \quad (4.2.5)$$

とスケールして描いたのが 4-7 図である。また一方向へのずれかみられるか、これは δ を大きくすることによって修正される。 $A(t)$ の振舞から得られた値 $\delta = 2.2$ を採用し ($\tau' = 10 [M(0) A(0)]^{2.2} t$)、かつ α_s も考慮に入れて描くと 4-8 図のようになる。 α_s は $M(\tau') - \tau'$ の図における時間原点のずれより求めた。一致は $\delta = 2$ の場合よりずっとよい。

構造関数の動的振舞については Phani³⁷⁾ と Sahni³⁸⁾ の研究がある。彼らは構造関数のスケールリング的振舞に興味をもっていたので、初期の秩序変数かせ"0 の場合だけ調べた。構造関数の 2 次モーメント

$$k_s(t)^2 = \sum_{\mathbf{k}} k^2 S(\mathbf{k}, t) / \sum_{\mathbf{k}} S(\mathbf{k}, t) \quad (4.2.6)$$

より体系の特性的尺度を知ることができると期待されたように $k_s(t)$ は $t^{1/2}$ に従って増大することが確かめられた (4-9 図)。さらにこの $k_s(t)$ を使って構造関数の波数をスケールすることにより、 $S(\mathbf{k}, t)$ は

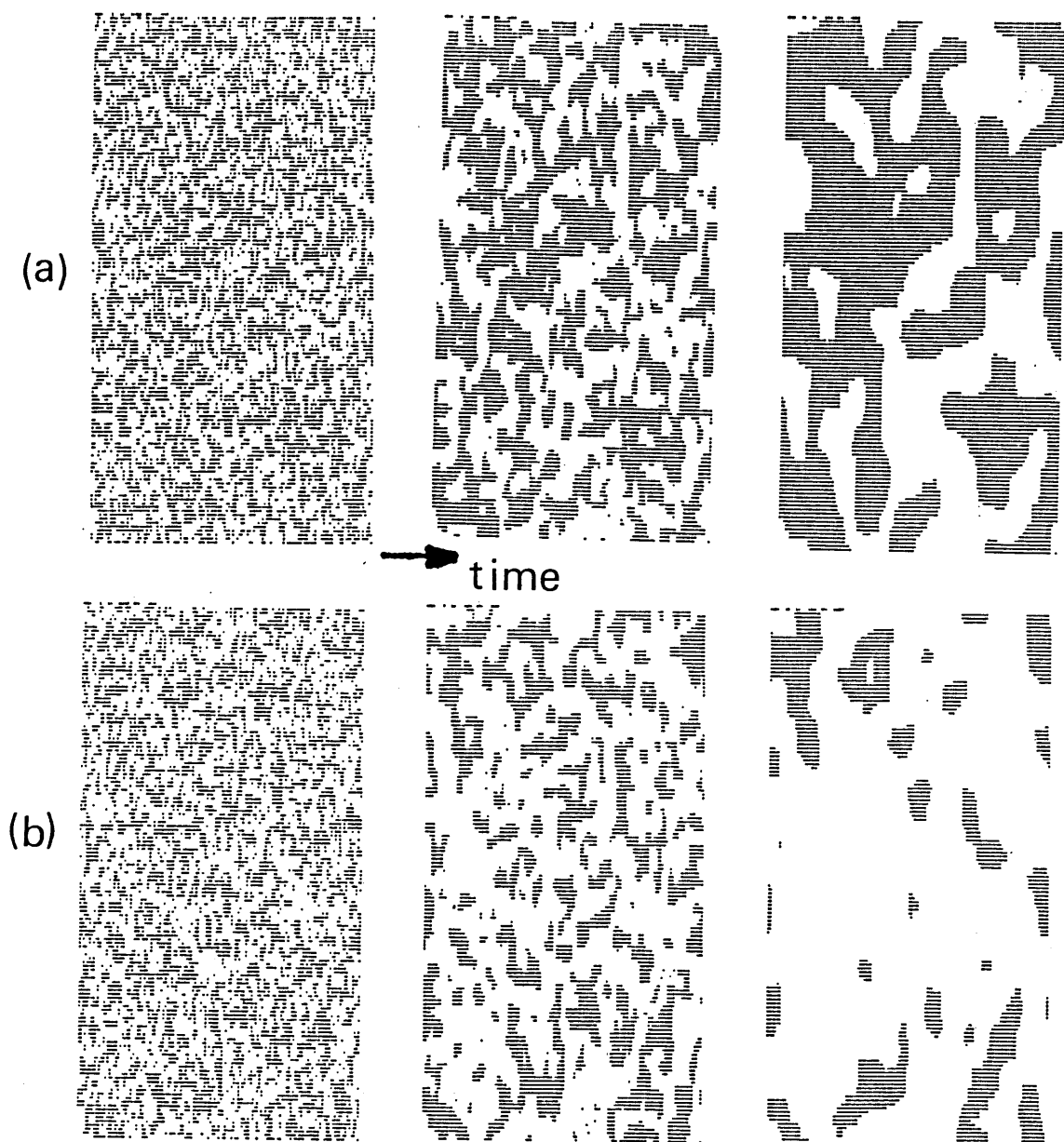
$$S(k, t) = t^{d/2} F(k/k_s(t))$$

のように $k/k_s(t)$ の冪次関数であらわされることかわかった(4-10図)。4-11図のように $F(x)$ は μ 場理論による結論とよく一致する。初期の秩序変数かゼロでないときの構造関数も μ 場理論の結果と一致することは当然予想される。

4 - 1 表

N_+/N_-	$A(0)/A_0(0)$	$M(0)$
1.00	1.0	-0.002
1.15	0.998	0.065
1.25	0.992	0.107
1.35	0.982	0.145
1.45	0.969	0.181
1.55	0.954	0.215
1.70	0.933	0.256
1.80	0.919	0.280

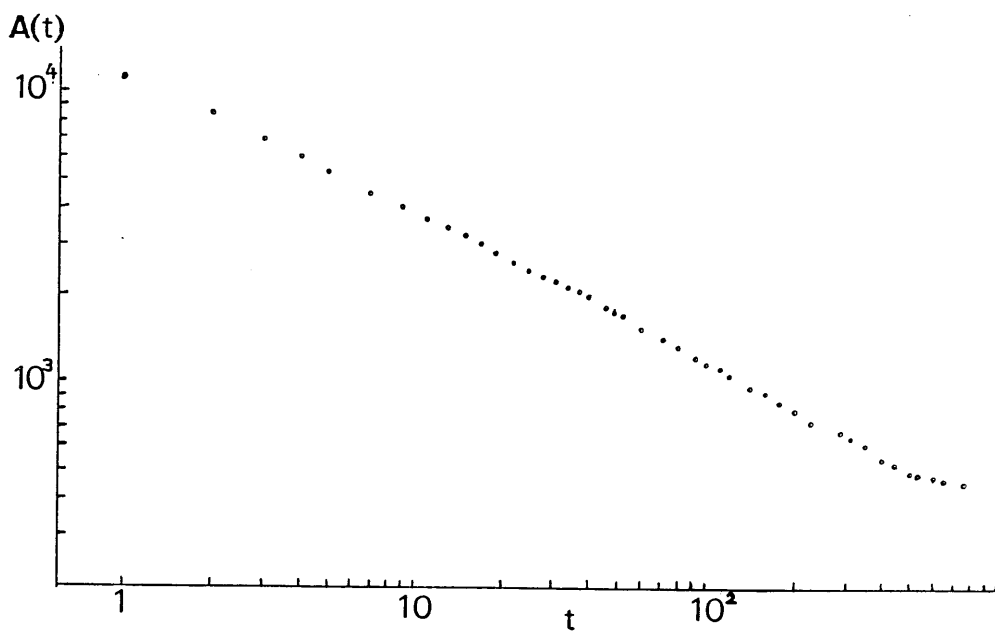
初期値の例。2次元系における
同一の乱数列によるもの。



4-1 図

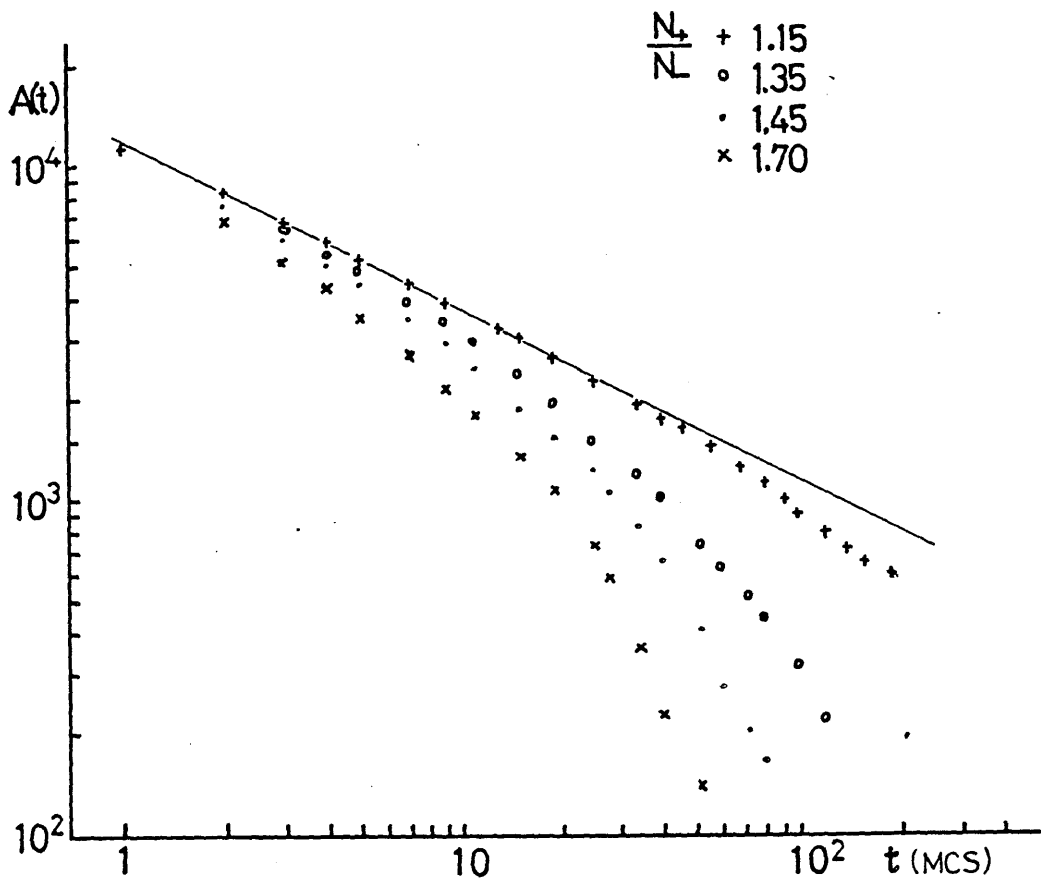
スピンの配列の時間変化の例。体系の大きさは 135×135 。白は $\sigma_i = +1$, 黒は $\sigma_i = -1$ を表す。

初期条件: (a) $N_+/N_- = 1.0$, (b) $N_+/N_- = 1.1$ 。 N_+ , N_- はそれぞれ $\sigma_i = +1$, $\sigma_i = -1$ のスピンの数である。



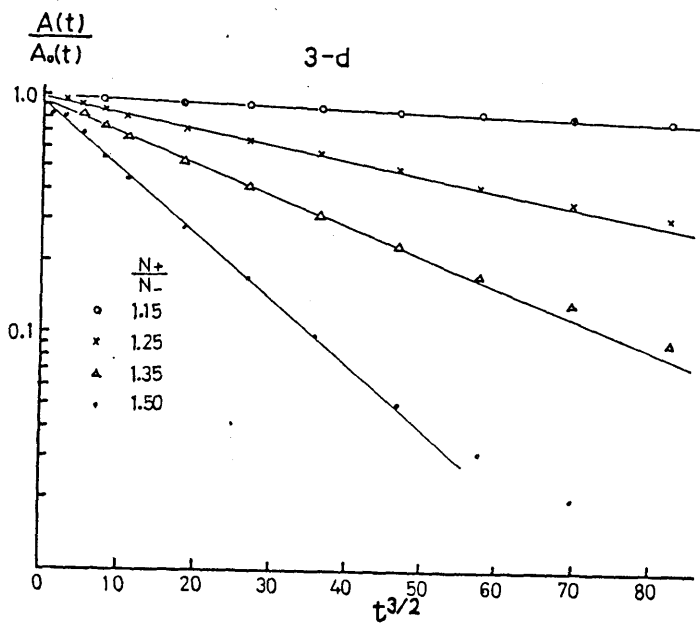
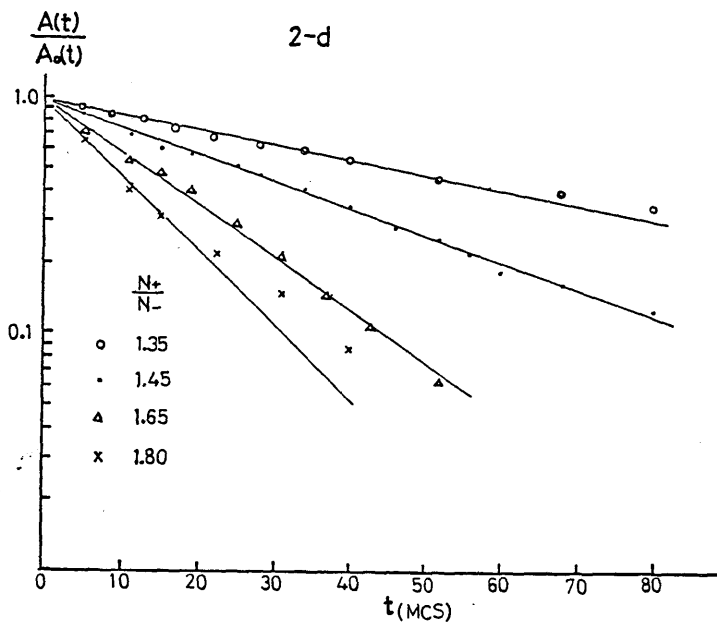
4 - 2 図

$M(0) = 0$ の場合の界面の面積の時間変化。
傾きは 0.50 である。



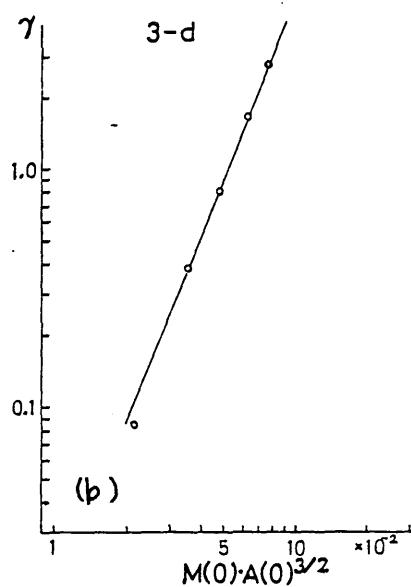
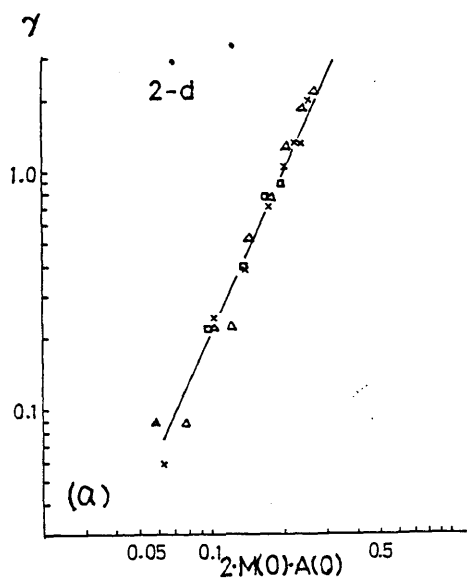
4-3 ☒

界面の長さの時間変化。実線は 4-2 図のデータより引いたもの。



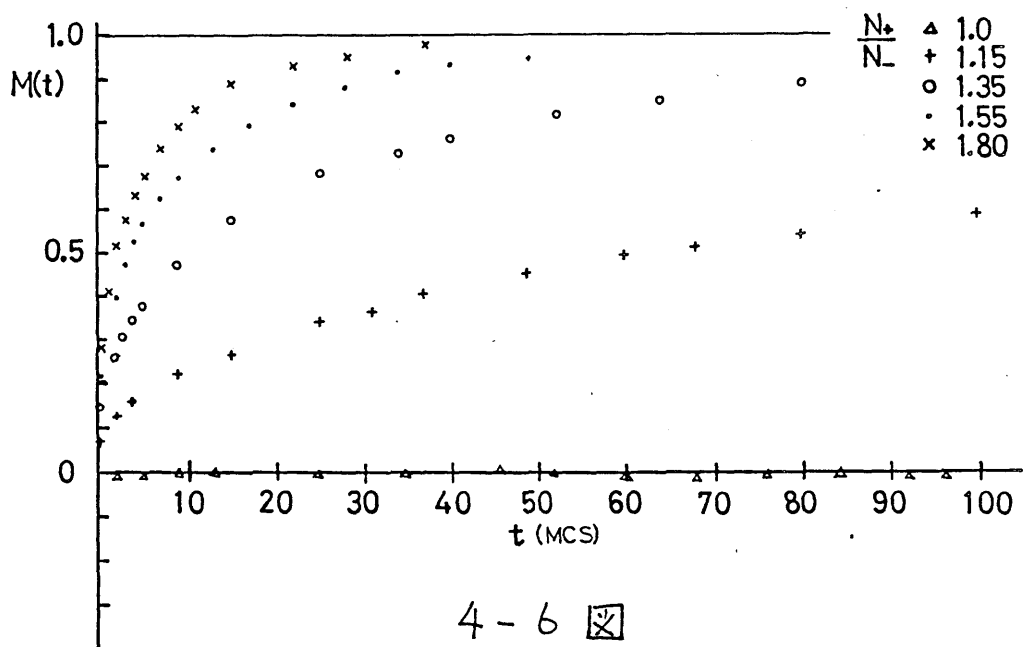
4-4 図

$A(t)/A_0(t) \propto t^{d/2}$ との関係。上は 135×135 の体系、
下は $45 \times 45 \times 45$ の体系。

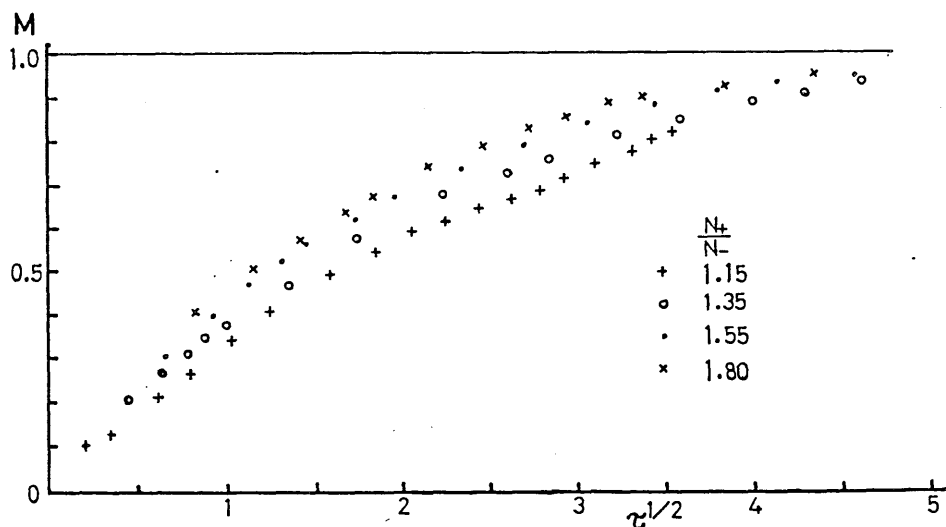


4 - 5 図

γ と $M(0) A(0)^{d/2}$ の関係。 γ は 4-4 図における勾配より得られる。 (a) は 135×135 の体系, (b) は $45 \times 45 \times 45$ の体系。 勾配は δ を与える。 それぞれ 2.2 と 2.3。

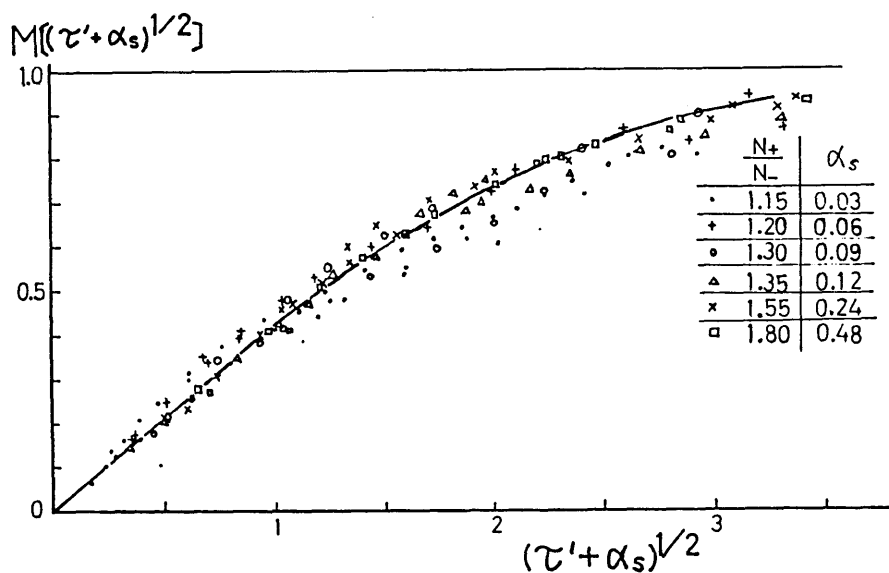


秩序変数の時間変化の例。各々の N_+/N_- について同じ乱数列を用いてシミュレートした結果。



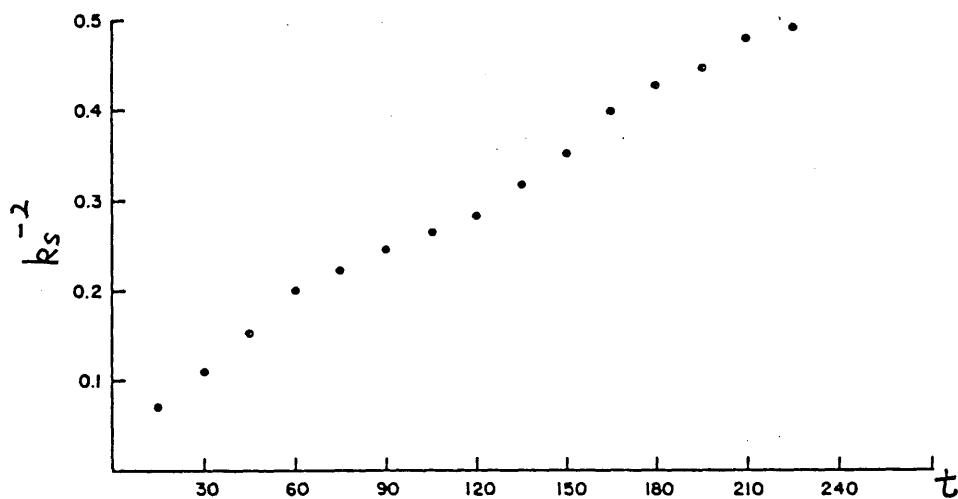
4-7 図

4-6 図のデータをスケールされた時間 $\tau = 10[M(0)A(0)/N^2]^2 t$ を横軸にして描いたもの。但し、 N は格子数。



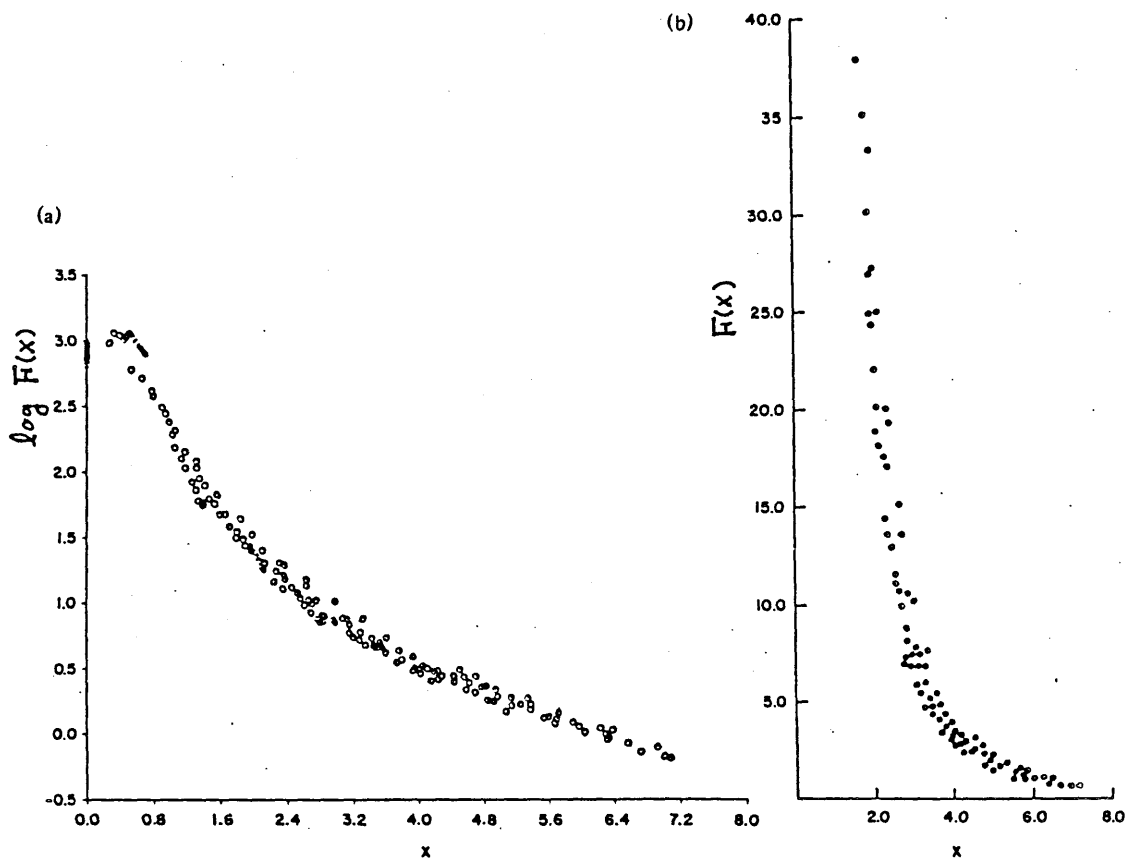
4-8 図

スケールされた時間 $\tau' = 10[M(0)A(0)/N^2]^{2.2} t$ と M の関係。
 α_s は $M(\tau) - \tau'$ 図より評価。3つの乱数列による結果を描いた。実線は理論的結果(3.2.26式)を表す。



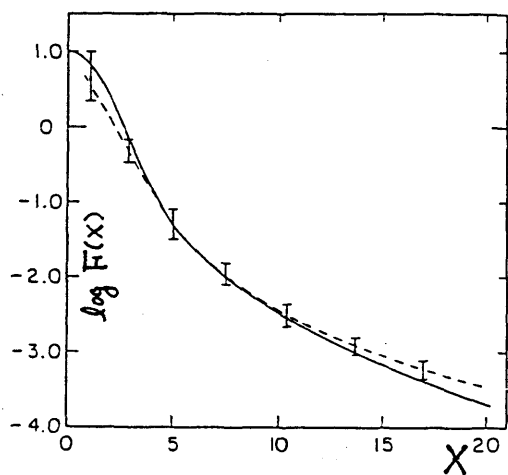
4-9 図

構造関数の2次モーメントの時間変化。
 Sahni のシミュレーションの結果。
 (文献 38)より引用)

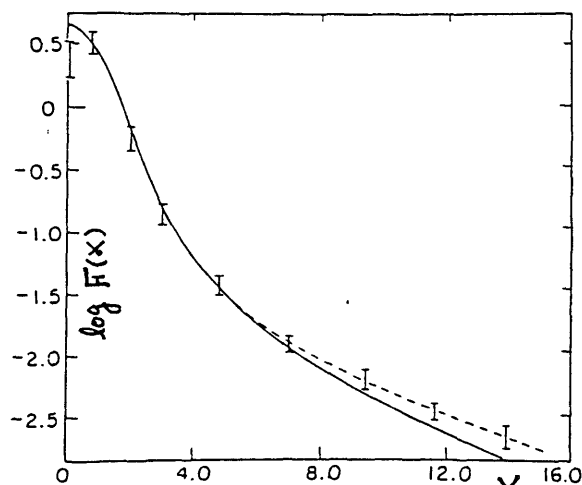


4-10 図

シミュレーションによるスケールされた構造関数.
(文献 38)より引用.)



(a)



(b)

4-11 図

スケールされた構造関数。実線は μ 場理論の結果であり、棒および点線はシミュレーションの結果である。(a)は3次元系で、シミュレーションはPhaniらによる。(b)は2次元系で、シミュレーションはSahniらのものである。(文献34より引用。)

第5章 界面の運動とフラクタル次元⁴⁶⁾

—— 界面の離散的モデル ——

3章で述べたように、界面の運動方程式は一般に

$$v(a) = F(K(a)) \quad (5.1)$$

$$\frac{da}{dt} = - \int_0^a K(a') v(a') da' \quad (5.2)$$

$$\left[\frac{dK(a)}{dt} \right]_{\vec{n}} = (K^2(a) + \frac{\partial^2}{\partial a^2}) v(a) \quad (5.3)$$

で与えられる。但し、ここでは2次元中の界面だけを考え、 v は一般化して K の任意の関数とする。3章で展開した立場理論は、ランダムな界面の動力学的統計的性質をよく説明するが、この理論は界面の運動を直接調べたものではないので、界面の幾何学的形状と運動の間の関係については解明しにくい。一方、(5.1)～(5.3)式に基づいて界面の運動を直接調べることは、その非線形性ゆえにごく簡単な形状の場合を除いて困難である。そこで、幾何学的形状についての情報を含み、(5.1)～(5.3)式と類似な運動法則をもつ、理論的に取扱えるモデルを考える。その際、単純に空間を格子に区切ってその上で界面を考えることは、連続場の方程式を単に粗い精度で眺めるということにすぎないのであまり意味がない。

ここでは、界面が自己相似的に時間変化することに注

目し、はいめからそのことを取入れたモデルを作る。空間的尺度を変えて眺めたとき自己相似になる図形はフラクタルと呼ばれ、近年様々な分野で見出されている。^(*) 界面のモデルとして、ジェネレーターが d 次元中の $d-1$ 次元であるフラクタル図形を考える。その例としては、5-1図のようなコッホ曲線などがよく知られている。ある図形を r 倍に拡大して見たとき 1つの要素が N 個の同様な要素から成立っている場合、フラクタル次元は

$$D = -\log N / \log r \quad (5.4)$$

と定義される。

このような図形のダイナミクスを考えよう。初期の界面を完全なフラクタル図形とし、それが時間とともに縮んでいくモデルを作る。縮む過程は (5.1) ~ (5.3) 式からの類推より設定する。収縮の過程の例を描いたのが 5-2図である。 k ステップの要素の長さを $r_k = r^k$, その面積を r_k^{d-1} としよう。また、 k ステップから $k-1$ ステップへ縮む時間を τ_k とする。 r_k^{-1} は界面の複雑さを表すから、連続体モデルにおける曲率 K に対応させるのが適当である。 :

$$K(a) \rightarrow r_k^{-1} \quad (5.5)$$

これに対応して、界面の面積は

$$A(t) = \int_{\text{全界面}} d^{d-1}a \rightarrow A_k = r_k^{d-1} N^k \quad (5.6)$$

と関係づけられる。(5.1), (5.2) 式より $A(t)$ の従う方程式は

$$\frac{dA(t)}{dt} = - \int_{\text{全界面}} K(a) F(K(a)) d^{d-1}a \quad (5.7)$$

と書かれる。これに類似なように A_k の従う方程式を作る

$$\frac{A_k - A_{k-1}}{\tau_k} = - N^k r_k^{-1+(d-1)} F(r_k^{-1}) \quad (5.8)$$

となる。但し、ランダムネスがない場合には積分が $N^k r_k^{d-1}$ でおきかえられることを使った。(5.6) の定義を (5.8) に用いることにより、 τ_k が

$$\tau_k = C r_k / F(r_k^{-1}) \quad (5.9)$$

で与えられることが分る。但し

$$C = 1 - r^{-(d-1)} N^{-1} \quad (5.10)$$

である。初期状態 ($k = \infty$) から k ステップまでの収縮時間 T_k は

$$T_k = \sum_{k'=k+1}^{\infty} \tau_{k'} \quad (5.11)$$

のように定義される。以下で $F(r_k^{-1})$ が「曲率」の単一のべきで与えられる場合

$$F(r_k^{-1}) = b r_k^{-\beta} \quad (5.12)$$

について考えてみよう。これは連続体界面のモデルでは $v \propto K^\beta$ であることに当たっている。このとき T_k と r_k と

の間の関係は

$$r_k = r_0 T_k^{1/(1+\beta)} \quad (5.13)$$

と導かれる。但し

$$r_0 = \left[\frac{b}{c} (r^{-(1+\beta)} - 1) \right]^{1/(1+\beta)} \quad (5.14)$$

である。(5.13)式を(5.11)式に代入することにより

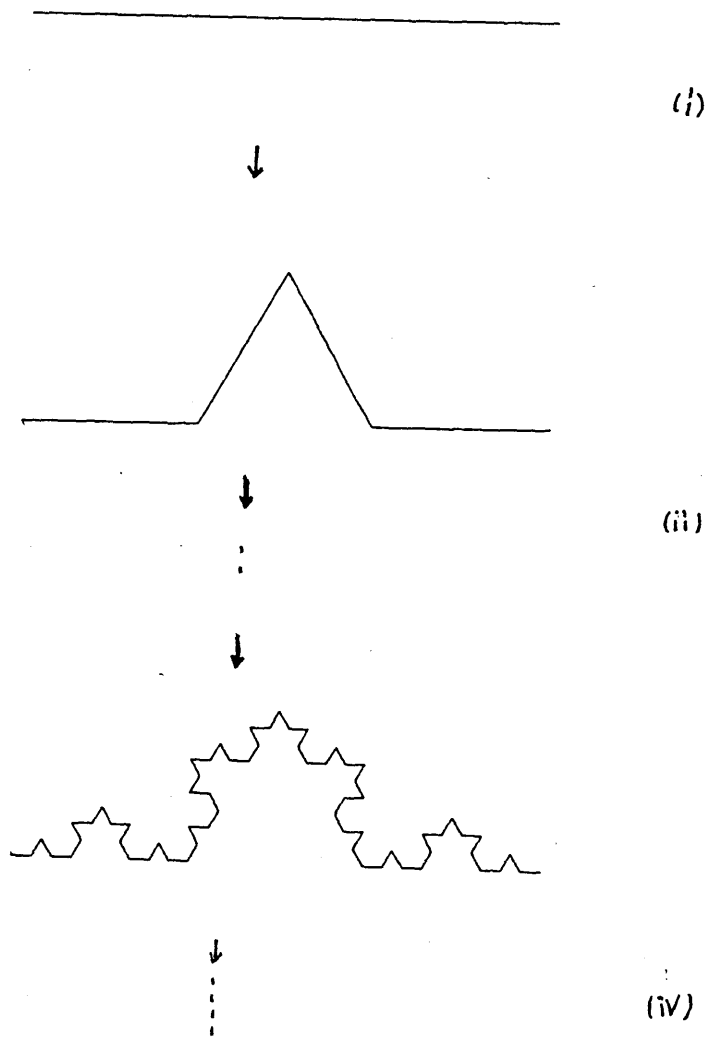
$$A_k = A_0 T_k^{(d-1-D)/(1+\beta)} \quad (5.15)$$

が導かれる。但し

$$A_0 = r_0^{d-1-D} \quad (5.16)$$

である。 r_k は体系の平均的尺度を表し、才3章における $l(t)$ に相当するから、 $\beta=1$, $d=D$ とおくことにより3章の結果 $l(t) \propto t^{1/2}$ が得られ、同時に $A(t) \propto t^{-1/2}$ も導かれる。 $D=d$ は、最初界面が空間を埋めつくしていることを意味し、直観的描像と一致する。

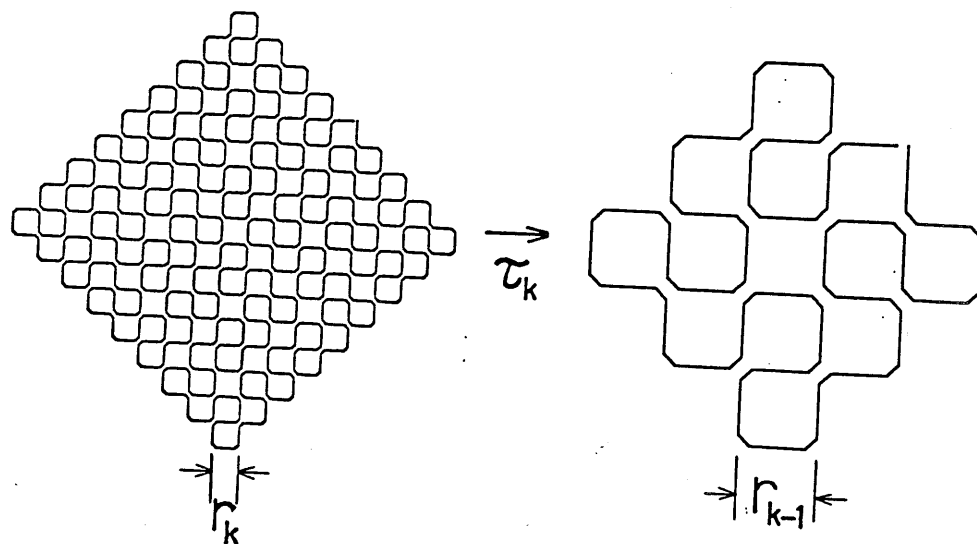
U場理論とシミュレーションにおいて現れた指数関数的な振舞を幾何学的モデルに基づいて理解することは興味ある問題であるが、まだ成功していない。



5-1図

コッホ曲線。 (i) \rightarrow (ii) \rightarrow (iii) \cdots の
操作を無限回行う。

$r=3$, $N=4$.



5-2 図

収縮の過程の一例。

$k \rightarrow \infty$ の図形は ヘア) 曲線
と呼ばれる。 $D=2$ 。

第6章 渦系の動力学

—— 複素場の秩序化過程 ——

秩序変数か複素数である体系が急冷されたときの動力学を考察する。そのような体系では、極めて初期の段階において渦系が形成されることを2章で述べた。同時に、渦系の従う運動方程式が(2.39)~(2.42)式のように導かれた。本章では、それらの方程式に基づき、複雑に入りこんだ初期状態をもつ渦系の運動を統計力学的に研究する。いわゆる Magnus 力と呼ばれる渦系間の長距離相互作用((2.41), (2.42)式)の理論的取扱いは難しいが、ここではそれを無視した場合に得られる結果について述べる。

第1節 平均場理論

4章第1節で述べた界面の収縮に関する Allen と Cahn の考察を応用する。Magnus 力を無視すると、渦系の方程式は(2.39), (2.40)式より

$$v(\tau) = \int_S K(\tau) \quad (6.1.1)$$

と書かれる^(*)。 $v(\tau)$ は系上の座標 τ における法線方向速度、 $K(\tau)$ は系の曲率である。界面の場合と同様に、単位体積あたりの系の長さ L の時間変化は

(*) $\epsilon_c = 1$ とした。

$$\frac{dL}{dt} = - \int v(\tau) k(\tau) d\tau \quad (6.1.2)$$

に従う。(6.1.1), (6.1.2)式より

$$\frac{dL}{dt} = - \Gamma_s \int k(\tau)^2 d\tau \quad (6.1.3)$$

が得られる。 k^2 を平均値でおきかえよう:

$$\frac{dL}{dt} = - \Gamma_s \langle k^2 \rangle L \quad (6.1.4)$$

$\langle k^2 \rangle$ も L も $(\text{長さ})^{-2}$ の次元をもつことから

$$\langle k^2 \rangle \propto L \quad (6.1.5)$$

と仮定すると

$$\frac{dL}{dt} \propto L^2 \quad (6.1.6)$$

が導かれる。初期の L が無限大のときには

$$L \propto t^{-1} \quad (6.1.7)$$

が得られる。

第2節 u場理論の適用

界面の運動を記述する際に用いたu場と同様に，渦系の運動を記述するための仮想的な場を導入しよう。3次元中の曲線は2つの曲面の交線で表されるので，系を，スカラー場 $u(\vec{r}, t)$ と $v(\vec{r}, t)$ の節面 ($u=0, v=0$ を満たす面) として表すことにする。この節面が (6.1.1) に従って動くように $u(\vec{r}, t)$ と $v(\vec{r}, t)$ の運動方程式を作ろう。3章の2節で述べた方法を踏襲する。系とともに動く動座標では $du/dt = 0$ であるから，

$$\frac{\partial u(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} u(\vec{r}, t) \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} \Big|_{\vec{n}} = 0 \quad (6.2.1)$$

が得られる。 $v(\vec{r}, t)$ についても同様である。(6.1.1)式は， $\vec{r}(\tau)$ にある系片が $\vec{n}(\tau)$ の方向に $\int_s K(\tau) d\tau$ で動くことを表しているから

$$\frac{d\vec{r}(\tau)}{d\tau} \Big|_{\vec{n}} = \int_s K(\tau) \vec{n}(\tau) \quad (6.2.2)$$

と書くことができる。さらに Frenet - Serret の公式 (付録 B)

$$\frac{d\vec{t}}{d\tau} = K(\tau) \vec{n}(\tau) \quad (6.2.3)$$

を用いれば (6.2.2) は

$$\frac{d\vec{r}(\tau)}{d\tau} \Big|_{\vec{n}} = \int_s \frac{d\vec{t}(\tau)}{d\tau} \quad (6.2.4)$$

と書かれる。(6.2.4)式を(6.2.1)式に代入することにより

$$\frac{\partial u(\vec{r}, t)}{\partial t} = - \Gamma_s \frac{d \vec{E}(\vec{r}(t), t)}{d\tau} \cdot \vec{\nabla} u(\vec{r}, t) \quad (6.2.5)$$

が得られる。但し、 \vec{E} は系の接線方向の単位ベクトルであり、 $\vec{\nabla} u$ と $\vec{\nabla} v$ を用いて

$$\vec{E} = \frac{\vec{\xi}}{|\vec{\xi}|} \quad , \quad \vec{\xi} = \vec{\nabla} u \times \vec{\nabla} v \quad (6.2.6)$$

と表される。 $d/d\tau = \vec{E}(\vec{r}(t)) \cdot \vec{\nabla}$ を利用すれば

$$\begin{aligned} \frac{d \vec{E}}{d\tau} &= \vec{E} \cdot \vec{\nabla} \vec{E} \\ &= \frac{\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla} \vec{\xi}}{|\vec{\xi}|^2} - \frac{\vec{\xi}}{|\vec{\xi}|} \frac{\vec{\xi} \vec{\xi} : \vec{\nabla} \vec{\xi}}{|\vec{\xi}|^3} \end{aligned} \quad (6.2.7)$$

が導かれる。付録Bで示すように右辺第2項はゼロである。(6.2.7)式を(6.2.5)式に代入すると

$$\frac{\partial u}{\partial t} = - \Gamma_s \vec{\nabla} u \cdot \frac{\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla} \vec{\xi}}{|\vec{\xi}|^2} \quad (6.2.8)$$

書かれる。 $\vec{\xi}$ を $\vec{\nabla} u$, $\vec{\nabla} v$ で表して、ベクトル演算を行った後

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\Gamma_s}{|\vec{\xi}|^2} \vec{\xi} \vec{\xi} : \vec{\nabla} \vec{\nabla} u \quad (6.2.9)$$

が得られる。同様に $v(\vec{r}, t)$ の方程式も求められる。系の分布は十分ランダムであるとして、3章の場合と同様に

$$\langle t_\alpha t_\beta \rangle = \left\langle \frac{\vec{z}_\alpha}{|\vec{z}|} \frac{\vec{z}_\beta}{|\vec{z}|} \right\rangle \approx \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \quad (6.2.10)$$

と近似する。但し t_α, \vec{z}_α はそれぞれ \vec{t}, \vec{z} の α 成分である。(6.2.10) 式を用いると (6.2.9) 式は近似的に拡散方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\Gamma_s}{3} \nabla^2 u \quad (6.2.11)$$

に帰着する。 v についても同様な拡散方程式が成立つ。以上のように、渦系の運動は、ランダムな分布をもつ拡散場 $u(\vec{r}, t)$ と $v(\vec{r}, t)$ の節面の交線の運動として記述できるのである。

系の長さの時間変化を求めよう。系の単位体積あたりの長さは

$$\begin{aligned} L &= \int d\tau \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}(\tau)) \rangle \\ &= \langle |\vec{\nabla} u \times \vec{\nabla} v| \delta(u(\vec{r})) \delta(v(\vec{r})) \rangle \end{aligned} \quad (6.2.12)$$

で与えられる。 $\vec{\nabla} u$ と $\vec{\nabla} v$ のなす角を $\omega(\vec{r})$ とすると、

$$L = \langle |\vec{\nabla} u| |\vec{\nabla} v| |\sin \omega(\vec{r})| \delta(u(\vec{r})) \delta(v(\vec{r})) \rangle \quad (6.2.13)$$

が導かれる。2つの場がランダムであるとき $\omega(\vec{r})$ は $[0, 2\pi]$ で一様分布すると仮定して次のような近似を採用する:

$$L \approx \langle |\sin \omega| \rangle \langle |\vec{\nabla} u| |\vec{\nabla} v| \delta(u(r)) \delta(v(r)) \rangle, \quad (6.2.14)$$

$$\langle |\sin \omega| \rangle \approx \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} |\sin \omega| d\omega = \frac{2}{\pi}. \quad (6.2.15)$$

さらに u と v とが互いに独立に Gauss 分布に従うと仮定すると

$$L = \frac{2}{\pi} [\langle |\vec{\nabla} u| \delta(u(r)) \rangle]^2 \quad (6.2.16)$$

が得られる。右辺 [] 中の u に関する平均は付録 A の (A.10) 式で $d=3$ とすることにより与えられる。それを用いると

$$L = \frac{6}{\pi^3 \Gamma_5} \frac{1}{t} e^{-\gamma_5 t^{d/2}} \quad (6.2.17)$$

が導かれる。但し γ_5 は u, v の平均 $\langle u \rangle = U, \langle v \rangle = V$ と

$\gamma_5 \propto U^2 + V^2$ のように関係する。 $U=0, V=0$ の結果は、才 1 節の次元解析的考察と一致する。界面のときと同様に初期の糸が切れ切れになっている場合には指数関数的収縮が起るものと考えられる。

この理論に基づいて秩序変数の相関関数も計算できるが、それは今後の課題である。

第7章 まとめ

本論文では、臨界温度以下に急冷された体系の秩序化過程の動力学を研究した。それらは、乱雑に分布していた欠陥が消滅していく過程として捉えられた。秩序変数がスカラー量の場合欠陥は界面であり、秩序変数が2次元ベクトル量である場合は渦系である。この2つの体系について第3章と第6章で統計力学的に論じた。

界面の動力学は太田らによって既に研究され、シミュレーションとよく一致する相関関数を導出することに成功していた。われわれは彼らの方法を用いて、彼らが計算していたような初期秩序変数 $M(0)$ がゼロでない場合の動的振舞いを調べた。そして、秩序変数 $M(t)$ とその相関関数 $I(r, t)$ および界面の面積 $A(t)$ の時間変化を、任意の初期値 $M(0)$, $A(0)$ に関して導くことができ、理論に含まれるパラメータを $M(0)$ と $A(0)$ を使って表すことに成功した。

第6章では、3章で用いた理論（u場理論）を応用して、2つの補助場 $u(r, t)$ と $v(r, t)$ を導入することにより渦系の運動を考察した。系の内に働く長距離相互作用を無視して、系が張力だけによって運動するとした場合、 u , v は近似的に拡散方程式に従うことを示し、そのことにより系の長さが t^{-1} で減少することを導いた。この理論を進めて秩序変数の相関関数を導出することは可能であると思われる、今後の課題としたい。

また、補助場を用いて欠陥の位置を表し、その運動を統計的に論ずる方法は広く他の体系にも応用できるものであり、今後の発展が期待される。

第4章では動的 Ising モデルのシミュレーションを実行して、場理論との比較を行い、両者がよく一致することを明らかにした。Monte-Carlo シミュレーションによる時間変化が現実の体系のものと一致するということは理論的に明瞭ではないが、ここでのシミュレーションの結果やこれまでの多くの人々の結果は、それが正しいことを物語っている。実験では実現しにくい初期状態や温度を、シミュレーションでは容易に設定できるので、今後非平衡統計力学の中でも重要な役割を果たすものと思われる。

界面の幾何学的形状と動的振舞との関係については、第5章で考察し、界面が一般にフラクタル次元 D をもつときの時間変化が導かれた。そして、急冷された体系の界面は最初 $d=D$ となり、ということを示されたが、一方 $d \neq D$ の界面は現実性に乏しく、今のところ $d^{-1/2}$ 以外のべきで収縮する界面の存在は期待できない。ここで採用された方法は、自己相似的に発展する様々な体系をモデル化する際に有用であると考えられ、その点にも本章の考察の意義があると思われる。

熱力学的に不安定な状態にある体系が平衡状態へ変化していく非線形非平衡過程の総体的理解に本研究が寄与することを期待する。

附記

本論文の

第3章と第4章の主要な内容は

Hiroyasu Toyoki and Katuya Honda :

Systematic deviation from scaling in the dynamics
of a random interface : Case for a nonzero
initial order parameter,

Phys. Rev. B33 (1986) No.1

に発表した。

第5章の主要な内容は

H. TOYOKI and K. HONDA :

THE MOTION OF INTERFACE AND THE SIMILARITY
DIMENSION, Phys. Lett. III (1985) 367

に発表した。

第6章の内容は未発表の研究であり、近く発表する予定である。

謝 辞

名古屋大学大学院に入学以来、絶えず指導し激励して下さいった中野藤生教授に深く感謝致します。統計物理学の深い理解に根ざした先生の御批判，御討論より得たものは多大でした。また、本論文の原稿をていねいに読まれ多くの助言を下さいました。

本論文の原稿を読まれ、助言を下さった石橋善弘教授と木村初男助教授に感謝致します。

本田勝也博士は、本研究を進めるにあたり日常的に指導して下さいました。また、本研究をはじめる直接のきっかけを与えて下さったのも本田博士です。ここに深く感謝の意を表します。

多くの議論と激励をして下さった工業力学講座の皆様にも感謝致します。

最後に、財団法人・豊田理化学研究所の2年にわたる経済的援助に対し謝意を表します。

付録 A

ここでは、本文中の(3.2.14) ~ (3.2.16) から、 $\{u(\vec{r}, t)\}$ がガウス分布する場合には (3.2.18) ~ (3.2.19) と (3.2.28) ~ (3.2.30) が導かれることを示す。

1) $M(t)$ の導出.

階段関数 $\epsilon(x)$ が

$$\epsilon(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{2}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{\lambda}{\lambda^2 + \epsilon^2} e^{i\lambda x} \quad (A.1)$$

と表されることを用いると、(3.2.14)式は

$$M(t) = \frac{2}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{\lambda}{\lambda^2 + \epsilon^2} \langle e^{i\lambda u(\vec{r}, t)} \rangle \quad (A.2)$$

と書かれる。 $\{u\}$ がガウス分布のとき、 $u(\vec{r}, t) = \delta u(\vec{r}, t) + \bar{u}$ として

$$\langle e^{i\lambda u(\vec{r}, t)} \rangle = e^{i\lambda \bar{u} - \lambda^2 \langle \delta u^2 \rangle / 2} \quad (A.3)$$

が成立つ。これを (A.2) に代入し、 λ についての積分を実行すれば、

$$\begin{aligned}
 M(t) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1) n!} \left[\frac{U}{\sqrt{2 \langle \delta u^2 \rangle}} \right]^{2n+1} \\
 &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \operatorname{erf} \left(\frac{U}{\sqrt{2 \langle \delta u^2 \rangle}} \right)
 \end{aligned} \tag{A.4}$$

が得られる。

2) $A(t)$ の導出

(3.2.15) 式

$$A(t) = \langle (\vec{\nabla} u)^2 \frac{1}{|\vec{\nabla} u|^2} \delta(u) \rangle \tag{A.5}$$

に対して、 $1/|\vec{\nabla} u|$ と $\delta(u)$ に関するフーリエ変換を実行すると

$$A(t) = C_d \int \frac{d^d \vec{q}}{(2\pi)^d} \int \frac{d\lambda}{2\pi} \langle (\vec{\nabla} u)^2 q^{1-d} e^{i\vec{q} \cdot \vec{\nabla} u} e^{i\lambda u} \rangle \tag{A.6}$$

が導かれる。但し

$$C_d = 2^{d-1} \pi^{(d-1)/2} \Gamma\left(\frac{d-1}{2}\right) \tag{A.7}$$

である。 $\langle \vec{\nabla} u u \rangle = 0$ であるから

$$\begin{aligned}
 A(t) &= C_d \int \frac{d^d \vec{q}}{(2\pi)^d} q^{1-d} (-\vec{\nabla}_q^2) \langle e^{i\vec{q} \cdot \vec{\nabla} u} \rangle \\
 &\quad \times \int \frac{d\lambda}{2\pi} \langle e^{i\lambda u} \rangle
 \end{aligned} \tag{A.8}$$

と書かれる。但し $\vec{\nabla}_0^2$ は \vec{r} 空間でのラプラシアンである。
(A.3) 式と

$$\langle e^{i\vec{r}_0 \cdot \vec{\nabla} u} \rangle = e^{-g^2 \langle (\vec{\nabla} u)^2 \rangle / 2d} \quad (\text{A.9})$$

を (A.8) 式に代入して、積分を実行すれば、

$$A(t) = N_d \left(\frac{\langle (\vec{\nabla} u)^2 \rangle}{\langle (\delta u)^2 \rangle} \right)^{1/2} e^{-\frac{v^2}{2\langle (\delta u)^2 \rangle}} \quad (\text{A.10})$$

が導かれる。数係数 N_d は (3.2.21) に定義される。

3) $I(r, t)$ の導出

(A.1) 式を用いると相関関数 (3.2.16) は

$$\begin{aligned} I(r, t) &= \langle \epsilon(u(\vec{r}, t)) \epsilon(u(\vec{0}, t)) \rangle \\ &= \left(\frac{2}{i} \right)^2 \int \frac{d\lambda}{2\pi} \int \frac{d\lambda'}{2\pi} \frac{\lambda}{\lambda^2 + \epsilon^2} \frac{\lambda'}{\lambda'^2 + \epsilon'^2} \\ &\quad \times \langle e^{i\lambda u(\vec{r}, t)} e^{i\lambda' u(\vec{0}, t)} \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

δu についてのガウス平均は

$$\begin{aligned} &\langle e^{i\lambda \delta u(\vec{r}, t)} e^{i\lambda' \delta u(\vec{0}, t)} \rangle \\ &= \exp \left\{ -\frac{1}{4C(0, t)} [C(0, t)^2 \lambda^2 + C(0, t)^2 \lambda'^2 + 2C(0, t)C(r, t)\lambda\lambda'] \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

となる。但し、 $C(r, t)$ は (3.2.13) 式で与えられた δu の二点相関関数である。(A.12) 式を (A.11) 式に代入することにより、

$$I(r, t) = -4 \int \frac{d\lambda}{2\pi} \int \frac{d\lambda'}{2\pi} \frac{\lambda}{\lambda^2 + \epsilon^2} \frac{\lambda'}{\lambda'^2 + \epsilon'^2} \exp\{i(\lambda + \lambda')U\} \\ - \frac{1}{4C(0, t)} [C(0, t)^2 \lambda^2 + C(0, t)^2 \lambda'^2 + 2C(0, t)C(r, t)\lambda\lambda'] \quad (A.13)$$

が得られる。指数関数の冪における $\lambda\lambda'$ の項の部分を展開して整理すると

$$I(r, t) = -4 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{C(r, t)}{2}\right)^n \left[\int \frac{d\lambda}{2\pi} \lambda^{n-1} e^{-\frac{1}{4}C(0, t)\lambda^2 + i\lambda U} \right]^2 \quad (A.14)$$

が導かれる。右辺の $[]$ 中の積分は初等関数では表せないが、

$$\eta_U(t) = 2U^2 / C(0, t) \quad (A.15)$$

の級数のかたちで与えられる。結果は

$$I(r, t) = -\frac{2}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} A_n(\eta_U) \eta^n, \\ A_n(\eta) = \begin{cases} \frac{1}{n!} \left[\sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2m+n-1)!!}{(2m+1)!} (-\eta)^{m+\frac{1}{2}} \right]^2 & : n \text{ が偶数} \\ \frac{1}{n!} \left[\sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2m+n-2)!!}{(2m)!} (-\eta)^m \right]^2 & : n \text{ が奇数} \end{cases} \quad (A.16)$$

但し、

$$y = C(r,t)/C(0,t) \quad (A.17)$$

である。 $U=0$ のときは $\gamma=0$ であるから n が奇数で $m=0$ の項だけがゼロではなく、

$$\begin{aligned} I(r,t) &= \frac{2}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n-1)!!}{(2n+1)(2n)!!} y^{2n+1} \\ &= \frac{2}{\pi} \operatorname{Arcsin} y \end{aligned} \quad (A.18)$$

となる。

付録 B 曲線の微分幾何

3次元中の曲線を考える。曲線上の座標を τ 、その位置ベクトルを $\vec{r}(\tau)$ とし、 τ は $|d\vec{r}/d\tau|=1$ となるようにとる。曲線の接線方向、法線方向、従法線方向の単位ベクトルをそれぞれ $\vec{e}(\tau)$, $\vec{n}(\tau)$, $\vec{b}(\tau)$ と書く。3つのベクトルに対して Frenet-Serret の公式と呼ばれる次のような関係が成立つ：

$$\begin{pmatrix} \vec{e}' \\ \vec{n}' \\ \vec{b}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & K & 0 \\ -K & 0 & T \\ 0 & -T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{e} \\ \vec{n} \\ \vec{b} \end{pmatrix} \quad (\text{B.1})$$

但し、 $'$ は τ についての微分を表すものとする。 K , T はそれぞれ曲率、捩率である。曲線の長さは

$$L = \int |d\vec{r}(\tau)/d\tau| d\tau \quad (\text{B.2})$$

で与えられる。曲線の微小変形

$$\hat{\vec{r}} = \vec{r} + \epsilon f \vec{n} + \epsilon g \vec{b} \quad (\text{B.3})$$

に対する L の変化を考えよう。(B.3)を(B.2)に用いることにより、

$$\begin{aligned}\hat{L} &= \int |\vec{r}' + \epsilon f \vec{n}' + \epsilon g \vec{b}' + \epsilon f' \vec{n} + \epsilon g' \vec{b}| d\tau \\ &= \int \left[|\vec{r}'| + \frac{\epsilon}{|\vec{r}'|} (f \vec{r}' \cdot \vec{n}' + g \vec{r}' \cdot \vec{b}') \right] d\tau + O(\epsilon^2)\end{aligned}$$

となり、 \vec{e} の定義

$$\vec{e} = \vec{r}(\tau) / |\vec{r}(\tau)| \quad (\text{B.4})$$

を用いると

$$\delta L = \hat{L} - L = \epsilon \int (f \vec{e} \cdot \vec{n}' + g \vec{e} \cdot \vec{b}') d\tau + O(\epsilon^2)$$

が導かれる。(B.1) より

$$\delta L = -\epsilon \int f K d\tau + O(\epsilon^2) \quad (\text{B.5})$$

を得る。微小変化 ϵf を $v(\tau) d\tau$ とおけば (2.40) 式が導かれる。

曲率 $K(\tau)$ と撓率 $T(\tau)$ は系の上でのみ定義された量であるが、系の近傍では系の方向にだけ変化する場の量と考えることにより \vec{e} , \vec{n} などの空間微分として表わすことができる。そのような量に対する空間微分は

$$\vec{\nabla} = \vec{e} \frac{\partial}{\partial \tau} \quad (\text{B.6})$$

と書くことができる。(B.1) と (B.6) より

$$\left. \begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{e} = \vec{\nabla} \cdot \vec{b} = 0, \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{n} = -K \\ \vec{\nabla} \times \vec{b} = T \vec{b}, \quad \vec{\nabla} \times \vec{n} = -T \vec{n} \end{aligned} \right\} \quad (\text{B.7})$$

などの関係が導かれる。

本文 (6.2.7) 式の第 2 項がゼロであることは $\vec{\nabla} \cdot \vec{t} = 0$ より次のように示される。

$$\begin{aligned}
 0 = \vec{\nabla} \cdot \vec{t} &= \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\vec{\nabla} u \times \vec{\nabla} v}{|\vec{\nabla} u \times \vec{\nabla} v|} \right) \\
 &= \frac{\vec{\nabla} v \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} u) - \vec{\nabla} u \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} v)}{|\vec{\nabla} u \times \vec{\nabla} v|} \\
 &\quad - \frac{(\vec{\nabla} u \times \vec{\nabla} v)(\vec{\nabla} u \times \vec{\nabla} v) : \vec{\nabla} (\vec{\nabla} u \times \vec{\nabla} v)}{|\vec{\nabla} u \times \vec{\nabla} v|^3}
 \end{aligned}$$

右辺 2 行目の $\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} u$ などは恒等的にゼロであるから

$$\vec{\xi} \vec{\xi} : \vec{\nabla} \vec{\xi} = 0, \quad (B.8)$$

$$\vec{\xi} = \vec{\nabla} u \times \vec{\nabla} v \quad (B.9)$$

が得られる。

文献

- 1) J.W. Cahn and J.E. Hilliard: J. Chem. Phys. 28 (1958) 258;
31 (1959) 688.
- 2) a) J.D. Gunton, M. San Miguel and P.S. Sahni: "The Dynamics of First-order Phase Transitions", Phase Transition and Critical Phenomena Vol.8 ed. by C. Domb and J.L. Lebowitz (Academic Proess, 1983)
- b) J.D. Gunton and M. Droz: "Introduction to the Theory of Metastable and Unstable States", Lecture Note in Physics, 183 (Springer Verlag, 1983).
- c) 好村滋洋: "一次相転移に伴う動的スケーリング"則, 固体物理 19 (1984) 711.
- d) 川崎恭治: "相転移のダイナミクス", 物性研究 43 (1985) 181.
- 3) P.C. Hohenberg and B.I. Halperin: Rev. Mod. Phys. 49 (1977) 435 とその引用文献.
- 4) G.F. Mazenko and M. Zannetti: Phys. Rev. B32 (1985) 4565.
- 5) A.A. Belavin and A.M. Polyakov: JETP Lett. 22 (1975) 245.
- 6) 岩崎洋一: 日本物理学会誌 36 (1981) 793 とその引用文献.
- 7) T. Nagai and K. Kawasaki: Physica 120A (1983) 587.
K. Kawasaki and T. Nagai: Physica 121A (1983) 175.
- 8) 臨界点近傍から急冷された体系についての考察として
S. Ohta, T. Ohta, K. Kawasaki and K. Sekimoto: preprint, 1985. かあ3.
- 9) M. Suzuki: Adv. Chem. Phys. 46 (1981) 195.
- 10) K. Binder and D. Stauffer: Phys. Rev. Lett. 33 (1974) 1006.
- 11) K. Binder and D. Stauffer: Adv. Phys. 25 (1976) 343.
- 12) K. Binder: Phys. Rev. B15 (1977) 4425.

- 13) J.S. Langer, M. Bar-on and H.D. Miller: Phys. Rev. A11
(1975) 1417.
- 14) C. Billotet and K. Binder: B32 (1979) 195.
- 15) S.M. Allen and J.W. Cahn: Acta Metal. 27 (1979) 1085.
- 16) K. Kawasaki and T. Ohta: Prog. Theor. Phys. 67 (1982) 147.
- 17) R. Bausch, V. Dohm, K. Janssen and R.K. Zia: Phys. Rev.
Lett. 47 (1981) 1837.
- 18) K. Kawasaki and T. Ohta: Physica 118A (1983) 175.
- 19) I.M. Lifshitz and V.V. Slyozov: J. Phys. Chem. Solids 19
(1961) 35.
- 20) M. Tokuyama and K. Kawasaki: Physica A123 (1984) 386.
- 21) E.D. Siggia: Phys. Rev. A20 (1979) 595,
とその引用文献。
- 22) A.B. Bortz, M.H. Kalos, J.L. Lebowitz and M.A. Zendejas:
Phys. Rev. B10 (1974) 535.
- 23) J. Marro, A.B. Bortz, M.H. Kalos and J.L. Lebowitz: Phys.
Rev. B12 (1975) 2000.
- 24) M. Rao, M.H. Kalos, J. Marro and J.L. Lebowitz: Phys. Rev.
B13 (1976) 4328.
- 25) A. Sur, J.L. Lebowitz, J. Marro and M.H. Kalos: Phys. Rev.
B15 (1977) 3014.
- 26) J.L. Lebowitz, J. Marro and M.H. Kalos: Acta. Metal 30
(1982) 297.
- 27) 小林昭と: 曲線と曲面の微分幾何 (裳華房, 1977)
- 28) E.M. Lifshitz and L.P. Pitaevskii: Statistical Physics
Part 2 (Pergamon Press, 1980) translated by J.B. Sykes and
M.J. Kearsley.

- 29) K. Kawasaki: *Physica* 119A (1983) 17.
- 30) K. Kawasaki: *Ann. Phys.* 160 (1985) 420.
- 31) 砂川重信: 理論電磁気学 (紀伊国屋, 1973) 才5章
- 32) H.E. Hall and W.F. Vinen: *Proc. Roy. Soc. London* A238 (1956) 204.
- 33) 文献 9) の 8 節 に引用されている文献
- 34) T. Ohta, D. Jasnow and K. Kawasaki: *Phys. Rev. Lett.* 49 (1982) 1223.
- 35) T. Ohta: *Ann. Phys.* 158 (1984) 31.
- 36) H. Toyoki and K. Honda: *Phys. Rev.* B33 (1986) No.1.
- 37) M.K. Phani, J.L. Lebowitz, M. Kalos and O. Penrose: *Phys. Rev. Lett.* 45 (1980) 366.
- 38) P.S. Sahni, G. Dee, J.D. Gunton, M. Phani, J.L. Lebowitz and M. Kalos: *Phys. Rev.* B24 (1981) 410.
- 39) K. Kaski, M.C. Yalabik and J.D. Gunton: *Phys. Rev.* B28 (1983) 5263.
- 40) M. Grant and J.D. Gunton: *Phys. Rev.* B28 (1983) 5496.
- 41) E. Ben-Jacob, N. Goldenfeld, J.S. Langer and G. Schön: *Phys. Rev.* A29 (1984) 330.
- 42) R.C. Brower, D.A. Kessler, J. Koplik and H. Levine: *Phys. Rev.* A29 (1984) 1335.
- 43) C. Weatherburn: *Differential Geometry of Three Dimensions* (Cambridge Univ. Press, 1927).
- 44) O.G. Mouritsen: *Computer Studies of Phase Transitions and Critical Phenomena* (Springer-Verlag, 1984).
- 45) F.C. Zhang, O.T. Valls and G.F. Mazenko: *Phys. Rev.* B31 (1985) 1579.

- 46) H. Toyoki and K. Honda: Phys. Lett. 111 (1985) 367.
- 47) B. Mandelbrot: The fractal geometry of nature (Freeman, San Francisco, 1982).