報告番号	※甲 第 1853 号

主論文の要旨

題名

秩序化過程の動力学

— 界面と渦糸の運動と統計 —

氏名 豐木博泰

主論文の要旨

報告番号	※甲第　　号	氏名	豊木博泰

最近、相転移を示す体系が無秩序相である高温から臨界温度以下に急冷された後に示す秩序化過程に関心が集まっている。本研究は、秩序変数がスカラー量である体系と二次元ベクトルである体系について理論的に議論する。前者に相当する物理系としては、秩序-無秩序転移をおこす合金系や一軸性の強誘電体などが考えられ、後者の例としては^4Heの超流動相などがあげられる。急冷の度合が大きいとき、それらの体系の動的振舞は欠陥の運動として捉えられる。上の二つの体系における欠陥はそれぞれ界面と渦糸である。急冷された直後には、欠陥が空間全体に複雑で密に分布し、時間とともにそれらが消失していくが、秩序化過程はこのような過程で考えられる。

基礎的な運動方程式である局所的秩序変数に関するTDGLW方程式(Time-dependent Ginzburg-Landau-Wilson方程式)に基づいて、欠陥が従う方程式を導くことができる。川崎らの研究によると、界面は、法線方向速度vが曲率Kに比例するという方程式に従って運動する:

$$v = \Gamma' K . \qquad (1)$$

しかし、界面の運動方程式は、強い非線形性のために解くことができる例が稀であるばかりでなく、統計的考察も困難である。そこで次のような近似法を用いる。仮想的なスカラー場$u(\vec{r},t)$を導入し、その節面($u=0$を満たす曲面)が界面を表すものとする。節面が方程式(1)に従って動くように$u(\vec{r},t)$の運動方程式を定めると、それ

主論文の要旨

報告番号	※甲第　　号	氏名	豊木博泰

は、

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Gamma'(\nabla^2 - \vec{n}\vec{n}:\vec{\nabla}\vec{\nabla})u \tag{2}$$

と表される。但し，界面の法線方向の単位ベクトル$\vec{n}$は$\vec{n}=\vec{\nabla}u/|\vec{\nabla}u|$を通じてu場と関係する。界面は複雑であるので、$\vec{n}$の成分$n_\alpha$, n_βの界面の配置に関する平均を$\langle n_\alpha n_\beta\rangle \approx \delta_{\alpha\beta}/d$（dは空間次元）と近似できるものとすると(2)式は

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Gamma \nabla^2 u \quad , \Gamma = \Gamma'(1-1/d) \tag{3}$$

と簡単化される。界面が複雑に入り組んでいるために、u場の確率分布関数は正規分布であると解釈される。巨視的諸量――秩序変数$M(t)$，界面の面積$A(t)$，二点相関関数$I(r,t)$――は$u(\vec{r},t)$を用いて

$$M(t) = \langle \epsilon(u(\vec{r},t))\rangle$$
$$A(t) = \langle |\vec{\nabla}u|\,\delta(u(\vec{r},t))\rangle$$
$$I(r,t) = \langle \epsilon(u(\vec{r},t))\,\epsilon(u(\vec{0},t))\rangle$$

と表される。但し，$\epsilon(x)=\mathrm{sgn}(x)$である。$\langle\cdots\rangle$はuの確率分布についての平均を表すが，ガウス平均は厳密に実行できて，

$$M(t) \propto \mathrm{erf}(\chi(t)) \tag{4}$$
$$A(t) \propto (t+\alpha)^{-1/2} \exp(-\chi^2(t)) \tag{5}$$
$$\chi(t) \propto U(t+\alpha)^{d/4} \tag{6}$$

が導かれる。但し，$U=\langle u(\vec{r},t)\rangle$であり，$\alpha$は$u(\vec{r},t)$の初期の相関距離を表すパラメータである。$U$と$\alpha$は初期

値
M(0)とA(0)を用いて表すことができる。M(0)≪1のとき

$$\alpha \propto [A(0)]^{-2}\ ,\quad v \propto M(0)[A(0)]^{\alpha/2} \qquad (7)$$

が成立つ。二点相関関数 $I(r,t)$は簡単な関数では与えられないが、$x(t)$と $y(r,t) = \exp[-r^2/l(t)^2]$ ($l(t) \propto t^{1/2}$) の二重級数のかたちに書かれる。以上のように、巨視的な量がその初期値を係数として含むかたちで求められる。

u場理論と呼ばれるこの理論の創始者である太田らは、$v=0$ についてだけ研究したが、$v \neq 0$ の場合に拡張することによってu場の物理的意味を明らかにすることが可能になった。

界面のモデルを格子化するとIsingスピンモデルが得られる。Isingスピンモデルを臨界温度以下に急冷したときの動的振舞を計算機実験によって調べ、u場理論の結果と比較する。Isingモデルのハミルトニアンは、
$\mathcal{H} = -J\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j$ によって与えられる。スピン変数σ_iは±1の値をとるものとする。格子は正方格子とし、最近接スピンにだけ相互作用が働くと考える。各スピンは恒温槽からの熱揺動力によって反転することが可能であり、全体として熱平衡状態へ移行していく。このような過程を計算機実験で実現させる方法として、代表的なMonte-Carlo法（MC法）を採用する。MC法は以下の手順で行われる。

i) 高温の無秩序状態に対応するように、擬似乱数を用いてスピンの初期配列を設定する。

ii) 擬似乱数を用いて格子点 i を選び、平衡状態では詳細釣り合いが成立つことに基づいて決められた遷移確率

主論文の要旨

報告番号	※甲第　　　号	氏名	豊木博泰

によりσ_iを反転させる。

iii) ii)の試行を全格子数にあたるN回くり返すことを単位時間とする。

このようにして得られた時刻tにおけるスピン配列$\{\sigma_i(t)\}$に対する秩序変数と界面の面積をそれぞれ$M(t)=\sum_i \sigma_i(t)$, $A(t)=-\sum_{\langle ij\rangle}(\sigma_i(t)\sigma_j(t)-1)/2$によって計算する。2次元および3次元の体系について計算機実験を実行し、$M(t)$, $A(t)$とも、U場理論が予測する時間依存性と一致することを示す。この一致は、(4)〜(7)式で表されているように、任意パラメータを用いることなく得られることを強調しておく。$M(0)=0$の場合の計算機実験はSahniらによってすでに行われ、理論とよく一致する相関関数を得ているが、初期状態の秩序変数$M(0)$に依存する$M(t)$や$A(t)$の時間変化は本研究によってはじめて調べられたものである。

上述の結果は界面の運動の二つの特徴より定性的に理解される。特徴の一つは、方程式(1)が示すように、曲率が大きい程界面は速く縮むということる。他の一つは、複雑に入り組んでいる界面、つまり正の曲率の部分と負の曲率の部分がつながっている界面では、曲率が均質化する方向に変化が起るということである。この二つの事実から、空間内に一つのつながった界面が折りたたまれて存在する場合と、同程度の面積をもちながらいくつかに切れて存在する場合とでは、明らかに後者の方が速く収縮が起る。$M(0)=0$の場合の界面では前者の様相が体系全体にわたって現れていると考えられる。一方、$M(0)>0$であると、秩序変数が負のクラスターがいくつかに分裂して、秩序変数が正の「海」に浮かぶという状況になる。

報告番号	※甲第　　号	氏名	豊木博泰

この違いが(5)式における指数関数となって現れる。それに伴って$M(t)$は(4)式のように時間とともに増大するのである。こうした秩序変数のパターン変化は計算機実験によっても確めることができる。

同様な方法を用いて次に渦糸の運動を論ずる。TDGLW方程式より導かれる渦糸の運動方程式には二種類の力が現れる。一つは界面と同様、曲率に比例する法線方向の力であり，他の一つは，各々の糸片の間に働く$1/r^2$（rは糸片間の距離）に比例する力である。両者の大小関係は物質系の性質によって様々な場合が考えられるが，ここでは，u場理論の応用が可能である前者の力が支配的な場合を考察する。3次元中の糸を考える。二つのスカラー場$u(\vec{r},t)$と$v(\vec{r},t)$を導入し，両方の節面の交線によって渦糸の位置を表す。そして，この交線が渦糸の運動方程式に従って動くようにuとvの運動方程式を与える。いくつかの微分幾何学上の公式を用いることにより，uとvは近似的に(3)式と同様な拡散方程式に従うことが導かれる。渦糸の長さは$L=\langle|\nabla u\times\nabla v|\,\delta(u(\vec{r}))\,\delta(v(\vec{r}))\rangle$で与えられるが，$u$と$v$が独立にガウス分布に従うと仮定することにより，$L\propto t^{-1}e^{-\gamma t^{d/2}}$が得られる。但し$\gamma\propto\langle u\rangle^2+\langle v\rangle^2$である。体系全体につながった糸が存在する場合，即ち$\langle u\rangle=\langle v\rangle=0$の場合は$L\propto t^{-1}$となるが，いくつかの渦輪に分かれている場合は全体として指数関数的に縮む。この理論を進めて，秩序変数の相関関数を計算することは可能であるが，まだ実行されていない。しかし、渦糸間の長距離相互作用を考慮に入れることは

主論文の要旨

報告番号	※甲第　　　号	氏名	豊木博泰

依然として難問のまま残されている。

以上で述べてきたような、仮想的な場を導入することによって欠陥の運動を論ずる方法は、他の体系にも広く応用できる可能性があり、今後の発展が期待される。

最後に、界面の運動とその幾何学的形状との関連について考察する。界面の運動方程式に基づいてその運動を直接計算することは困難であるので、幾何学的形状についての情報を含み、かつ界面の運動方程式と類似な運動法則をもつ離散的モデルを考える。界面が自己相似的に発展することをはじめから措定し、そのことより界面がべき乗的に収縮することを示す。

空間の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る。最初に完全にフラクタル図形であった界面が、時間とともに簡単化していくモデルを考える。その際、図形を構成している最小の要素の長さが界面の平均的な曲率の逆数に対応すると見なす。その仮定から、連続体界面の運動方程式に対応する離散的方程式が導かれる。界面の法線方向速度が曲率のβ乗に比例し、初期状態の界面のフラクタル次元がDであるとき、$A(t) \propto t^{(d-D-1)/(1+\beta)}$が得られる。ここで、$d=D$, $\beta=1$とおけば$A(t) \propto t^{-1/2}$となり、u場理論で展開した$M(0)=0$の場合の結果と一致する。$d=D$は初期の界面が空間を埋めつくしていることを意味するので、この一致は直観的に理解できる事柄である。u場理論や計算機実験で現れた$A(t)$の指数関数的振舞を幾何学的に理解することも興味ある問題であるがまだ考察されていない。

主論文の要旨

報告番号	※甲第　　　　号	氏名	豊木博泰

本研究では、急冷された二種類の体系の動力学を考察したが、これは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熱力学の一部をなす。本研究は、まだ端初にあるこの研究分野を総体的に理解するために寄与するものと思われる。