

博士論文

熱伝導下でのイジングモデルにおける界面運動

2019年1月23日

物理学・宇宙物理学専攻(物理学第一分野) 非平衡物理学研究室

増本 雄亮

Abstract

Heat transfers through materials from a high-temperature part to a low-temperature part. This phenomenon, heat conduction, is ubiquitously seen. In most cases, the heat current is proportional to the negative temperature gradient and its proportionality constant, thermal conductivity, does not depend on the system size in macroscopic systems. It is called Fourier's law of heat conduction.

There are various studies on heat conduction in the literature. From the viewpoint of statistical mechanics, derivation of Fourier's law has long been a problem. Surprisingly, it is now clarified that the thermal conductivity diverges with the system size in low-dimensional lattice systems. It is called abnormal heat conduction, which is observed in experiments using carbon nanotubes. Another current topic is heat conduction carried by spin excitations. Although carriers of heat are usually phonons and electrons, heat currents carried by spin excitations were found in some materials and models. Characteristics of spin thermal conductivity are currently being investigated.

In spite of intensive studies on heat conduction, the role of interface motion in heat transport is not yet studied well enough. The presence of an interface may enhance or reduce heat conduction. Conversely, heat current may affect the motion of an interface. Only recently, the magnetic domain wall motion in temperature gradient was examined for a nanowire, where the movement of an interface toward the higher-temperature side was observed. Such a movement of an interface was reproduced in numerical simulations using the stochastic Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) equation. Because the random force in the stochastic LLG equation needs prescribed temperature values, however, it is not suited for simulations of heat conduction, where local temperature values are determined as the result of heat conduction.

In this thesis, we examine the relationship between the interface motion and heat transport using the two- and three-dimensional Ising models, because they are the simplest examples that can simultaneously simulate interface motion and heat conduction. To do that, some time evolution rule must be introduced. There are a number of such rules proposed in the literature. The most famous one is Creutz cellular automaton, where we add kinetic energy term to each site in addition to the usual interaction terms. A spin can flip if and only if it can do without changing total energy. Although Creutz cellular automata successfully reproduces equilibrium behavior of the Ising model including the phase transition, it has a problem that the spins freeze and do not relax to equilibrium at a temperature

considerably lower than the critical temperature. To circumvent the problem, we devise a new dynamical rule (KSC dynamics) for bulk spins. For the three-dimensional systems, another time evolution rule called the microcanonical (MC) dynamics is also employed. In the MC dynamics, kinetic energy terms are added to each bond. In either case, spins near the both ends in the direction of heat flow are in contact with heat reservoirs. Those spins are evolved by Glauber dynamics. Furthermore, spins at either end in the direction vertical to the interface are fixed in opposite directions to each other. Thus, the moving interface is realized with heat conduction if temperatures of the both reservoirs are below the critical temperature.

In Sec. 3, we show our results for the two-dimensional Ising system. First we find that the thermal conductivity is larger in the system without an interface than that with an interface. It is explained by a property of the KSC dynamics. Next we address the diffusive motion of an interface in the systems with and without heat transfer. We focus on the power-law behavior for the power spectrum of a time sequence of spins generated by diffusive motion of an interface, which was originally derived for one-dimensional systems with a nonequilibrium phase transition like the asymmetric simple exclusion process. It is clarified that the interface motion is a diffusion process with a drift force toward the high-temperature side when heat transfers through the system. Effects of the width of the interface are also discussed.

In Sec. 4, we present the results for the three-dimensional Ising system. We investigate the relationship among the diffusive motion of an interface, heat conduction, and the roughening transition. We find that the temperature dependence for the diffusion constant of the interface shows a crossover near the roughening transition temperature T_R . Careful analysis shows that the crossover temperature is close to T_R at equilibrium and deviates from it in proportion to the difference between the reservoir temperatures. Moreover, the transition temperature estimated from the interface width agrees with the crossover temperature within error bars. We discuss the possibility that heat conduction causes a shift of the roughening transition temperature.

目次

1	イントロダクション	6
1.1	熱伝導現象	6
1.1.1	格子系の熱伝導	6
1.1.2	スピン系の熱伝導	7
1.1.3	イジングモデルの熱伝導	9
1.1.4	熱伝導と界面ダイナミクスの関係	12
1.1.5	熱伝導下での界面の性質	14
1.2	イジングモデルにおける界面の性質	15
1.2.1	バルク部分に熱浴をつける場合	15
1.2.2	SOS モデル	15
1.2.3	ラフニング転移	16
1.3	本論文の目的	16
1.4	本論文の構成及び内容	17
2	時間発展ダイナミクス	19
2.1	低温での Creutz ダイナミクスの問題点	19
2.2	KQ ダイナミクス	19
2.3	KSC ダイナミクス	20
2.4	マイクロカノニカルダイナミクス	20
3	2次元イジングモデルにおける拡散的な界面ダイナミクスの特徴的なパワースペクトル	22
3.1	導入	22
3.2	系の設定	22
3.3	熱伝導率	25
3.4	界面位置の確率分布	29
3.5	2次元イジングモデルでの界面の拡散運動によって誘起されたパワースペクトルの性質	30
3.5.1	パワースペクトルと界面の拡散運動の関係	30
3.5.2	Glauber ダイナミクスでの平衡系の結果	32
3.5.3	KSC ダイナミクスでの平衡系の結果	36
3.5.4	KSC ダイナミクスでの非平衡系の結果	38
3.6	まとめと結論	41
4	3次元イジングモデルでの界面の拡散と熱伝導	43
4.1	導入	43
4.2	系の設定	44
4.3	熱伝導率	44
4.4	拡散係数	47
4.5	まとめと展望	50
5	まとめと展望	53

5.1	各章のまとめ	53
5.2	今後の課題および展望	54

1 イントロダクション

1.1 熱伝導現象

ある物質に関して境界に異なる温度の熱浴を接触させると、熱エネルギーは高温側から低温側に輸送される。この現象を熱伝導とよばれ、この現象は身の周りで頻繁に見受けられる。熱伝導に関する経験則としては、以下のようなフーリエ則がよく知られている。

$$\mathbf{J} = -\kappa \nabla T \quad (1.1)$$

J は熱流、 T は温度、 κ は熱伝導率である。このフーリエ則は、熱流は温度勾配に比例し、高温側から低温側へ流れるということを示している。熱伝導率 κ は熱伝導のしやすさの指標であり、それが大きい物質は熱が流れやすい物質であるといえる。フーリエ則が成立するときは熱伝導率は系のサイズには依存しない。しかし、温度には依存していてもよい。この法則は 1800 年代にはフーリエなどによって提案されており、様々な物質で成立することが実験によって確認されている [1]。

フーリエ則が成立するとき、以下に説明するように温度に関する拡散方程式が成立する。局所エネルギー E に関する連続の式より、熱流とエネルギーには以下のような関係がある。

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (1.2)$$

フーリエ則が成立する場合は、上の連続の式に式 (1.1) を代入する事によって、以下のような拡散方程式が得られる。ここでは、熱伝導率が温度に依存しない場合について考えている。

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\kappa}{C} \nabla^2 T \quad (1.3)$$

なお、 $C = \partial E / \partial T$ は比熱であり、 $\frac{\kappa}{C}$ は熱拡散定数である。この拡散方程式は熱伝導方程式とよばれる。フーリエ則が成立するような場合はこの方程式を解析することで、温度分布の時間変化など様々な熱伝導現象の性質を理解することができる。フーリエ則が成立するような熱伝導現象は正常熱伝導とよばれる。しかし、全ての熱伝導現象がフーリエ則を満たすわけではない。熱伝導率が以下のように熱伝導方向のサイズ L に依存し、熱力学極限で発散する場合は異常熱伝導とよばれ、カーボンナノチューブ等などで異常熱伝導が確認されている [2]。

$$\kappa \sim L^\alpha \quad (0 < \alpha \leq 1) \quad (1.4)$$

1.1.1 格子系の熱伝導

経験則であるフーリエ則を格子モデルによって説明しようという研究は数多く存在する。具体的には図 1.1 のように、調和振動子などの相互作用を有する粒子の格子モデルの両端に異なる温度のランジュバン熱浴等 [1, 3] の熱浴をつける系を考える。熱伝導率は熱流 J 、熱浴の温度差 ΔT 、熱伝導方向のサイズ N を用いて、以下のように計算する。

$$\kappa = \frac{JN}{\Delta T} \quad (1.5)$$

まず最もシンプルな一次元の調和振動子モデル [4] の場合の結果を紹介する。この系は解析的に温度プロファイルや熱流等を求めることができ、温度プロファイルが温度勾配が形成

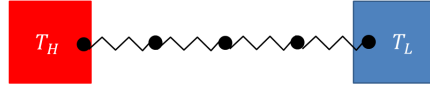


図 1.1: 格子モデルによる熱伝導システムの模式図。調和振動子のような相互作用で連結されている粒子の格子の両端に、異なる温度のランジュバン熱浴などの熱浴を接触させる系を考える。

されず一定になることや、熱伝導率が以下のようにシステムサイズに比例するという結果が得られる。

$$\kappa \sim N \quad (1.6)$$

このような熱伝導は弾道的 (バリスティック) な熱伝導であるといわれる。この場合、サイズが N を無限大にすると (熱力学極限を取ると)、熱伝導率が発散する。また一次元調和振動子の拡張として、3 次もしくは 4 次の項の非線形項を加えた Fermi-Pasta-Ulam(FPU) モデルに関しても熱伝導率は調べられている [5–10]。この場合は、調和振動子の場合とは異なり、温度勾配は形成される。しかし熱伝導率は以下のようなサイズ依存性を持ち、異常熱伝導であることが確認されている。

$$\kappa \sim N^{1/3} \quad (1.7)$$

以上から分かるように 1 次元系ではフーリエ則を説明することはできない。また、2 次元系の FPU モデルも以下のような熱流方向のサイズ N_x 依存性を持ち、異常熱伝導になることが確かめられている [11]。

$$\kappa \sim N_x^{0.22} \quad (1.8)$$

対して、3 次元の FPU モデルでは、熱伝導率がサイズに依存せず、フーリエ則が成立していることが数値的に明らかにされている [11]。以上の結果から、高次元であることや非線形性の存在がフーリエ則の成立には重要であると考えられている。

1.1.2 スピン系の熱伝導

近年、 Sr_2CuO_3 などの化合物において、電子スピンによる大きな熱伝導への寄与が確認されている [12, 13]。 Sr_2CuO_3 はある一方向のスピンネットワーク内の最近接スピン間相互作用が非常に大きい、スピンネットワーク間の相互作用が小さいため、1 次元の反強磁性のハイゼンベルグモデル (XXX モデル) としてみなすことができる。その結晶のすべての軸方向の熱伝導率を実験によって計測すると、図 1.2 のイメージ図のように、スピン鎖に平行な軸の方向の場合 (図 1.2(a)) は、垂直な軸の方向の場合 (図 1.2(b)) よりも大きくなり、垂直な軸の方向の場合には見られないもう一つのピークを持つ。スピン鎖に垂直な軸方向では、熱伝導はフォノンによる寄与のみであるが、平行な軸方向ではフォノンによる寄与に加

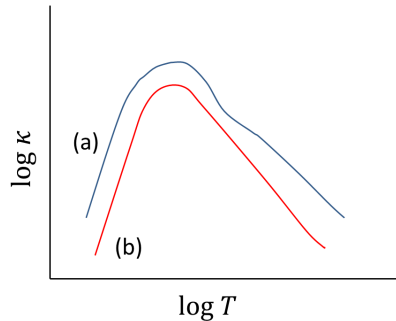


図 1.2: Sr_2CuO_3 の熱伝導率のイメージ図。(a) はスピン鎖に平行な軸の方向の場合の熱伝導率で、(b) はスピン鎖に垂直な軸の方向の場合の熱伝導率である。

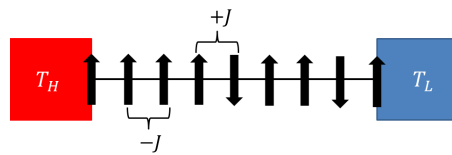


図 1.3: スピンモデルによる熱伝導システムの模式図。スピンモデルでは相互作用エネルギー J で最近接のスピンと相互作用するような場合を考える。スピンの向きが揃っている時の相互作用エネルギーは $-J$ 、逆向きの場合は J となる。両端のスピンは異なる温度の熱浴に接触している。

え、スピンによる寄与が考えられる。したがって、結晶は等方的でありフォノンによる熱伝導は軸によらないため、スピン鎖に平行な軸の方向の熱伝導率と垂直な方向の熱伝導率の差分としてスピンによる熱伝導率が確認されたことになる。このような実験で確認されるスピンによる熱伝導現象を理解するために、量子スピンモデルを用いた熱伝導の研究も活発に行われている。図 1.3 のようにスピンモデルでは相互作用エネルギー J とすると、スピンの向きが揃っているときは $-J$ のエネルギーを持ち、反対の向きの際は $+J$ のエネルギーを持つ。そして、スピンがフリップすることによって、そのエネルギーが伝導していく。スピンモデルとしてよく知られている 1 次元のハイゼンベルグモデル (XXX モデルや XXZ モデルなど) の熱伝導は古くから研究されており [14, 15]、熱伝導は弾道的であるということが解析的に明らかにされている。また数値計算による研究も行われるようになってきている [16]。z

方向に磁場をかけた場合の 1 次元 XX,XY モデルの温度プロファイルは、温度勾配が形成されず熱伝導が弾道的であることが確認されている。対して、 z 方向に磁場をかけた場合の 1 次元 XXX, XXZ モデルなどでは温度勾配が形成されるということ等が確認されている。しかしながら、この様なケースでフーリエ則が成立しているか否かを格子モデルのように数値計算で判断することはできない。フーリエ則の成立を判断するには、熱伝導のシステムサイズ N の依存性を十分大きな N に関して調べる必要があるが、量子系では大きなサイズの数値計算は困難である。したがって、数値計算によってフーリエ則の成立を議論することは非常に困難である。

T. Kawamata ら [13] は前述の化合物 Sr_2CuO_3 に関して、スピンの寄与する熱伝導率の実験結果からスピノンの平均自由行程 (散乱することなく進むことができる距離) l_{spinon} を見積っている。さらに磁化率の実験結果からスピン欠陥間の平均のスピン鎖の長さ L_{imp} を見積もっている。その結果、それらが低温ではほぼ等しくなるということが明らかにされている。この結果は、低温では熱が散乱されず弾道的に輸送しているということの意味している。この弾道的な熱伝導は、解析的に説明されている 1 次元の反強磁性のハイゼンベルグモデル (XXX モデル) の性質に他ならない。実際の物質は、不純物やスピン欠陥、熱伝導方向以外のスピン鎖との相互作用の影響で弾道性が保持されていない可能性があるが、低温の場合は保持されているのである。この弾道性のおかげで、この物質は低温でもスピンによる熱伝導率の値が大きくなる。この弾道性を活かし、スピン欠陥等を減らすことで更なる熱伝導性のよい物質の開発などが考えられている [17]。

1.1.3 イジングモデルの熱伝導

量子スピンモデルのみならず、古典スピンモデルであるイジングモデル等でも熱伝導現象は考えられている。イジングモデルは以下のような最近接相互作用のみを考慮するスピンモデルである。

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (1.9)$$

σ_i はサイト i でのスピんで、 $+1$ または -1 の値をとり、 $J(> 0)$ は最近接相互作用のエネルギー、 $\langle i,j \rangle$ は最近接での和を表している。このイジングモデルは強磁性体などのモデルとして考えられており、1 次元系では相転移は起こらないが、2 次元系以上では強磁性体から常磁性体への相転移を説明することができる。2 次元系のイジングモデルの外部磁場がない場合に関しては、Onsager など [18–23] によって厳密解が求められている。ボルツマン定数を 1 とすると、2 次元系では転移温度は $T_c = \frac{2J}{\log(1+\sqrt{2})}$ であり、自発磁化は以下のような温度依存性があることが示されている。

$$m(T) = [1 - \sinh(2J/T)^{-4}]^{1/8} \quad (T < T_c) \quad (1.10)$$

$$m(T) = 0 \quad (T > T_c) \quad (1.11)$$

2 次元系の外部磁場がある場合や 3 次元系の厳密解は求められていない。しかし数値計算等によって、3 次元系では $T_c \sim 4.51J$ で相転移が起こることが明らかになっている [28]。

このイジングモデル自体は時間発展のダイナミクスを持ってはいないので、時間発展を考えるには何らかのダイナミクスが必要となる。平衡系のイジングモデルの時間発展に用いられるダイナミクスとして、Glauber ダイナミクスはとて有名である [25, 26]。Glauber ダイナミクスは以下のような遷移確率 w でスピンをフリップするという、詳細釣り合いを満たす確率的な時間発展則である。

$$w(\sigma_i \rightarrow -\sigma_i) = \frac{\exp(\frac{J}{T}(-\sigma_i \sum_{nn} \sigma_{nn}))}{\exp(\frac{J}{T}(-\sigma_i \sum_{nn} \sigma_{nn})) + \exp(\frac{J}{T}(\sigma_i \sum_{nn} \sigma_{nn}))} \quad (1.12)$$

なお、 \sum_{nn} は最近接スピンの和を表し、 T は温度である。Glauber ダイナミクスと同様に詳細釣り合いを満たす確率的な時間発展ダイナミクスとしては、メトロポリス法 [27] や Kawasaki ダイナミクス [28] などがある。Glauber ダイナミクスは上式から分かるように、温度 T をパラメタとして導入し、確率的に時間発展させる。熱伝導現象を考える際には両端の熱浴のみで温度は設定され、バルクの温度は時間発展の結果として定まるべきである。したがって、Glauber ダイナミクスは熱伝導現象のシミュレーションにはふさわしくない。同様の理由で、メトロポリス法や Kawasaki ダイナミクスなども熱伝導のシミュレーションにはふさわしくない。熱伝導現象を考える際には、何らかの局所エネルギー保存をみたく、温度 T をパラメタとして含まない時間発展則が必要である。

Creutz によって発案された Creutz ダイナミクス [29] は熱伝導現象をシミュレーションする際に用いることができる決定論的なエネルギー保存時間発展則の一例である。このダイナミクスでは 2 次元系では以下のようなハミルトニアンを考える [29, 30]。

$$H = - \sum_{i,j} (\sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1}) + \sum_{i,j} 4\tilde{\sigma}_{i,j}, \quad (1.13)$$

$\sigma_{i,j} \in \{-1, +1\}$ はサイト (i, j) におけるイジングスピンであり、 $\tilde{\sigma}_{i,j} \in \{0, 1, 2, 3\}$ は“モーメント”と呼ばれる量である。第一項は通常イジング相互作用であり、第二項は“運動エネルギー項”と呼ばれる量である。スピンは、スピンのフリップした際の磁性のエネルギーの変化分を運動エネルギー項が賄える場合にのみフリップできるというルールで時間発展させる。具体的には以下のような関係式を満たす場合である。

$$0 \leq \tilde{\sigma}_{i,j} - \frac{1}{2} \sigma_{i,j} (\sigma_{i-1,j} + \sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j+1}) \leq 3 \quad (1.14)$$

上式を満たす場合、スピン $\sigma_{i,j}$ は反転し、モーメント $\tilde{\sigma}_{i,j}$ は $\tilde{\sigma}'_{i,j} = \tilde{\sigma}_{i,j} - \frac{1}{2} \sigma_{i,j} (\sigma_{i-1,j} + \sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j+1})$ となる。このダイナミクスによる時間発展の方法として、 $i+j$ の和の偶奇に分けて時間発展させるチェッカーボード法がある [25]。この方法では $i+j$ が偶数となるサイトによる格子と $i+j$ が奇数となるサイトによる格子に分け、偶数のサイトの格子を一斉に時間発展させた後に、奇数のサイトの格子を一斉に時間発展させる。このチェッカーボードで発展させる場合は、ダイナミクスは完全に決定論的である。また、ランダムにサイトを選んで時間発展させてもよい。

この Creutz ダイナミクスでは局所的な温度を定義することができる。モーメント $\tilde{\sigma}_{i,j}$ の分布は局所平衡が成立しているとき、以下のようなカノニカル分布に従うと考えられる。

$$P(\tilde{\sigma}_{i,j}) \sim \exp(-4\beta\tilde{\sigma}_{i,j}) \quad (1.15)$$

数値計算によって得られた分布を上式でフィッティングし、そのフィッティングパラメタを逆温度として見積もることで、局所温度を定義することができる。実際、このダイナミクスによって時間発展させた場合、モーメントの分布はカノニカル分布になり、局所温度を定義できるということが数値的に確認されている [30]。

さらに、Creutz ダイナミクスを簡略化したダイナミクスである Q2R ダイナミクスも、決定論的なエネルギー保存時間発展則として用いられている [30, 31]。このダイナミクスは Creutz ダイナミクスの運動エネルギー項を考慮せず、更新を考えるスピンの最近接スピンの和が 0 である場合にフリップできるというルールで時間発展する。このダイナミクスでは運動エネルギー項はないので、Creutz ダイナミクスとは異なりモーメントによる局所温度は定義できない。

[30] では、以上の 2 つの時間発展ダイナミクスを用いた 2 次元イジングモデルにおける熱伝導現象について考えられている。図 1.4 のように、2 次元イジングモデル格子の両端に

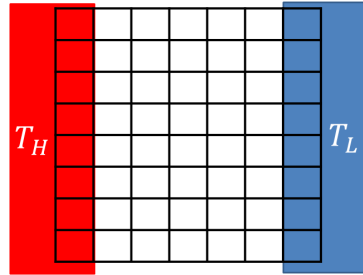


図 1.4: 2次元イジングモデルの熱伝導システム。両端に異なる温度の熱浴を接触させる。熱浴に接したスピンは Glauber ダイナミクスで時間発展する。

Glauber ダイナミクスで時間発展させる異なる温度の熱浴をつけ、バルク部分を Creutz ダイナミクスおよび Q2R ダイナミクスを用いてチェッカーボード法で時間発展させると、高温側から低温側へ熱流が流れる熱伝導のシステムが形成される。[30]の著者である K. Saito らは主に転移点付近に関して熱伝導率を調べ、フーリエ則が成立することや転移点で有限の熱伝導率を持つことなどを数値的に明らかにしている。また、Creutz ダイナミクスに基づいた Green-Kubo 公式による熱伝導率の導出も行い、数値計算の結果をよく再現する事も確かめられている。しかし、転移温度以下では熱伝導率が急激に減少し、熱伝導が見られなくなる。このような現象は、Creutz ダイナミクスが低温でフリーズしてしまう性質によって起こると考えられる。この Creutz ダイナミクスが抱える低温の問題の詳細は 2 章で説明する。

1.1.4 熱伝導と界面ダイナミクスの関係

これまで説明したように熱伝導に関連する研究は実験的、理論的に数多く行われてきた。しかしこれらの研究の殆どは単一の相のみを持つ系に関するものである。現実では二つの相が共存するような系が数多く存在するものの、そのような系での熱伝導現象の理解は十分であるとは言い難い。特に、2つの相の境界である界面が熱伝導に与える影響、例えば熱伝導を促進するの否かなどは興味深い問題である。また、熱伝導現象は界面のダイナミクスにどのような影響を与えるのかという問題もとても興味深い。

実際、熱伝導下における界面の運動は、図 1.5 のような逆向きのスピンの境界である磁壁 (Domain Wall) に関する実験などで確認できる [32]。[32] の実験では、イットリウム鉄ガーネット (YIG, Yttrium Iron Garnet) のフィルムに z 軸方向に磁場をかけ、 x 軸方向に温度勾配をつける実験系を考えている。この実験では、 z 軸上向きと下向きの磁壁が形成され、それが熱流の方向とは逆に磁壁は高温の方へ動くということを確認している。

このような温度勾配下の磁壁の運動は、以下のような磁場中でのスピンの歳差運動を表す Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) 方程式等によって数値的に理解されている [33–36]。

$$\dot{\mathbf{S}}_i = -\frac{\gamma}{(1+\lambda^2)\mu_s} (\mathbf{S}_i \times \mathbf{H}_i + \lambda \mathbf{S}_i \times (\mathbf{S}_i \times \mathbf{H}_i)) \quad (1.16)$$

\mathbf{S}_i はスピンの単位ベクトル、 \mathbf{H}_i は有効場、 γ は磁気回転比、 λ は減衰定数、 μ_s はモーメントの大きさである。この方程式の第 1 項は有効場を軸とした歳差運動、第 2 項は有効場への緩和を表している。有効場は以下のように与えられる。

$$\mathbf{H}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i} + \zeta_i(t) \quad (1.17)$$

$\zeta_i(t)$ はあらかじめ設定した温度勾配をもつ温度プロファイルに基づくノイズ、 \mathcal{H} はスピンのハミルトニアンであり、以下のようなものを考えればよい。

$$\mathcal{H} = -\sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j + \sum_i (d_z (S_i^z)^2 + d_x (S_i^x)^2) \quad (d_z > d_x > 0) \quad (1.18)$$

この設定で両端の境界を逆向きの z 方向のスピンのとり LLG 方程式を数値的に解くと、図 1.6 のイメージ図のように、 z 軸上向きと下向きのスピンによる磁壁が形成され、高温側へ動くという振る舞いが再現される。高温側に動く理由は以下のように説明することができる。同じ設定温度の界面が形成されない場合 (境界条件のスピンの平行な場合) と界面が形成される場合 (境界条件のスピンを逆平行にした場合) に関して、温度一様の平衡系で LLG 方程式によって時間発展させることで、それぞれの内部エネルギーを数値的に計算する。その内部エネルギーの差 ΔE が界面エネルギーである。その界面エネルギーを様々な温度について計算し、以下のような関係を用いて界面自由エネルギー ΔF を計算する。 β は逆温度である。

$$\Delta F(\beta) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta E(\beta') d\beta' \quad (1.19)$$

実際には、キュリー温度以上では $\Delta E = 0$ であるのでキュリー温度から積分すればよい。その結果、界面自由エネルギー $\Delta F(T)$ は温度に関する減少関数であり、キュリー点で 0 となることが数値的に確認された [33]。したがって、温度勾配がある場合は界面は自由エネルギーが小さくなるように高温側に動くと考えられる。

しかしながら、以上の LLG 方程式に関する数値的な議論は、あらかじめ設定した温度勾配に基づいてノイズを入れているため、温度勾配下の界面のダイナミクスについて議論して

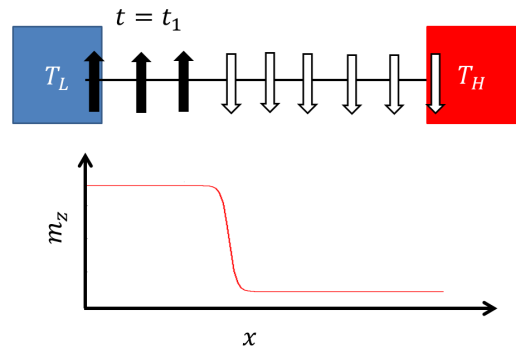


図 1.5: 磁壁のイメージ図。この図の場合は低温側が上向きスピンの、高温側が下向きスピンの揃っており、その境界を磁壁とよぶ。下図は磁化のプロファイルであり、急激に変化しているところが磁壁である。

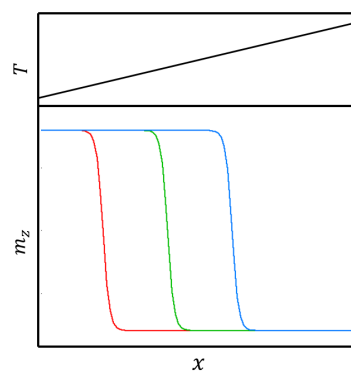


図 1.6: LLG 方程式で時間発展させた場合の磁壁の運動のイメージ図。赤 緑 青の順で時間発展している。上図のような線形な温度プロファイルを設定し、その温度に基づいたノイズが加えられている。

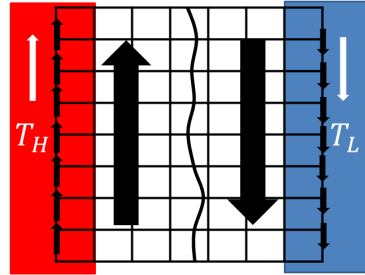


図 1.7: 2次元イジングモデルの界面が存在する熱伝導システム。両端に異なる温度の熱浴を接触させる。熱浴に接したスピンは Glauber ダイナミクスで時間発展する。さらに格子の両端を + スピンと - スピンで固定させることで、界面が形成される。

いるに過ぎず、熱伝導現象までを議論しているわけではない。熱伝導現象と界面のダイナミクスを同時に議論できる一番シンプルなスピンモデルとしてはイジングモデルがあり、本研究ではイジングモデルを用いて熱伝導と界面ダイナミクスの関係について考えていく。

1.1.5 熱伝導下での界面の性質

K.Saito らの研究で考えられてた系の設定を拡張し、図 1.7 のように熱浴の両端を逆向きの磁場をかけると、+ スピンと - スピンの界面が存在する熱伝導システムが形成される。S. Yukawa らはこの設定で、バルク部分を Creutz ダイナミクスで時間発展させた場合の熱伝導現象と界面のダイナミクスの関係を転移温度付近に関して数値的に調べている [37]。この研究では、両端の磁場の方向を同じ向きにした界面が形成されない場合と、磁場の方向を逆向きにした界面が形成される場合の両方に関して、熱伝導率を数値的に計算している。その結果、前述の磁壁の実験と同様に界面は高温側に動きやすく、熱伝導率は界面が存在する場合の方が大きくなるということを数値的に明らかにしている。このケースでは界面は熱伝導を促進しているということになる。しかし界面がない場合と同様に、この研究では低温での Creutz ダイナミクスの問題のために、転移温度より十分小さい温度範囲までは調べられてはいない。本研究では、この研究で調べられていない低温まで議論している。

1.2 イジングモデルにおける界面の性質

熱伝導のような温度勾配がある系ではなく、温度一様の系におけるイジングモデルの界面の動的または静的な性質に関する研究は数多く存在する。ここでは、そのような系の先行研究を紹介し、界面のモデルとしてどのような現象と関連があるのかという事を説明する。

1.2.1 バルク部分に熱浴をつける場合

ここでは 2 次元系について考える。転移温度以下において、 x 軸方向の両端に互いに逆向きの磁場をかけ、バルク部分を Glauber ダイナミクス [26] で時間発展させる場合を考える。この系は、バルク部分全体が熱浴に接触している場合に対応する。まず初めに、バルク部分に磁場をかける場合を考える。この場合、界面は結晶成長のように揺らぎながら一方向に動く。この界面のダイナミクスは以下のような Kardar-Parisi-Zhang(KPZ) 方程式 [38] で記述されるということが分かっている [39–41]。

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h(\mathbf{x}, t) + \frac{\lambda}{2} (\nabla h(\mathbf{x}, t))^2 + \eta(\mathbf{x}, t) \quad (1.20)$$

$h(\mathbf{x})$ は界面の高さで、右辺の第 1 項は表される界面をなめらかにさせようとする表面張力、第 2 項は界面に垂直な方向に成長させようとする力、第 3 項は以下のような性質を持つノイズを表している。

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \rangle = 0 \quad (1.21)$$

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t') \rangle = 2D \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t') \quad (1.22)$$

この KPZ 方程式は様々な実験などで確認される成長する界面のダイナミクスを記述する事が知られており [42]、バルクに磁場をかけた場合のイジングモデルも実際の界面成長現象と関係しているといえる。また、バルク部分に磁場をかけない場合に関しては、界面は拡散的な運動を見せる。この場合は、界面の幅が $t^{1/4}$ で時間発展することが数値的に明らかになっている [43]。KPZ 方程式で記述されるような界面のダイナミクスの場合、界面の幅は $t^{1/3}$ で時間発展することが示されている [42]。界面が成長する場合とそうでない場合では界面のゆらぎの性質が異なるのである。

1.2.2 SOS モデル

界面を形成するようなイジングモデルの設定において、低温の場合は界面から離れたところでは、ほとんどクラスターが形成されなくなる。これは式 (1.23) のような異方性のある 2 次元 Ising モデルで $J_x \rightarrow \infty$ の極限を取った場合に対応する。

$$H = - \sum_{i,j} (J_x \sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} + J_y \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1}) \quad (1.23)$$

この極限をとると、ハミルトニアンは以下のように書き換えられる。

$$H = 2J \sum_j |h_j - h_{j+1}| \quad (1.24)$$

ただし、この h_i は離散変数で界面の高さを表す。このモデルは solid-on-solid(SOS) モデルと呼ばれ、低温でのイジングモデルとの関連が考えられている [39,44]。[44] では、イジング

モデルの + スピンを 1、- スピンを 0 とした場合の密度プロファイル $\rho(x)$ の幅 W を数値計算によって求め、SOS モデルの場合と比較している。なお W は以下のように定義される。

$$W^2 = 2 \frac{\int dx (x - \frac{L_x}{2})^2 \frac{d\rho}{dx}}{\int dx \frac{d\rho}{dx}} \quad (1.25)$$

対して、SOS モデルでの密度プロファイルは以下のように求まる事が分かっている [45, 46]。

$$\rho(x) - \frac{1}{2} = \frac{x^* + \frac{1}{2} \sin(2x^*)}{\pi} \quad (1.26)$$

ただし、 $x^* = \frac{\pi}{2} (\frac{2x}{L_x} - 1)$ である。以上から、SOS モデルでの密度プロファイルの幅 W_{SOS} は以下のように求まる。

$$W_{\text{SOS}} = (L_x + 1) \left(\frac{\pi^2 - 6}{6\pi^2} \right)^{1/2} = (L_x + 1) 0.2556... \quad (1.27)$$

この値は低温での 2 次元 Ising 界面の場合の W の時の値とほぼ一致し、イジングモデルの界面の静的な性質は SOS モデルで説明できる。このように、スピンモデルであるイジングモデルの界面の性質を SOS モデルのような界面の位置のみのモデルなどとの関連を考えて議論することがある。

1.2.3 ラフニング転移

界面を伴う 3 次元系のシステムでは、2 次元系では見られないラフニング転移の存在が知られている。ラフニング転移は ^4He の結晶などで実験的に確認される現象であり、丸みのある結晶形からフラットなファセットにラフニング転移温度 T_R で転移するという現象である [39, 47]。ラフニング転移は、前述の SOS モデルや離散ガウスモデル、そして本研究で考えているイジングモデルなどでも数値的に確認されている [39]。3 次元のイジングモデルでは、ラフニング転移温度 $T_R \sim 0.542T_c$ でラフニング転移温度が起こることが分かっている [48, 49]。ラフニング転移温度 T_R より温度が高い場合は、界面の幅が $\log L$ (界面の一辺の長さ L) に比例し、熱力学極限 ($L \rightarrow \infty$) を取ると界面の幅が発散する。対して、ラフニング転移温度 T_R より温度が低い場合は、 L が十分大きいと界面の幅は一定となり、熱力学極限をとっても発散しない。本研究では、このラフニング転移が界面のダイナミクスや熱伝導現象にどのような影響を及ぼすかについても数値的に調べている。

1.3 本論文の目的

本論文の目的は、2 次元および 3 次元イジングモデルについて界面のダイナミクスと熱伝導の性質を数値的に調べることによって、界面の存在が及ぼす熱伝導への影響と熱伝導現象が及ぼす界面ダイナミクスへの影響を理解することである。具体的には、界面の存在が熱伝導を促進するのか否かという事と、界面ダイナミクスが平衡系に比べどのように変化するかという事を数値計算によって明らかにする。

1.4 本論文の構成及び内容

各章では以下のような内容について述べられている。

2章では、イジングモデルの熱伝導現象を考える際に用いる時間発展則の詳細についてレビューしている。先に述べたように、熱伝導系では Glauber ダイナミクスのような温度をパラメータとして導入する確率的時間発展則ではなく、Creutz ダイナミクスや Q2R のような決定論的なエネルギー保存時間発展則を用いる必要がある。しかし、それらのダイナミクスは転移温度より十分低温の場合には用いることができない。2章ではまず初めに、その不具合が起こるメカニズムおよび実際の数値計算で確認される問題について述べている。次に、その問題を解決するために提案されたダイナミクスの先行研究を紹介する。次に、我々がその解決方法を参考にして考案した KSC ダイナミクスと呼ぶ新しい時間発展のダイナミクスの詳細を紹介している。この KSC ダイナミクスは本研究の 2 次元および 3 次元の数値計算で用いている。最後に、結合定数 $J_{i,j}$ が一定でない系、スピングラス系、ネットワーク系など幅広く用いることができ、かつ低温でも問題が起こらないダイナミクスとして考案されているマイクロカノニカル (MC) ダイナミクスについて紹介する。この MC ダイナミクスは KSC ダイナミクスより拡散係数が大きいという性質があるため、本研究では拡散係数がとても小さくなる 3 次元系の数値計算で用いている。

3章では 2 次元系の数値計算結果について紹介している。この章で述べられている結果は主に以下の 3 つである。

1 つ目は KSC ダイナミクスを用いた場合の熱伝導現象に関する数値計算結果である。KSC ダイナミクスを用いた場合は低温でも数値計算を行うことができ、界面の有無に関わらずフーリエ則が成立し、界面がない場合の方が界面がある場合よりも熱伝導率が大きくなるということを明らかにしている。すなわちこの系では、界面は熱伝導を抑制しているということになる。この結果は Creutz ダイナミクス単独の場合と逆である。

2 つ目の界面位置の分布の数値計算結果である。KSC ダイナミクスで時間発展させた場合も S. Yukawa が研究した Creutz ダイナミクス単独の場合と同様に、高温側の存在確率が大きくなる。また、両端の熱浴の温度差が小さい場合の位置分布は指数分布になり、それが解析的に説明できる事を確認している。

3 つ目は時系列パワースペクトルを用いた熱伝導系の界面ダイナミクスの解析結果である。まず 1 次元系における界面のダイナミクスとパワースペクトルの関係に関する先行研究を紹介している。その先行研究では 1 次元の界面がランダムウォークする場合に関して、あるサイトでの密度の時系列のパワースペクトルを計算すると -1.5 乗のべき則を見せるということが示されており、3章ではその事実を 2 次元イジングモデルに拡張して解析している。温度一様の平衡系の 2 次元系のコラム平均のスピンの時系列のパワースペクトルの結果を確認すると、低周波数の狭い領域では -1.5 乗則を見せるものの、高周波数領域では -1.5 乗則から大きくずれる。そこで我々は界面が有限の幅を持つ場合の時系列パワースペクトルを解析的に求め、数値計算結果と比較した。その結果、 -1.5 乗則からのずれを解析解が再現することを確認した。以上の事から、平衡系では界面のダイナミクスはランダムウォークであることが明らかになった。さらに、温度差をつけた非平衡系を議論するために、幅を持つ界面がドリフトのあるランダムウォークで動くときの時系列パワースペクトルを解析解を導出した。それを非平衡系の数値計算結果と比較すると、よく再現できていることを確認できる。したがって、非平衡系では高温側にドリフトのあるランダムウォークしているという

ことになる。その高温側へのドリフト力は熱浴の温度差に比例し、ドリフト力が非平衡の効果を表しているということが明らかになった。この高温側に界面が動きやすくなるという性質は、前述の磁壁の実験結果と一致している。

4章では3次元系の結果を紹介する。3次元系では前述のようにラフニング転移が起こるので、それが熱伝導や界面ダイナミクスに及ぼす影響について調べられている。この章で述べられている結果は主に以下の2つである。

1つ目は、熱伝導率の数値計算結果である。本章では2次元系の場合とは異なり、KSCダイナミクスとMCダイナミクスの両方を用いて数値計算を行っている。さらに、界面が熱流に垂直な場合だけでなく界面が平行な場合についても調べている。KSCダイナミクスで時間発展した場合は、界面の方向によらず、界面がある場合よりもない場合の方が熱伝導率が大きくなる。この結果は2次元の場合と同じである。しかし界面が熱流に垂直な場合のみ、ラフニング転移温度以下で熱伝導が急激に減少し、ラフニング転移の影響が確認できた。このような減少は、2次元系では確認されず、ラフニング転移の影響であると考えられる。MCダイナミクスで時間発展させた場合は、界面の方向によらず、界面がある場合の方がない場合より熱伝導率が大きくなる。この結果はKSCダイナミクスとは逆である。また、KSCダイナミクスで見られたようなラフニング転移温度以下で熱伝導の減少は起きない。

2つ目は、拡散係数の数値計算結果である。ここでは、界面が熱流に平行な場合のみ考えている。3次元ではダイナミクスによらず、平衡系ではラフニング転移温度以下で急激な拡散係数の減少が確認される。また、非平衡系に拡張すると平衡系と同様にあるクロスオーバー温度を境に拡散係数が急激に減少する。そのクロスオーバー温度は温度差に比例して増加する。平衡系ではクロスオーバー温度がラフニング転移温度とほぼ等しいため、非平衡系のラフニング転移温度も T_X とほぼ等しくなり、温度差に比例して増加するのではないかと予想できる。そこで、非平衡系の界面の幅を計算し非平衡ラフニング転移温度を見積もると、クロスオーバー温度とほぼ等しくなり温度差に比例して増加することが確認できた。

5章では結論と今後の展望について述べる。

2 時間発展ダイナミクス

本研究では、イジングモデルにおける熱伝導現象を調べる。バルク部分の時間発展には、Glauber ダイナミクスのような確率的な時間発展則ではなく、1章で紹介した Creutz ダイナミクスや Q2R ダイナミクスのような決定論的な時間発展則を用いる。そのような、バルク部分のスピンの時間発展のために用いるダイナミクスとその性質についてこの章では述べる。

2.1 低温での Creutz ダイナミクスの問題点

1章で紹介したようにイジングモデルの熱伝導を考える際には、Creutz ダイナミクスおよび Q2R ダイナミクスなどの決定論的なエネルギー保存時間発展則が用いられる。しかし、それらのダイナミクスを用いた熱伝導に関する研究は、転移温度以下では転移温度付近のみの場合に限られてきた。それは、それらのダイナミクスが共通して低温での問題を抱えているためである。強磁性の相互作用を持つイジングモデルでは、転移温度以下の低温ではほとんどのスピンは同じ方向を向く。したがって、スピンのフリップした際のエネルギーの変化量は大きくなるため、フリップするにはモーメントが大きい値をもつ必要がある。しかし、低温ではモーメントは小さい値をもつ確率が非常に大きく、フリップすることが非常に困難であるため、スピンはフリーズして動かなくなってしまう。そのスピンのフリーズが以下のような様々な問題を引き起こす。低温での問題を示す数値シミュレーション結果の詳細は3章で紹介するが、低温では十分長いシミュレーション時間を要しても、等しい両端の熱浴温度に緩和しきらないことや、界面が一定時間停滞し、満遍なく拡散しないなどの問題が確認されている [51]。転移温度から十分離れた低温での熱伝導現象を考えるには、これらの低温の問題を解決するような時間発展則が必要になってくる。そのようなダイナミクスを以下では紹介していく。

2.2 KQ ダイナミクス

前述の Creutz ダイナミクスの低温での有限のシミュレーション時間内に緩和しない等の問題は、ランダムにサイトを選び時間発展させる場合の Q2R ダイナミクスでも確認されている [50]。[50] では、Q2R ダイナミクスは局所温度を定義できないため、温度プロファイルではなくエネルギープロファイルの数値計算結果が示されている。両端の設定温度が低温の場合は、初期条件に強く依存し、設定温度に対応するエネルギーにシミュレーション時間以内で緩和しないことが確認されている。この問題を数値的に確認した [50] の著者の M. Casartelli らは低温の問題を解決するために、Q2R ダイナミクスに Kadanoff-Swift (KS) ダイナミクスを組み合わせた KQ ダイナミクスを提案した。KS ダイナミクスの時間発展のルールは、ある次最近接の2つのスピンに関し、それらを互いに交換してもエネルギーが変化しない場合にのみ交換できるというものである。KQ ダイナミクスで時間発展させる場合は、ランダムにサイトもしくは一組の次最近接のスピンを選択し、それぞれに対応して Q2R ダイナミクスもしくは KS ダイナミクスで動かす。KS ダイナミクスによる磁最近接相互作用はハミルトニアンには含まれず、ダイナミクスとして相互作用するだけである。この KQ ダイナミクス時間発展させると、Q2R ダイナミクス単独では緩和しきらなかったような低温の場合でもシミュレーション時間内で緩和することが確認されている。彼らはこの時間発

展ダイナミクスを用い、低温でもフーリエ則が成立することや、低温を含めた広い温度範囲に関して熱拡散係数を計算し、転移点付近で最小値を持つことなどを数値的に明らかにしている。

2.3 KSC ダイナミクス

我々は Casartelli らの KS ダイナミクスを用いる低温の問題の解決手法を Creutz ダイナミクスに適用し、このダイナミクスを Kadanoff-Swift-Creutz(KSC) ダイナミクスと呼ぶことにした [51]。このダイナミクスは KQ ダイナミクスとは異なり、モーメントの分布により Creutz ダイナミクスと同様の方法で局所温度を定義できる。具体的な時間発展のステップは以下のようなものである。

1. Creutz ダイナミクスか KS ダイナミクスかをランダムに選ぶ。
2. 前者の場合はランダムに一つのサイトを選び、後者の場合はランダムに一組の次最近接のスピンを選び、それぞれのダイナミクスのルールに従って時間発展させる。
3. 1 と 2 をサイト数回 (2 次元では $L_x L_y$ 回、3 次元では $L_x L_y L_z$) だけ繰り返す。
4. 熱浴に接したスピンを Glauber ダイナミクスによって時間発展させる。
5. 1 から 4 までを繰り返す。その一連のステップを単位時間とする。

このダイナミクスを用いて時間発展をさせると、Creutz ダイナミクス単独で起こる前述の低温での緩和の問題や、界面の停滞といった問題が解決する。低温の問題が解決する事を示すシミュレーション結果は 3 章で紹介する。

本研究では主にこのダイナミクスを用いて数値計算を行う。また、このダイナミクスを用いた際のフーリエ則の成立や熱伝導率の議論などについては 3 章で議論する。

2.4 ミクロカノニカルダイナミクス

Creutz ダイナミクスなどの低温の問題を、KS ダイナミクスを用いずに解決する方法として、ミクロカノニカルダイナミクスも発案されている [52]。KQ ダイナミクスや KSC ダイナミクスで用いられた KS ダイナミクスは、結合定数 $J_{i,j}$ が一定の場合かつ正方格子の場合にのみを想定したダイナミクスであるため、結合定数 $J_{i,j}$ が一定でない系、スピングラス系、ネットワーク系などでは用いることができない。ミクロカノニカルダイナミクスは本来、そのような系でも用いることができるダイナミクスとして発案されたダイナミクスである。このダイナミクスで動かした場合、4 章で説明するように前述の KSC ダイナミクスよりも界面の拡散係数が大きくなり、約 2 倍の拡散係数を持つ [53]。以上のようにこのダイナミクスは KSC ダイナミクスに比べ界面が拡散しやすいので、本研究では拡散係数がとても小さくなる 3 次元系のシミュレーションで用いる。

このダイナミクスでは、以下のように Creutz ダイナミクスの運動エネルギー項を各サイト毎ではなく、ボンド毎に拡張したハミルトニアンを考えることになる。

$$H = - \sum_{i \sim j} J_{i,j} \sigma_i \sigma_j + \sum_{i \sim j} \tilde{E}_{i,j} \quad (2.1)$$

$i \sim j$ はサイト i とサイト j のボンドであり、 $J_{i,j}$ は相互作用エネルギー、 $E_{i,j}$ はボンドの運動エネルギーである。Creutz ダイナミクスではあるサイトのスピンのフリップのみを考えていたが、このダイナミクスではボンドの 2 つのスピンのフリップを考える。また、Creutz

ダイナミクスではモーメント $\tilde{\sigma}_{i,j}$ は整数値 0、1、2、3 の値しか取らなかったが、このボンドのエネルギー $E_{i,j}$ は整数値である必要はなく、 $E_{i,j} \geq 0$ をみたす値であればよい。

具体的には以下のようなステップで時間発展させればよい。

1. ボンド $i \sim j$ をランダムに選ぶ。
2. そのボンドのスピンの組の 4 通りのフリップ候補をランダムに選ぶ。
3. その際の磁性エネルギー変化分 ΔE を計算し、その変化分を運動エネルギー $E_{i,j}$ が賄えるか否かを確認する。すなわち、 $E_{i,j} - \Delta E \geq 0$ を満たすかを確認する。
4. 変化分を賄える場合のみ、スピンをフリップし、それに伴い運動エネルギーも更新する。
5. 1 から 4 までをサイト数の回数だけ繰り返す。
6. 熱浴を Glauber ダイナミクスなどの確率的時間発展則で時間発展させる。
7. 1 から 6 までを繰り返す。その一連のステップを単位時間とする。

このダイナミクスでは 1 つのステップで 2 つのスピンを更新するため、低温でも問題が起こらないと考えられる。また、Creutz ダイナミクスの場合と同様に運動エネルギー項 $E_{i,j}$ の分布から局所温度を定義することができる。E. Agliari らはこのダイナミクスを用いて、2 次元イジングモデルの結合定数 $J_{i,j} \in [1 - \epsilon, 1 + \epsilon]$ がランダムである場合について、熱伝導現象の数値計算を行い、定常状態に緩和することや結合定数のディスオーダーの存在によって熱伝導率が減少すること等が明らかにした。本研究ではディスオーダーが存在する場合は考えず、 $J_{i,j} = 1$ の場合のみを考え、4 章で議論する 3 次元系の数値計算の場合のみに、このダイナミクスを用いる。この場合、ボンドの運動エネルギーは $E_{i,j} = 4n_{i,j}$ ($n_{i,j}$ は 0 以上の整数) とすれば良い。

3 2次元イジングモデルにおける拡散的な界面ダイナミクスの特徴的なパワースペクトル

3.1 導入

2つの相の間の界面の動的そして静的な性質は、相秩序、結晶またはデンドライトの成長、表面張力勾配によって駆動される自己推進液滴の運動など様々な物理現象との関連において研究されてきた [54]。その例の一つとして強磁性の相互作用をもつ2次元のイジングモデルがある。転移温度以下で、左右の境界に逆向きの磁場をかけると、図 3.1 のように y 軸方向に界面が現れる。バルクに磁場をかけない場合は界面は拡散運動をする。しかしバルクに磁場をかける場合は、界面は一方向に動く。この運動は KPZ 方程式で記述されることが知られている [39]。

実際、界面の拡散的な運動は、1次元のシステムでも見られる [55]。平衡系の1次元のシステムにおいて相転移は起こらないが、非対称単純排他過程 (the asymmetric simple exclusion process, ASEP) のような非平衡系のモデルでは、1次相転移が起こる。そして、その1次相転移線上で2相が共存し、それらの相の境界として界面ができる。[56] では、その界面の拡散運動の性質が、 $-3/2$ の特徴的なべき則を持ち、その係数が拡散係数、2相の密度の差、システムサイズによって決まるパワースペクトルによって捉えられるということが明らかにされている。

この章では、界面運動を調べるためにその方法を2次元のイジングモデルに適用させる。特に、私たちは界面の幅とパワースペクトルの間の関係について議論する。さらに、システムの境界が異なる温度をもつ熱浴に接触している場合には、熱伝導現象によって高温側へのドリフト力が発生するということを明らかにした。その結果、S. Yukawa ら [37] によって報告されていたように、高温側での界面の存在確率が大きくなる。

そのような非平衡系のシステムを考える場合、パラメタとして温度が必要である Glauber ダイナミクスの使用は適切ではない。これまで非平衡系を考える際には、Creutz ダイナミクスや Q2R ダイナミクスのような決定論的エネルギー保存ダイナミクスが用いられてきた [29, 30]。しかし、それらのダイナミクスは低温でフリーズし、長い時間経過しても界面がほとんど動かなくなる。そのため、私たちは低温での拡散性を回復するための新しいダイナミクスとして、2章で説明した KSC ダイナミクスを提案した。本章ではこのダイナミクスを用いた数値計算結果について考えていく。

本章の残りの部分は以下のように編成されている。3.2 では、本研究で考えるシステムの設定について説明する。3.3 では、界面がある場合とない場合の熱伝導の数値計算の結果が示されている。どちらの場合も熱伝導率は見積もられている。3.4 章では、界面の位置分布の計算結果を説明する。3.5 が本章のメインパートであり、パワースペクトルにおけるべき則と界面の拡散運動の間の関係をレビューし、それを平衡もしくは非平衡定常状態におけるイジングモデルに適用する。3.6 ではまとめと結論を述べる。

3.2 系の設定

2章で説明したように、これまで用いられてきた Creutz ダイナミクスは低温での問題を抱えているため、転移温度から十分離れた低温でのシミュレーションには用いることができない。図 3.2 は、両端の熱浴の温度が等しく $T = 1.5$ である場合で Creutz ダイナミクスで

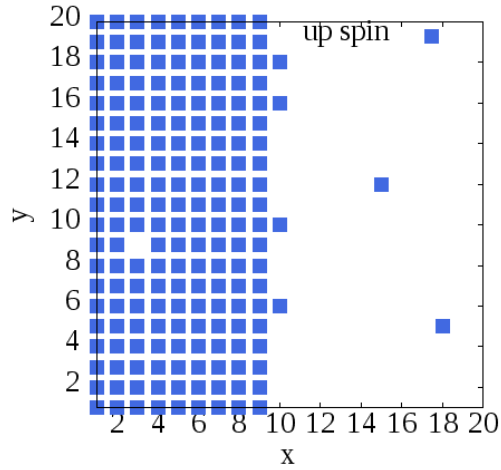


図 3.1: 2次元イジングモデルの界面のスナップショット。サイズは 20×20 、温度は $T = 1.5$ である。アップスピンのあるサイトは埋まっており、ダウンスピンのサイトは空白となっている。

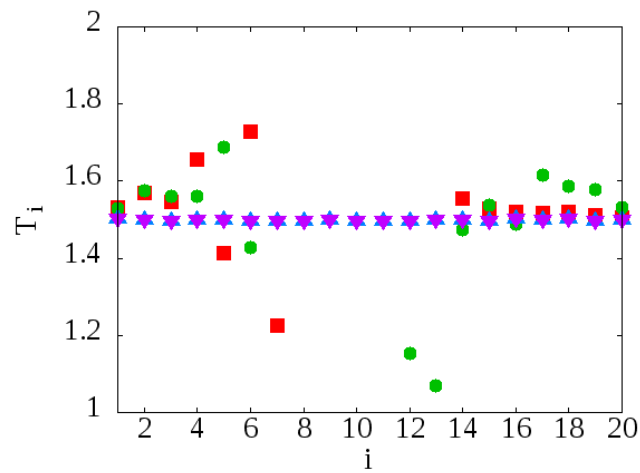


図 3.2: Creutz ダイナミクスと KSC ダイナミクスによって時間発展させた場合の温度プロファイル。システムサイズは 20×20 で、両端の熱浴の温度は $T = 1.5$ である。赤色 (緑色) の点は Creutz ダイナミクスで計算した、界面がある (ない) システムの数値結果である。青色 (紫色) の点は KSC ダイナミクスで計算した、界面がある (ない) システムの数値結果である。これらはすべて、 10^7 ステップ数値計算したのち 9×10^7 ステップで平均を取った結果である。

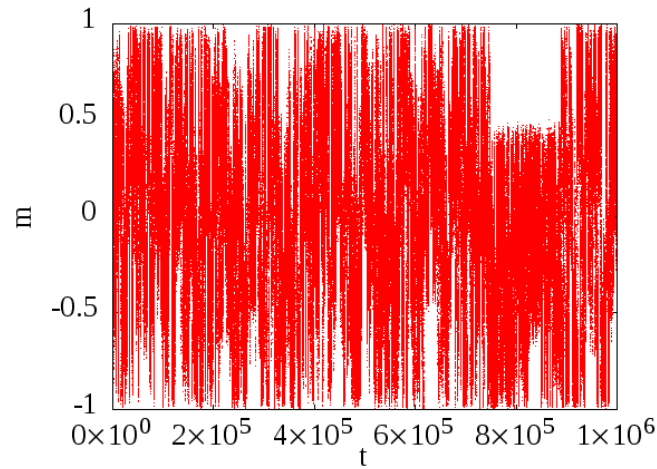


図 3.3: Creutz ダイナミクスを用いた場合の 10^6 ステップの磁化の時間発展の結果である。システムサイズは 20×20 であり、両端の熱浴の温度は $T_R = T_L = 1.5$ である。

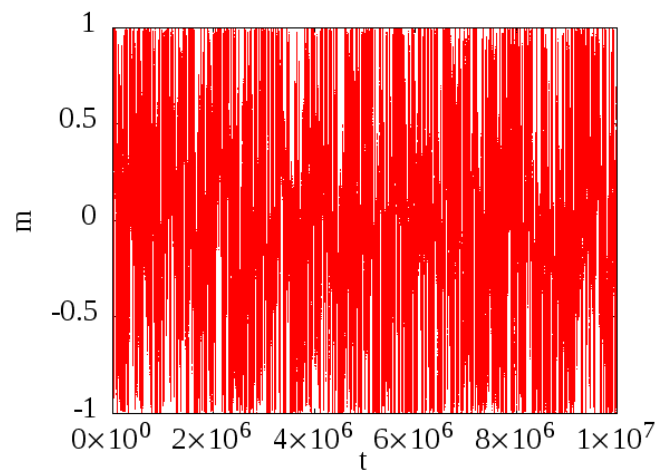


図 3.4: KSC ダイナミクスを用いた場合の 10^7 ステップの磁化の時間発展の結果である。システムサイズは 20×20 であり、両端の熱浴の温度は $T_R = T_L = 1.5$ である。

低温で十分長いシミュレーション時間を経過させた後の温度プロファイルを示しているが、設定温度に緩和しきっていないのが確認できる。また、界面が存在する場合は、図 3.3 で確認できるように、低温では界面が一定時間停滞し、満遍なく拡散しないという問題が起こる。それらのような Creutz ダイナミクスの低温の問題を解決するために、2 章で説明したように、我々は Creutz ダイナミクスと KS ダイナミクスを組み合わせた KSC ダイナミクスを提案した。このダイナミクスは以下のようなアルゴリズムで時間発展させる。

1. Creutz ダイナミクスか KS ダイナミクスかをランダムに選ぶ。
2. 前者の場合はランダムに一つのサイトを選び、後者の場合はランダムに一組の次最近接のスピンを選び、それぞれのダイナミクスのルールに従って時間発展させる。
3. 1 と 2 をサイト数回 ($L_x L_y$ 回) だけ繰り返す。
4. 熱浴に接したスピンを Glauber ダイナミクスによって時間発展させる。
5. 1 から 4 までを繰り返す。その一連のステップを単位時間とする。

このダイナミクスを用いると、Creutz ダイナミクスで有限時間内で緩和しきらなかった低温でも、緩和することが図 3.2 で確認できる。また、図 3.2 で確認できるように界面は停滞することなく、満遍なく動くことができる。

本研究で考える熱伝導システムは以下のように設定する。 x 方向の左側に温度 T_L の熱浴、右側に温度 $T_R (\leq T_L)$ の熱浴を考え、それらに接するスピンを Glauber ダイナミクスで時間発展させる。さらに、 x 方向の境界条件は左端は $+1$ 、右端は -1 で固定する。バルク部分のスピンは前述の KSC ダイナミクスを用いて時間発展させる。本研究ではボルツマン定数を 1 として考えるので、転移温度 T_c は $T_c = 2/\log(2 + \sqrt{2})$ となる。両端の熱浴の設定温度を T_c より低温にとり時間発展させると、界面が存在する熱伝導システムが形成される。

3.3 熱伝導率

3 章では KSC ダイナミクスを用いて時間発展させる。まず、私たちは新しいダイナミクスと界面の存在がフーリエ則と熱伝導率にどのように影響するかを調べる。我々は、システムサイズ 40×40 で温度差 $\Delta T = T_L - T_R$ である異なる温度の熱浴に両端が接している系の数値計算を実行した。システムの時間発展は KSC ダイナミクスを用いて行う。その結果、Creutz ダイナミクスの場合と同様に温度勾配が形成される [29, 30]。図 3.5 を見ると、界面の有無に関わらず、熱流 J は温度差 ΔT に比例する。

しかし、熱伝導率の値は界面の有無で異なる。熱伝導率は以下のように定義される。

$$\kappa(T) = J \frac{L_x}{\Delta T} \quad (3.1)$$

図 3.6 は、KSC ダイナミクスで時間発展させるシステムの熱伝導率の数値計算結果である。低温では、熱伝導率は界面の有無に関わらず、[30] で示唆されているように、 $\kappa \sim \frac{1}{T^2} \exp(-\frac{8}{T})$ という関数形になる。KSC ダイナミクスでは、熱伝導率は界面がある場合よりも無い場合の方が大きくなる。興味深いことに、この結果は Creutz ダイナミクスの場合の結果と逆である。

ここで、熱流を Creutz ダイナミクスによる寄与の J_c と KS ダイナミクスによる寄与の J_k に分ける。我々は J_c と J_k を用いて計算した熱伝導率をそれぞれ κ_c と κ_k のように定義した。図 3.7(a)、(b) が見せるように、界面があると κ_c は大きくなり κ_k は小さくなる。その理由は以下のように説明される。Creutz ダイナミクスにおけるフリップの条件は、フリップによるスピン相互作用エネルギーの変化に依存する。界面では異なる向きのスピスが隣接しているため、そこではエネルギーの変化が小さく、スピンのフリップが起こる。もし界面がない場合は、同じ向きのスピスに囲まれる可能性が高く、フリップするには大きなエネルギーが必要となる。それゆえ、Creutz ダイナミクスは界面が存在する場合にはエネルギーの伝導に、より貢献するのである。対して、KS ダイナミクスは界面近くで熱伝導が抑制される。図 3.8(a) のようにフラットな界面での次最近接スピスの組を考える。もしそれらのスピスを交換するとき、図で示されているスピスの相互作用エネルギー Σ と Σ' は変化し、合計のエネルギーは 8 増加する。したがってスピスは交換されない。図 3.8(b) のように界面

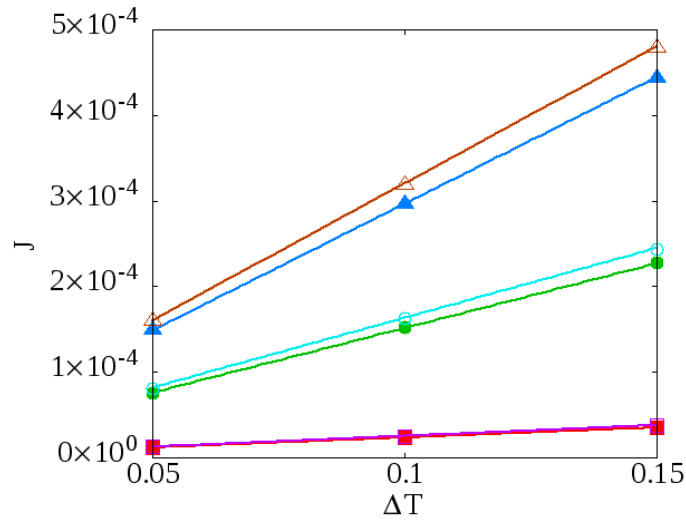


図 3.5: 界面が存在する系としない系における熱流の結果。システムサイズは 40×40 で熱浴の平均温度は $T_{\text{ave}} = 1.0, 1.5, 2.0$ である。データは 4.5×10^7 ステップおよび 50 サンプルで平均を取ったものである。赤色、緑色、青色の点はそれぞれ界面が存在する場合の $T_{\text{ave}} = 1.0, 1.5$, そして 2.0 の結果である。薄赤色、薄緑色、黄色の点はそれぞれ界面が存在しない場合の $T_{\text{ave}} = 1.0, 1.5$, そして 2.0 の結果である。

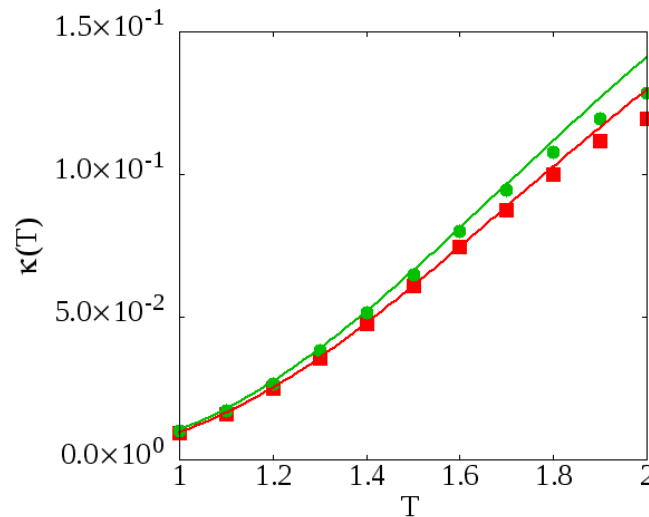
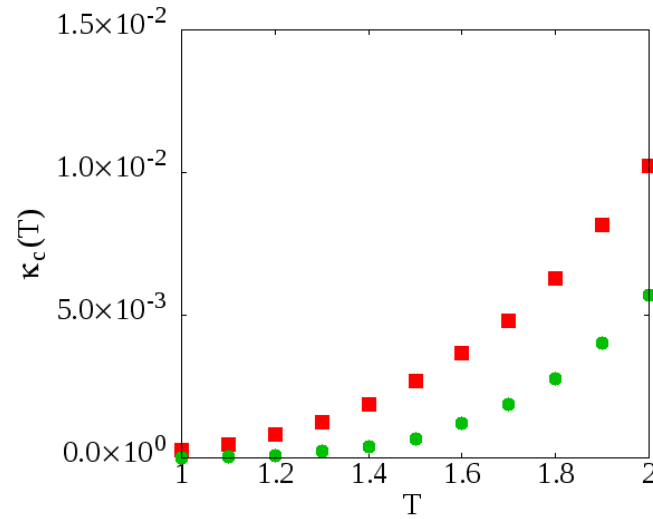
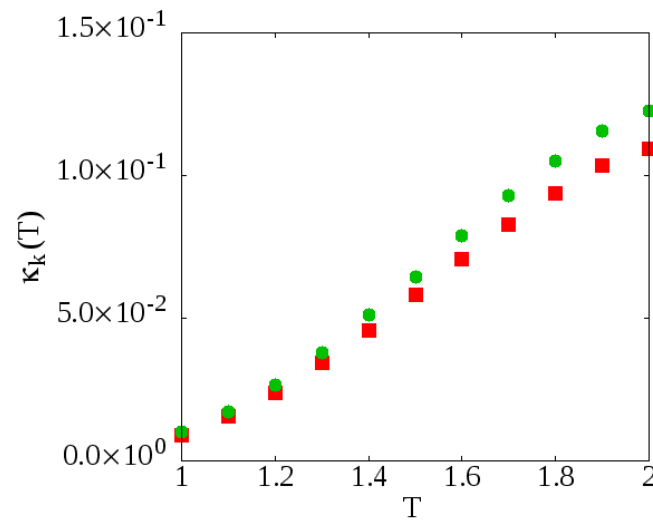


図 3.6: KSC ダイナミクスによる熱伝導率 $\kappa(T)$ 。赤色と緑色の点はそれぞれ界面がある場合とない場合である。赤色と緑色の線はそれぞれ $28.3/T^2 \exp(-8/T)$ と $30.8/T^2 \exp(-8/T)$ を示す。



(a)



(b)

図 3.7: (a) Creutz ダイナミクスの熱伝導への寄与 $\kappa_c(T)$ の結果。赤色と緑色の点はそれぞれ界面がある場合とない場合である。(b) KS ダイナミクスの熱伝導への寄与 $\kappa_k(T)$ の結果。赤色と緑色の点はそれぞれ界面がある場合とない場合である。

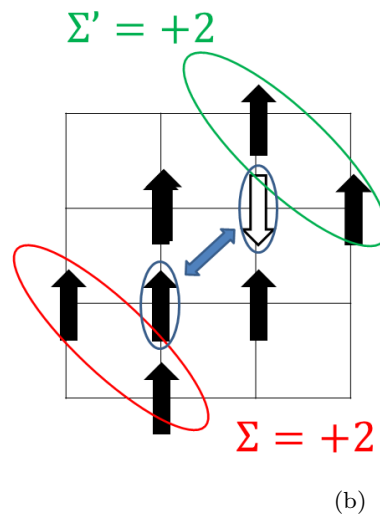
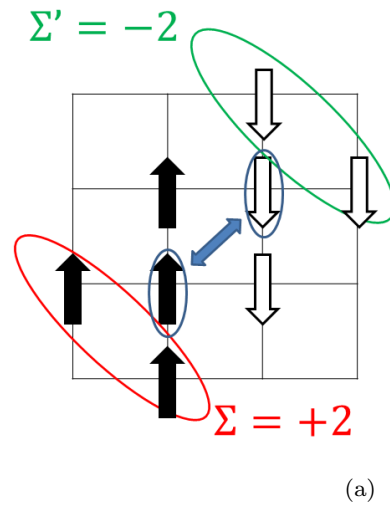


図 3.8: スピン配置の例。(a) は 2 つの反対の向きスピンの界面に隣接している場合である。(b) は 2 つの反対の向きスピンの界面に隣接していない場合である。

から離れたところでは、一つのスピンだけが反対の向きスピンの間に囲まれている場合、エネルギー変化がなく、次最近接スピンの向きを交換できる。以上の理由で、界面の存在が KS ダイナミクスをコントロールし、 κ_k を小さくするのである。

3.4 界面位置の確率分布

我々は、磁化 $m = (L_x L_y)^{-1} \sum_{i,j} \sigma_{i,j}$ を用いて界面を以下のように定義する。

$$X = \frac{L_x}{2} (m + 1) \quad (3.2)$$

我々は KSC ダイナミクスを用いてシステムサイズ 40×40 の系での界面の位置の確率分布を数値的に見積もる。図 3.9(a) は $T_{\text{ave}} = 1.5$ かつ様々な ΔT での結果であり、高温の領域で界面が存在しやすいことを示している。なお、 $T_{\text{ave}} = (T_L + T_R)/2$ である。その分布は、おおそ指数分布であり、より大きい ΔT でその傾きがより大きくなる。この結果は Creutz ダイナミクスを用いた場合の結果と一致している [37]。図 3.9(b) を見て分かるように、 ΔT が小さくなると、より指数分布に近づく。

また、高温になると境界の近くでの $p(X)$ の減衰が速くなることが分かる。それは以下のように説明される。右端(左端)での磁化は境界条件から $+1$ (-1) で固定されている。しかし、その大きさは温度 T_L もしくは T_R での自発磁化より大きいので、界面は端に到達できない。界面の可動範囲は L' が界面の幅であるとき、 $[L'/2, L_x - L'/2]$ より小さくなる。高温になると界面の幅は大きくなるので、可動範囲は小さくなる。後で議論するように、実効システムサイズの変化はパワースペクトルの温度依存性において役割を担っている。

実際、指数分布は以下のように局所平衡の仮定によって説明される。局所平衡とは温度 $T(x)$ を用いて、確率分布を以下のように表せるということである。

$$p(X) \sim \exp\left(-\frac{\sigma(T, L_y)}{T(x)}\right) \quad (3.3)$$

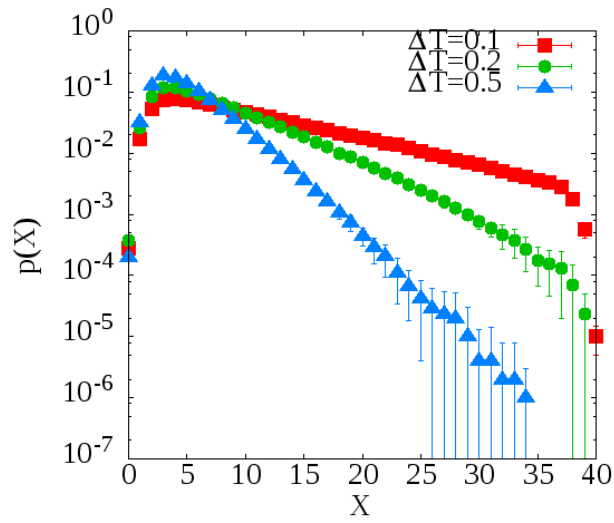
なお、 $\sigma(T, L_y)$ は T での界面エネルギーである。 ΔT がとても小さいとき、 $1/T(x)$ は以下のように近似でき、 $\sigma(T, L_y)$ は定数とみなせる。

$$\frac{1}{T(x)} \sim \frac{1}{T_{\text{ave}}} \left(1 + \frac{\Delta T}{T_{\text{ave}}} \frac{x}{L}\right) \quad (3.4)$$

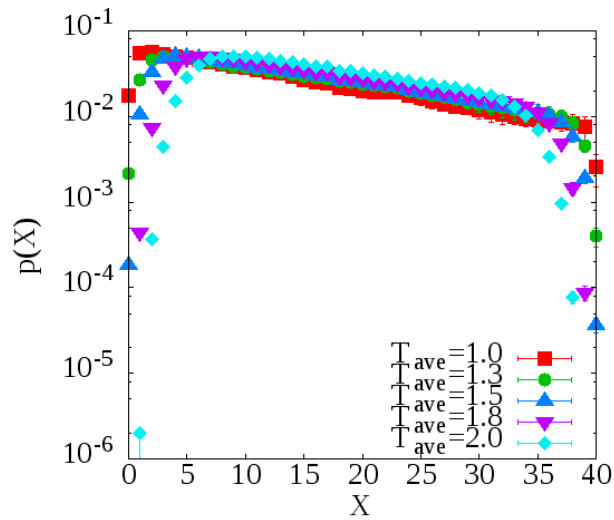
したがって、確率分布は以下ようになる。

$$p(X) \sim \exp\left(-\sigma(T_{\text{ave}}, L_y) \frac{\Delta T}{T_{\text{ave}}^2} \frac{X}{L}\right) \quad (3.5)$$

界面エネルギー $\sigma(T, L_y)$ は図 3.10 で示されるように見積もられる。



(a)



(b)

図 3.9: (a) $T_{\text{ave}} = 1.5$ かつ $\Delta T = 0.1, 0.2, 0.5$ の場合の界面位置の確率分布。(b) $\Delta T = 0.05$ かつ $T_{\text{ave}} = 1.0, 1.3, 1.5, 1.8, 2.0$ の場合の界面位置の確率分布。

3.5 2次元イジングモデルでの界面の拡散運動によって誘起されたパワースペクトルの性質

3.5.1 パワースペクトルと界面の拡散運動の関係

[56] に従ってパワースペクトルと界面の拡散のダイナミクスとの関係を簡単にレビューする。サイズ L で位置 x にある界面の左側の密度が ρ_- 、右側の密度が $\rho_+ (> \rho_-)$ であるような、2つの相による1次元システムを考える。

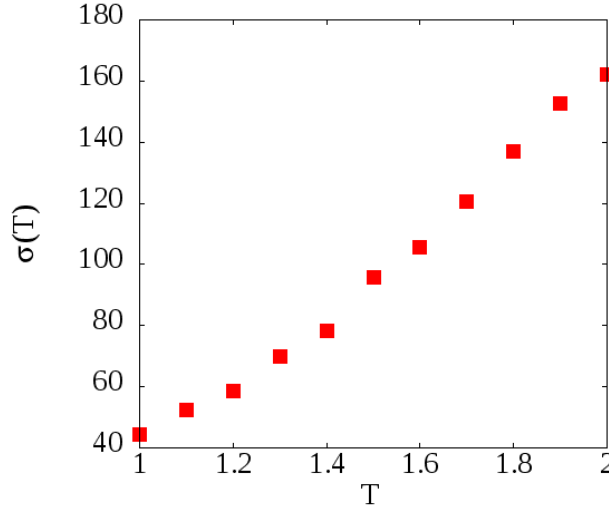


図 3.10: 確率分布から 式 (3.5) を用いて見積もられる界面エネルギー。

このケースでは、サイト y での密度は以下ようになる。

$$\rho_y(t) = \rho_- + (\rho_+ - \rho_-)\theta(y - x(t)) \quad (3.6)$$

$\theta(x)$ はステップ関数である。今、 $x(t)$ は拡散係数 D でのブラウン運動に従うものとする。したがって x の確率密度は以下の拡散方程式に従う。

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \quad (3.7)$$

$x = 0$ と L での反射境界条件

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial x} = 0 \quad (3.8)$$

から、定常状態では $P_{st}(x) = L^{-1}$ となり、遷移確率は以下ようになる。

$$P(x, t|x_0, t_0) = \frac{1}{L} + \frac{2}{L} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D\lambda_n^2 t} \cos \lambda_n x \cos \lambda_n x_0 \quad (3.9)$$

なお、 $\lambda_n = \frac{n\pi}{L}$ である。従って $\delta\rho_y(t) = \rho_y(t) - \langle \rho_y \rangle_{st}$ の自己相関関数は以下のように求まる。

$$\langle \delta\rho_y(t)\delta\rho_y(0) \rangle = \frac{2(\rho_+ - \rho_-)^2}{L^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-D\lambda_n^2 |t|}}{\lambda_n^2} \sin^2 \lambda_n y \quad (3.10)$$

Wiener-Khinchin の定理によって、パワースペクトル密度は相関関数のフーリエ変換で与えられ、以下のように計算される。

$$\begin{aligned} I(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \langle \delta\rho_y(t)\delta\rho_y(0) \rangle dt \\ &= \frac{2(\rho_+ - \rho_-)^2}{L^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2D}{D^2\lambda_n^4 + \omega^2} \sin^2 \lambda_n y \end{aligned} \quad (3.11)$$

$y = L/2$ かつ L が大きい場合、上式の n に関する和は留数計算で解ける積分に置き換えることができる。したがって、以下ようになる。

$$I(\omega) = (\rho_+ - \rho_-)^2 \frac{\sqrt{2D}}{2L} \omega^{-1.5} \quad (3.12)$$

上の関係を 2 次元イジングモデルに拡張し、我々は以下のような時系列の 2 つのタイプとそれらのパワースペクトルについて考える。一つはコラム平均の磁化の時系列のパワースペクトルである。

$$\{s_i(t) = \frac{1}{L_y} \sum_j \sigma_{i,j}(t) | t = 0, 1, 2, \dots, T-1\} \quad (3.13)$$

本研究のシミュレーションでは、時系列の長さは $T = 2^{20}$ とする。時系列のフーリエ成分 (3.13) は以下のように計算できる。

$$S_n = \sum_{t=0}^{T-1} s_i(t) \exp(-\omega_n t) \quad (3.14)$$

なお、 $\omega_n = \frac{2\pi n}{T}$ である。パワースペクトル $I(\omega)$ は以下ようになる。

$$I(\omega_n) = T \langle |S_n|^2 \rangle \quad (3.15)$$

なお、ブラケットは 200 サンプルの平均を意味する。もし界面が拡散係数 D の正常拡散で動くならば、 $\rho_+ - \rho_-$ を $2m_0$ とした式 (3.12) の形のパワースペクトルを得ることが期待される。なお、 m_0 は自発磁化であり、以下のように与えられる。

$$m_0(T) = [1 - \sinh(2/T)^{-4}]^{1/8} \quad (3.16)$$

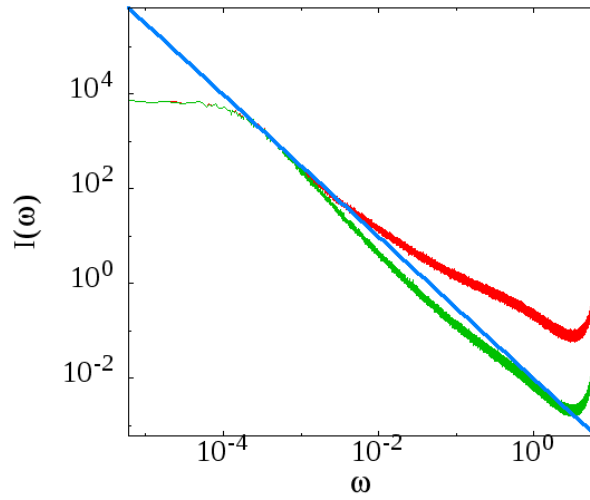
もう一つはサイトのスピンの時系列 $\{\sigma_{i,j}(t) | t = 0, 1, 2, \dots, T-1\}$ を考える場合である。そのパワースペクトルは上記と同じように定義される。

3.5.2 Glauber ダイナミクスでの平衡系の結果

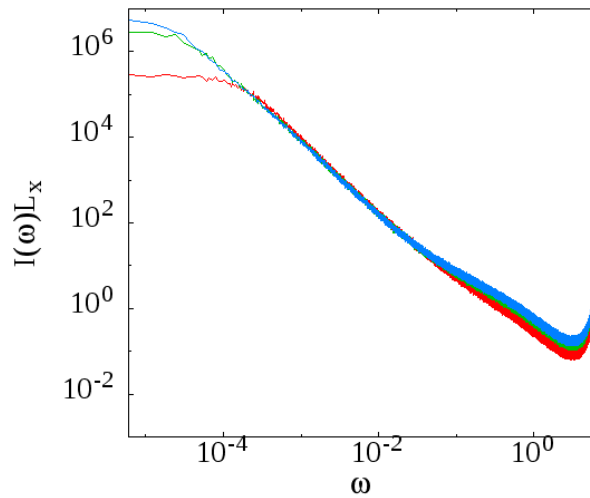
はじめに、我々は Glauber ダイナミクスによる 2 次元イジングモデルのパワースペクトルを調べる。図 3.11(a) は転移温度 T_c より少し低い温度である $T = 2.0$ でのパワースペクトルを示す。

この図が見せるように、サイトのスピンの時系列 ($\sigma_{L_x/2, L_y/2}(t)$) と $L_x/2$ でのコラム平均の磁化 ($s_{L_x/2}(t)$) のパワースペクトルは低周波数範囲で -1.5 のべき則を見せる。さらに、図 3.11(b) は式 (3.12) に従って x 方向のサイズでスケールされることを示す。これらの結果は界面がある時間スケールで正常拡散で運動するというを示す。さらに、図 3.12 で示されるパワースペクトルの温度依存性は、温度の減少とともに拡散係数が小さくなることを示している。

しかしながら、そのべき則は低周波数の短い範囲に限られており、グラフは高周波数領域で特徴的なカーブを見せる。コラム平均 $s_{L_x/2}(t)$ のパワースペクトルにおいて、そのべき則からのずれは界面の幅を考慮することで説明される。1 次元系では、密度プロファイルは幅のないステップ関数である。対して、コラム平均の磁化は幅を持つ。それゆえ、パワースペクトルにおけるその影響を考えなければならない。ステップ関数のプロファイルの代わりに、 $s_x(t)$ は近似的に以下のように仮定する。



(a)



(b)

図 3.11: (a) サイズ $L_x = L_y = 40$ 、温度 $T = 2.0$ のシステムでの $\sigma_{L_x/2, L_y/2}(t)$ と $s_{L_x/2}(t)$ のパワースペクトル。赤色の点は前者、緑色の点は後者を示す。青色の線は -1.5 乗のべき則を示す。(b) $L_x = 40$ [赤色]、 80 [緑色]、 100 [青色] の場合の $s_{L_x/2}(t)$ のパワースペクトルに関して、 $I(\omega)L_x$ vs ω をの結果を図示している。式 (3.12) の L_x 依存性によってスケールされていることが分かる。

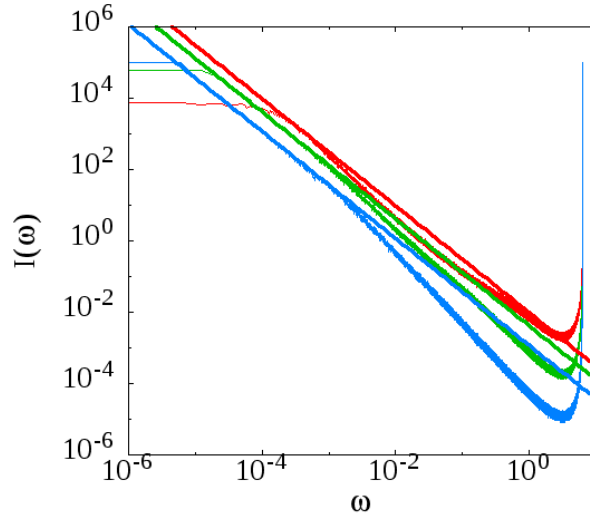


図 3.12: $s_{L_x/2}(t)$ ($L_x = L_y = 40$) のパワースペクトルの温度依存性。赤色、緑色、青色の点は、それぞれ $T = 2.0$ 、 1.0 、 0.5 の結果を示す。赤色、緑色、青色の線は、それぞれ $T = 2.0$ 、 1.0 、 0.5 での -1.5 乗則を示す。

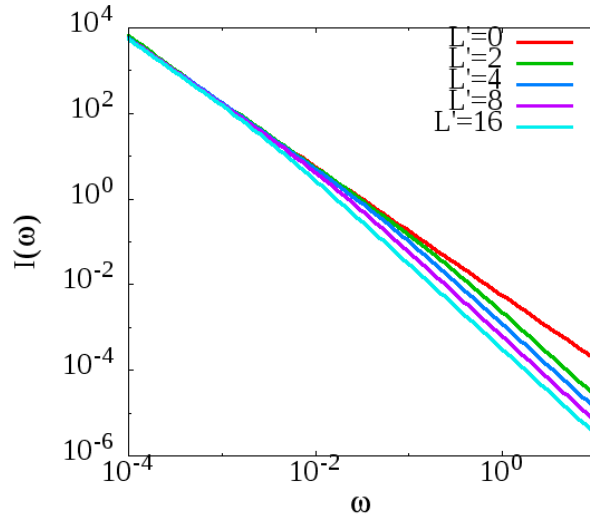


図 3.13: 様々な幅 L' の場合の式 (3.21) で説明されるパワースペクトル

$$s_x(t) = \begin{cases} m_0 & (0 \leq x < X(t) - \frac{L'}{2}) \\ \frac{2m_0}{L'}(x - X(t)) & (X(t) - \frac{L'}{2} \leq x < X(t) + \frac{L'}{2}) \\ -m_0 & (X(t) + \frac{L'}{2} \leq x \leq L) \end{cases} \quad (3.17)$$

なお、 L' は界面の幅、 $X(t)$ は時刻 t での界面の位置である。また、 $X(t)$ は拡散係数 D のブラウン運動に従うとする。この場合で、 $\delta s_y(t) = s_y(t) - \langle s_y \rangle_{st}$ の自己相関関数は以下のように計算される。

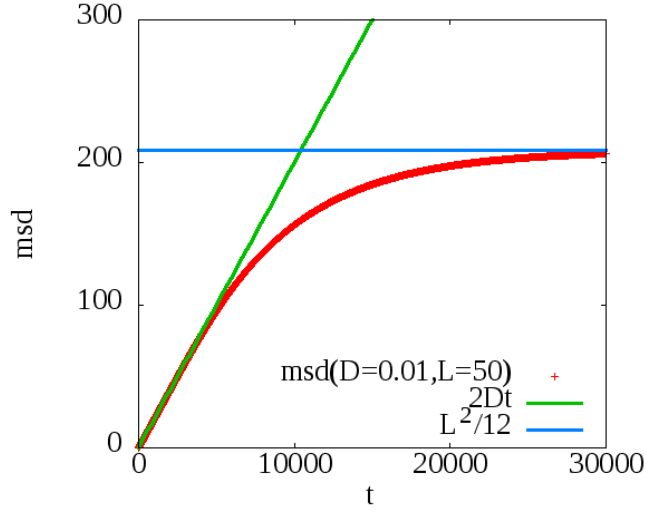


図 3.14: 式 (3.22) の平均 2 乗変位 ($L = 0.01, L = 50$).

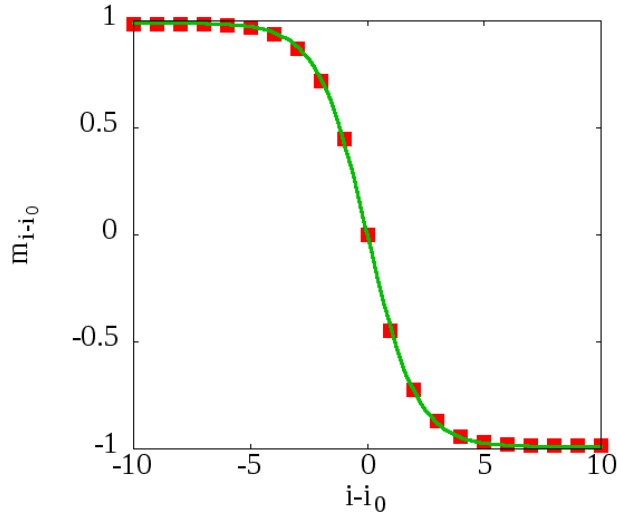


図 3.15: 式 (3.23) の tanh プロファイルでフィットされたコラム平均磁化のプロファイル。赤色の点は $T = 1.5$ での数値計算結果、緑色の線は $-0.99 \tanh(2/4.22(i - i_0))$ を示す。

$$\langle \delta s_y(t) \delta s_y(0) \rangle = \frac{8m_0^2}{L^2} \sum_n e^{-D\lambda_n^2 |t|} \frac{\sin^2(\frac{L'}{2}\lambda_n)}{(\frac{L'}{2}\lambda_n)^2} \frac{\sin^2 \lambda_n y}{\lambda_n^2} \quad (3.18)$$

なお、 $\lambda_n = n\pi/L$ であり、パワースペクトル密度はそのフーリエ変換で以下のように求まる。

$$\begin{aligned} I(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\omega t) \langle \delta s_y(t) \delta s_y(0) \rangle dt \\ &= \frac{16Dm_0^2}{L^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin^2(\frac{L'}{2}\lambda_n)}{(\frac{L'}{2}\lambda_n)^2} \frac{\sin^2 \lambda_n y}{D^2 \lambda_n^4 + \omega^2} \end{aligned} \quad (3.19)$$

$y = L/2$ で L が大きいとすると、 n の和は以下のような積分に置き換えられる。

$$I_E(\omega) \sim \frac{32m_0^2}{\pi DL} \int_0^\infty \left(\frac{\sin \beta x}{\beta x} \right)^2 \frac{dx}{x^4 + \alpha^2} \quad (3.20)$$

なお、 $\alpha = \frac{\omega}{D}$ 、 $\beta = \frac{L'}{2}$ である。この積分は留数計算で解くことができ、以下ようになる。

$$I_E(\omega) = (2m_0)^2 \left[\frac{2D^{\frac{3}{2}}}{LL'^2} \omega^{-\frac{5}{2}} \left\{ \exp(-L'(\frac{\omega}{2D})^{\frac{1}{2}}) \cos(L'(\frac{\omega}{2D})^{\frac{1}{2}} + \frac{\pi}{4}) - \frac{1}{\sqrt{2}} \right\} + \frac{2D}{LL'} \omega^{-2} \right] \quad (3.21)$$

図 3.13 は幅 L' の様々な値での $I_E(\omega)$ を示している。それらは低周波数範囲で -1.5 乗のべき則に従うが、勾配はある周波数を超えると急になる。その勾配が急になりはじめる周波数は、界面の幅の減少関数となっている。数値的に得られたパワースペクトルと式 (3.21) を比較するには、拡散係数 D と界面の幅 L' が必要になる。さらに温度によって境界条件が異なるので、システムサイズ L はフィッティングパラメタとして扱う。拡散係数と実効システムサイズは以下のように数値的に見積もられる。 $x = L/2$ にシャープな界面がある系を準備し、その平均 2 乗変位 (mean square displacement, msd) を考える。平均 2 乗変位は以下のように解析的に導出される。

$$\langle (X - L/2)^2 \rangle = \sum_{k=1} \frac{L^2}{\pi k^2} \{ \exp(-\frac{4\pi^2 D k^2}{L^2} t) - 1 \} (-1)^k \quad (3.22)$$

図 3.14 が示すように、平均 2 乗変位は小さい t では $2Dt$ で、十分大きい t では $L^2/12$ に収束する。数値計算結果では、低温では $L \simeq L_x$ で、高温になるにつれ L_x よりも小さくなる。

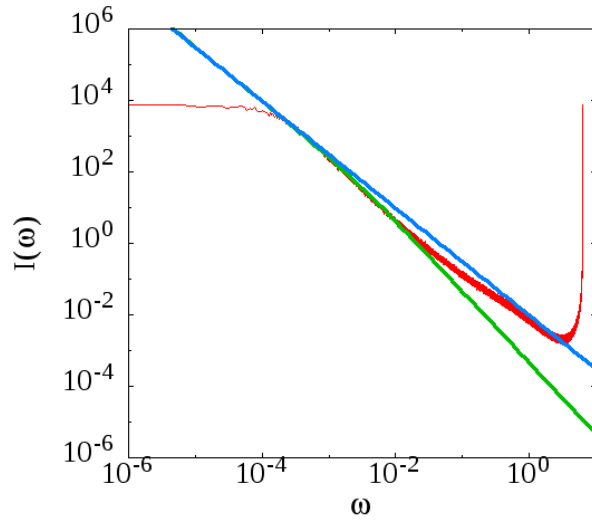
界面の幅 L' はコラム平均磁化 $s_i(t)$ のプロファイルのフィッティングによって見積もられる。時刻 t でのプロファイル $s_i(t)$ での $|s_i(t)|$ が最小になる位置として界面位置 $i_0(t)$ を定める。そして、図 3.15 で示されるように、 $s_{i-i_0(t)}(t)$ の時間平均は以下のような関数でフィットできる。

$$-m_0 \tanh(2i/L') \quad (3.23)$$

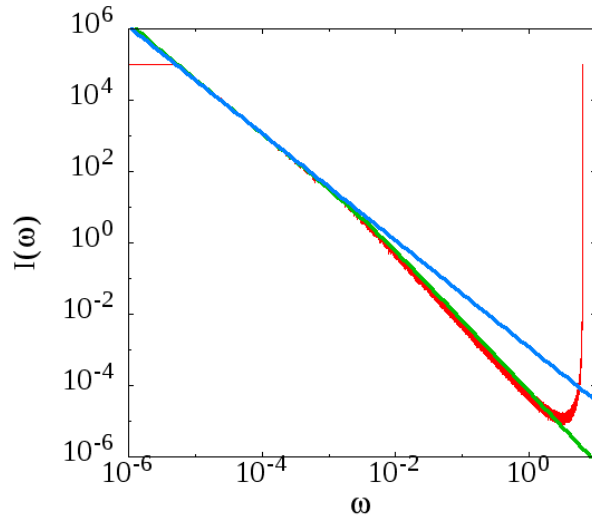
例として、図 3.15 で示されるように、 $T = 1.5$ での L' は 4.22 と見積もられる。図 3.16(a) と図 3.16(b) は、 $T = 2.0$ (図 3.16(a)) と $T = 0.5$ (図 3.16(b)) の場合の $s_{L_x/2}$ でのパワースペクトルと $I_E(\omega)$ の比較を示している。図 3.11(a) と比較すると、我々は $I_E(\omega)$ は -1.5 乗のべき則よりもパワースペクトルの数値計算結果を再現できていることを確認できる。したがって、平衡系の Glauber ダイナミクスでの界面の時間発展は幅を持つ界面の正常拡散である。そのフィッティングは温度の減少とともに良くなっていく。 $T = 2.0$ では $I_E(\omega)$ は $s_{L_x/2}$ のパワースペクトルを周波数範囲 ($\omega < 0.01$) で再現し、 $T = 0.5$ ではより広い範囲 ($\omega < 1.0$) で再現する。パワースペクトルの大きさは高温の方が大きくなる。これは、前述の通り、拡散係数が高温で大きくなり、実効システムサイズが高温で小さくなることによる。自発磁化の違いは転移温度付近を除いて重要ではない。 $T = 2.0$ での高周波数範囲で見られるようなずれは、式 (3.17) の近似と図 3.15 での平均のプロファイルまわりでのゆらぎによると考えられる。

3.5.3 KSC ダイナミクスでの平衡系の結果

平衡系では、KSC ダイナミクスによる結果は Glauber ダイナミクスの結果とそれほど変わらない。しかし、同じ温度でもダイナミクスによって拡散係数は異なる。図 3.17 では、パワースペクトルの数値計算結果と式 (3.21) を比較している。低周波数範囲ではよい一致を見せている。



(a)



(b)

図 3.16: サイズ $L_x = L_y = 40$ 、温度 (a) $T = 2.0$ と (b) $T = 0.5$ のシステムでの、 $s_{L_x/2}$ と $I_E(\omega)$ のパワースペクトルの比較。どちらの図でも、赤色の点は $s_{L_x/2}$ の数値計算結果で、緑色の線は、(a) $D = 0.0158$, $L = 29.9$, $L' = 7.4$, $m_0 = 0.90$ 、(b) $D = 0.000272$, $L = 40.0$, $L' = 0.8$, $m_0 = 1.00$ での $I_E(\omega)$ 、青色の線は -1.5 のべき則を示している。

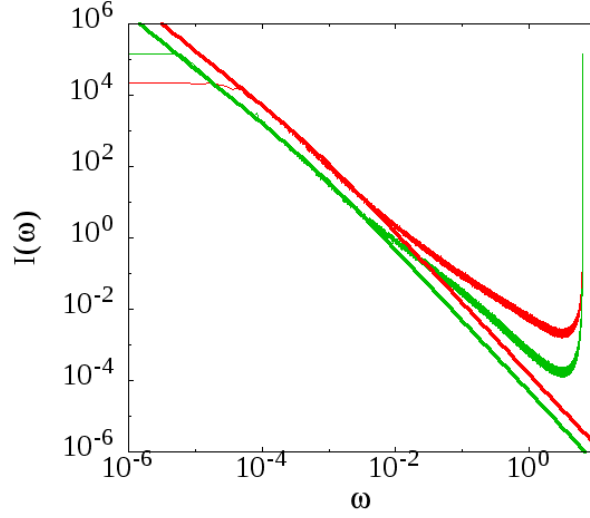


図 3.17: システムサイズ $L_x = L_y = 40$ での KSC ダイナミクスの $s_{L_x/2}$ のパワースペクトルの数値計算結果と $I_E(\omega)$ の比較。赤色、緑色の点はそれぞれ $T = 2.0$ と 1.0 の結果を示し、赤色と緑色の線はそれぞれ $T = 2.0$ ($D = 0.00491$, $L = 29.0$, $L' = 7.3$) と $T = 1.0$ ($D = 0.000569$, $L = 39.3$, $L' = 2.4$) の場合の $I_E(\omega)$ を示す。

3.5.4 KSC ダイナミクスでの非平衡系の結果

我々は T_L と T_R の異なる温度による 2 つの熱浴に接触したシステムを考える。 $T_L > T_R$ としてバルクの状態は KSC ダイナミクスで時間発展させる。前述の通り非平衡系では、界面位置の定常確率分布は指数分布である。これは以下のようにフォッカー・プランク方程式に一定のドリフト項を加えると実現される。

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(-FP + D \frac{\partial P}{\partial x} \right) \quad (3.24)$$

なお、 F は界面が受ける力を表す定数である。このケースでの反射境界条件は以下のようになる。

$$\left(-FP + D \frac{\partial P}{\partial x} \right) \Big|_{x=0,L} = 0 \quad (3.25)$$

式 (3.24) と (3.25) から、定常分布は以下のようになる。

$$P_{\text{st}}(x) = \frac{K e^{-KL}}{\sinh(KL)} \exp(2Kx) \quad (3.26)$$

なお、 $K = \frac{F}{2D}$ である。したがって、指数分布が得られる。我々は式 (3.24) は界面の動的な性質も説明できるか否かを調べる。 x 方向でのコラム平均磁化の時系列パワースペクトルは

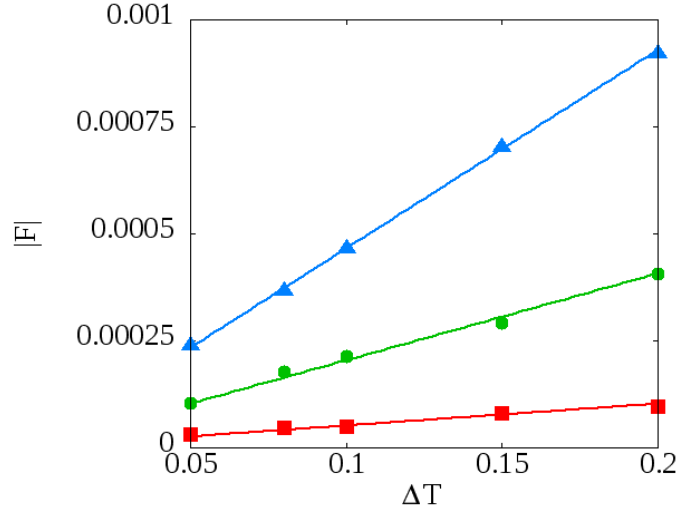


図 3.18: 確率分布から見積もられるドリフト力 F の結果。システムサイズは 40×40 、平均温度は $T_{\text{ave}} = 1.0, 1.5, 2.0$ である。赤色、緑色、青色の点はそれぞれ $T_{\text{ave}} = 1.0, 1.5, 2.0$ の結果を示す。赤色、緑色、青色の線はフィッティングの線であり、それぞれ $0.000512\Delta T$ 、 $0.00203\Delta T$ 、 $0.00464\Delta T$ である。ドリフト力 F を見積もるための確率分布を計算するために、 5×10^6 ステップ発展させた後の 4.5×10^7 ステップの結果を用いた。

前述と同様の方法で導出され、以下ようになる。

$$\begin{aligned}
I_{NE}(\omega) = & (2m_0)^2 \frac{2}{DLL'^2} \frac{KL}{\sinh(KL)} \left(\frac{\omega}{D}\right)^{-2} \frac{\sqrt{\sqrt{(K^2)^2 + \left(\frac{\omega}{D}\right)^2} + K^2}}{\sqrt{(K^2)^2 + \left(\frac{\omega}{D}\right)^2}} \left[-\frac{1}{\sqrt{2}} \cosh(KL') \right. \\
& + \exp\left(-L' \sqrt{\frac{\sqrt{(K^2)^2 + \left(\frac{\omega}{D}\right)^2} - K^2}{2}}\right) \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} \cos\left(L' \sqrt{\frac{\sqrt{(K^2)^2 + \left(\frac{\omega}{D}\right)^2} - K^2}{2}}\right) \right. \\
& \left. \left. - \left(\frac{\omega}{D}\right)^{-1} \left(\sqrt{(K^2)^2 + \left(\frac{\omega}{D}\right)^2} - K^2\right) \sin\left(L' \sqrt{\frac{\sqrt{(K^2)^2 + \left(\frac{\omega}{D}\right)^2} - K^2}{2}}\right) \right\} \right. \\
& \left. + \left(\frac{\sqrt{\sqrt{(K^2)^2 + \left(\frac{\omega}{D}\right)^2} + K^2}}{\sqrt{(K^2)^2 + \left(\frac{\omega}{D}\right)^2}}\right)^{-1} L' \left(\frac{\sinh(KL')}{KL'}\right) \right] \quad (3.27)
\end{aligned}$$

導出の詳細は Appendix で説明している。

$K \rightarrow 0$ のとき、 $I_E(\omega)$ に収束する。もし $|K|D \ll \omega$ かつ $|K|L' \ll 1$ であるとき、以下のようなになる。

$$I_{NE}(\omega) \sim \frac{KL}{\sinh(KL)} I_E(\omega) \quad (3.28)$$

次に、我々は数値計算結果と導出した $I_{NE}(\omega)$ を比較する。我々は、拡散係数 D 、実効長さ L 、界面の幅 L' は温度 T_{ave} での平衡系の場合と同じ値を用いる。ドリフト力 F は界面の確率分布から見積もられる。図 3.18 は以下のようにドリフト F が温度差 ΔT に比例することを示す。

$$|F| = f(T)\Delta T \quad (3.29)$$

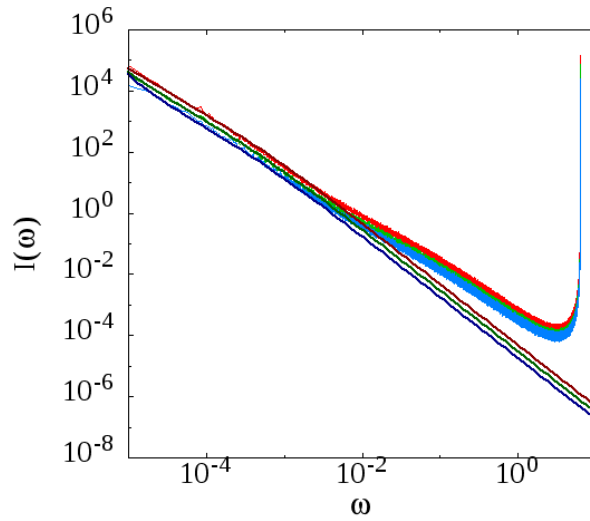


図 3.19: $s_{L_x/2}$ ($T = 1.0$, $L_x = L_y = 40$) のパワースペクトルの数値計算結果と $I_{NE}(x)$ の比較。赤色、緑色、青色の点は $\Delta T = 0.0$, 0.1 , 0.15 の数値計算結果で、赤色、緑色、青色の線はそれぞれ同じ色の温度に対応した $I_{NE}(x)$ である。その他のパラメタは $D = 0.000569$, $L = 39.3$, $L' = 2.4$, $F = 0.000512\Delta T$ である。

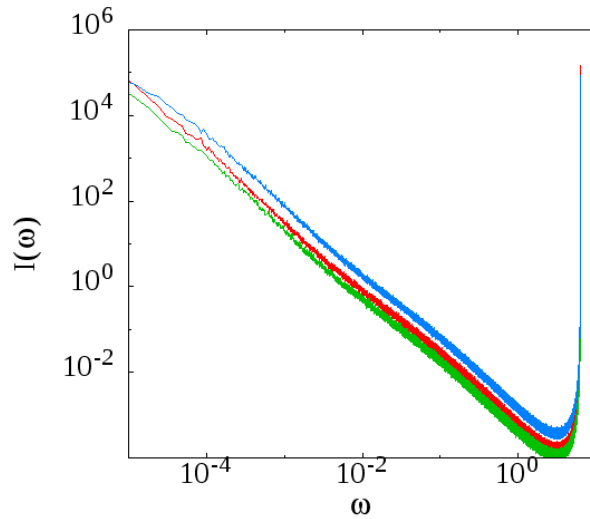


図 3.20: システムサイズ $L_x = L_y = 40$ での、平衡 [$T = 1.0$, 赤色の点] と非平衡 [$T_{ave} = 1.0$, $\Delta T = 0.1$, 緑色の点] の場合の $s_{L_x/2}$ のパワースペクトルの比較。青色の点は非平衡系 ($T = 1.0$, $\Delta T = 0.1$, $X_h = 7$) での s_{X_h} のパワースペクトルを表している。

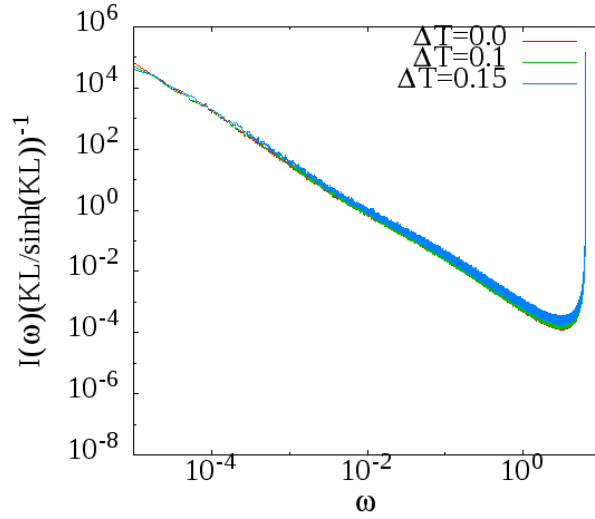


図 3.21: $s_{L_x/2}$ ($T = 1.0$, $L_y = 40$) のパワースペクトルのスケージング。縦軸は $I(\omega)(\frac{KL}{\sinh(KL)})^{-1}$ とする。それらは $(\frac{KL}{\sinh(KL)})$ でスケールされる。

なお、 $f(T)$ は図 3.18 から見積もられる。

図 3.19 は ΔT が十分小さいときのパワースペクトルの結果を示す。温度差 ΔT が大きくなると、パワースペクトルの大きさは小さくなることと、 $I_{NE}(\omega)$ は広い周波数範囲 ($\omega < 0.01$) で数値計算結果を再現できることが確認できる。したがって、界面の運動は高温側への一定のドリフトがある正常拡散であると考えられる。このドリフト力の追加が非平衡の効果である。そのドリフト力により、界面は中央よりむしろ高温側にとどまりやすくなる。それが非平衡系での $s_{L_x/2}$ のパワースペクトルの大きさの減少を引き起こしている。

一方、もし $\int_0^{x_h} P_{st}(x') dx' = 1/2$ で定義される位置 x_h を考えると、 s_i のパワースペクトルは $i \simeq x_h$ 付近で最大値をとる。図 3.20 は平衡系と非平衡系の $s_{L_x/2}$ のパワースペクトルと非平衡系 ($\Delta T = 0.1$) での s_{X_h} のパワースペクトルを図示している。なお、 X_h は x_h を四捨五入した整数値である。 $s_{L_x/2}$ のパワースペクトルは平衡系の場合の方が非平衡系の場合より大きい、 s_{X_h} のパワースペクトルはそれらの両方を上回って大きい値を取る。図 3.21 は様々な ΔT でのパワースペクトルを示しており、式 (3.28) のスケールを満たすことを示している。高周波数範囲では、 $I_{NE}(\omega)$ からのずれがはっきり現れる。これは界面プロファイルの近似とゆらぎによるものだと考えられる。

3.6 まとめと結論

この章では、平衡系と非平衡系での 2 次元イジングモデルでの界面のダイナミクスについて研究した。我々は Creutz ダイナミクスでフリーズしてしまう低温で、数値計算ができるようにするため、Creutz ダイナミクスと KS ダイナミクスを組み合わせた KSC ダイナミクスを提案した。KSC ダイナミクスを用いて、界面がある場合とない場合の熱伝導率を計算し、界面がない場合の熱伝導率の方がある場合より大きくなるということを明らかにした。また、熱伝導率は Creutz ダイナミクスによる寄与と KS ダイナミクスによる寄与に分けられる。興味深いことに界面の存在は正反対の 2 つの寄与に影響する。界面が存在する場合は、ない場合よりも $\kappa_c(T)$ は大きくなり、 $\kappa_k(T)$ は小さくなる。

次に、我々は KSC ダイナミクスでの界面の位置の確率分布を調べた。その結果、分布は高温側に偏り、温度差がとても小さい場合は指数分布でよく近似できることが明らかになった。

次に、我々はサイトのスピンもしくはコラム平均の磁化の時系列のパワースペクトルを用いて界面のダイナミクスを解析した。これは [56] で発案された方法を 2 次元系に一般化したものである。[56] では、ある位置での場の変数の時系列のパワースペクトルが、界面の拡散ダイナミクスによって $-3/2$ のべき則をみせるということが示されている。その 2 次元への最も簡単な拡張はある固定されたサイトでのスピンのパワースペクトルを調べることである。しかしながら、我々はそのようなパワースペクトルでは高周波数でのノイズによってべき則がほぼ見られなくなることを確認した。コラム平均磁化のパワースペクトルもべき則からずれるが、我々は界面の幅を考慮することで大部分説明できるようになる事を明らかにした。さらに、非平衡系でのドリフト力はパワースペクトルの大きさに影響する。そのことから、2 次元イジングモデルでは幅を持つ界面は、非平衡系では高温側へのドリフト力がある拡散運動をすることを明らかにした。また、界面の位置は磁化と関係しているため、磁化のパワースペクトルは界面のダイナミクスの十分な情報を持つべきであると主張されるかもしれない。しかし、磁化の動きは、単なる拡散運動であり、パワースペクトルは ω^{-2} のふるまいしか見せない。我々はそのパワースペクトルから界面の幅の情報を引き出すことはできない。

今後の展望としては、本研究と [56] での方法の 3 次元系への拡張が考えられる。3 次元イジングモデルではラフニング転移 [48] が起こるので、スピンのパワースペクトルからラフニング転移を議論できる可能性がある。それは今後の課題である。

4 3次元イジングモデルでの界面の拡散と熱伝導

4.1 導入

界面のダイナミカルな性質は、界面成長 [54]、結晶粒界 [57]、磁壁などの様々な物理現象との関連で研究されている。ごく最近、温度勾配下の磁壁の運動は議論され、システムの高温部に動くという運動が実験的 [33]、そして確率的 Landau-Lifshitz-Gilbert 方程式のシミュレーションによって報告されている [33]。

前章で我々は、2次元イジングモデルでは、バルクに磁場をかけず、熱が流れる系での界面ダイナミクスは、高温側にドリフトのある拡散運動であることも確認した [51]。ドリフト力の強さは両端の熱浴の温度差に比例する。適切な境界条件下で、我々は界面が存在するシステムを準備し、コラム平均磁化の時系列のパワースペクトルを計算した。ステップ関数で表される界面がランダムウォークするとき、ある固定されたポジションでの関数の値のパワースペクトルは $-3/2$ のべき則を見せる [56]。界面をもつイジングモデルの平衡系では、有限の界面の幅による、いくつかの変更を伴うパワースペクトルを見せる。イジングモデルでの熱伝導をシミュレーションするために、セルオートマトンタイプのエネルギー保存ダイナミクスによるモデルを考えた。我々は、幅をもつ界面がドリフトのある拡散をする場合のパワースペクトルを解析的に計算し、得られたパワースペクトルが熱伝導系での数値計算の結果ととてもよく一致する事を確認した。3次元系に拡張するには、ラフニング転移による影響の可能性を考慮しなければならない。ラフニング転移はラフニング転移温度とよばれる、ある温度で、スムーズな表面がラフな表面に転移するという現象である。等方的な結合定数をもつ単純立方格子でのイジングモデルでは、転移温度を T_c としたとき、ラフニング転移温度は $T_R = 0.542T_c$ となる [49]。 T_R より温度が大きいときは、界面の幅は $\log L$ に比例する。なお L はシステムサイズである。それは、熱力学極限で発散する。対して、 T_R より温度が小さいときは界面の幅は L が十分大きいとき、一定となる。界面のラフさはその動きに影響しうる。いくつかの実験は結晶成長の速度がラフニング転移温度以下で急激に減少するという現象を見せる [39, 47]。それゆえ、3次元のイジングモデルの系でも界面の拡散がその温度で何らかの変化を示す可能性がある。

この章では、どのように熱伝導率と拡散係数が T_R 付近で変化するかという点と熱伝導がそれらの振る舞いにどのように影響するかという点に焦点を当てる。平衡系では、拡散係数は T_R 前後で異なる温度依存性を見せる。その温度依存性は T_R で急激に減少する。熱伝導率に関しては、結果はシミュレーションの時間発展のルールによる。したがって我々は2種類のダイナミクスを用いてそれらの結果を比較する。さらに、我々は2種類の界面の配置を考える。1つは、界面が熱流に垂直な場合で、もう1つは熱流に平行な場合である。

我々の結果で最も興味深いのは、熱流がある系で、拡散係数が温度依存性を変化させるクロスオーバー温度が、 T_R からずれるという結果である。それはラフニング転移温度が非平衡系でシフトする事を示す可能性がある。

この章は以下のように構成される。4.2 では系の設定について紹介する。4.3 では熱伝導率の数値計算結果を示し、4.4 では拡散係数の結果を紹介する。4.5 ではまとめと結論について述べる。

4.2 系の設定

本章で考える熱伝導システムは以下のように設定する。熱浴に接触している境界のスピンは Glauber ダイナミクスで時間発展させる。左側の熱浴の設定温度は T_1 、右側の熱浴の設定温度は $T_2 (\leq T_1 < T_c)$ であるとする。また、平均温度は $T = (T_1 + T_2)/2$ 、温度差は $\Delta T = T_1 - T_2$ であるとする。また、本研究ではボルツマン定数は 1 とする。その場合 3 次元イジングモデルの転移温度は $T_c \sim 4.5115$ [24] となる。

バルク部分のスピンは 2 章で紹介した KSC ダイナミクスと MC ダイナミクスによって時間発展させる。さらに、左端と右端 (x 方向) のスピンをそれぞれ $+1$ と -1 で固定すると、熱流に垂直な界面が逆向きの磁化のドメインの境界として形成される。上端と下端 (z 方向) のスピンをそれぞれ $+1$ と -1 で固定すると、熱流に平行な界面が逆向きの磁化のドメインの境界として形成される。本章ではこの両方の設定で考える。

4.3 熱伝導率

この節では、以下のように定義される熱伝導率の数値計算結果を紹介する。

$$\kappa(T) = J \frac{L_x}{\Delta T} \quad (4.1)$$

なお L_x は x 方向のシステムサイズで、 J は熱流、 $\Delta T = 0.05$ である。

初めに、我々はシステムが熱流に垂直な界面をもつ場合について考える。KSC ダイナミクスを用いるとき、温度プロファイルにおいて有限サイズ効果が確認される。図 4.1 を見ると、 L_x が小さい場合、温度勾配は一様ではなく、高温側で著しく大きくなる。 L_x が 64 またはそれより大きくなると、有限サイズ効果は消失し、一様な温度勾配が形成される。以下では、有限サイズ効果が見られないような十分大きい L_x を用いる。

図 4.2 では、界面がある場合とない場合の熱伝導率を比較する。熱伝導率は 2 次元系の場合 [51] と同様に界面がない場合の方が界面がある場合よりも大きくなる。 $T > T_R$ では、熱伝導率は両方の場合で $\kappa(T) \sim \frac{1}{T^2} \exp(-12/T)$ という温度依存性を見せる。この温度依存性は、[30] で説明されている平均場近似の解析によって導出される。界面が存在するとき、熱伝導率は T_R 以下でその温度依存性 $\exp(-12/T)/T^2$ からずれ、急激に減少する。そのような $\kappa(T)$ の温度依存性は、2 次元系では確認されない [51]。したがって、我々は T_R 付近の $\kappa(T)$ の温度依存性の変化はラフニング転移による効果であると考えられる。ここで、フラットな界面の反対側にある一組の次最近接スピンを考える。それらの符号を変化するとき、大きなエネルギー変化が必要である。したがって、そのようなスピンの交換は KS ダイナミクスによってほとんど抑制される。それゆえ、スムーズな界面を通るエネルギー輸送は $T < T_R$ ではとても困難である。これが T_R 以下で熱伝導率が急激に減少する理由である。

KSC ダイナミクスとは対照的に、図 4.3 を見ると分かるように、MC ダイナミクスでは KSC ダイナミクスのような有限サイズ効果には確認されない。一定の温度勾配は小さい系であっても実現する。

図 4.4 は MC ダイナミクスで熱伝導率の数値計算結果を示している。KSC ダイナミクスの場合と異なり、界面がない場合の熱伝導率はある場合よりも少しだけ小さくなる。さらに、熱伝導率の関数系はすべての温度で $\kappa(T) \sim \frac{1}{T^2} \exp(-12/T)$ のようになる。MC ダイナミクスでは、スピンは 1 つのボンドエネルギーの変化によってのみ符号を変える事ができる。したがって、界面のフラットさは熱伝導率には影響しないと考えられる。

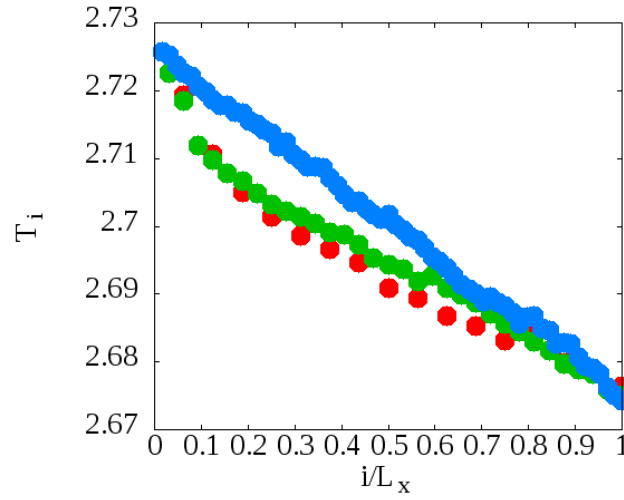


図 4.1: KSC ダイナミクスによって生成された界面を伴うシステムでの温度プロファイル。システムサイズは $L_x \times 16 \times 16$ 、 $L_x = 16, 32, 64$ であり、熱浴の温度は $T_1 = 2.725$ 、 $T_2 = 2.675$ である。赤色、緑色、青色の点は、それぞれ $L_x = 16, 32, 64$ の結果を示している。

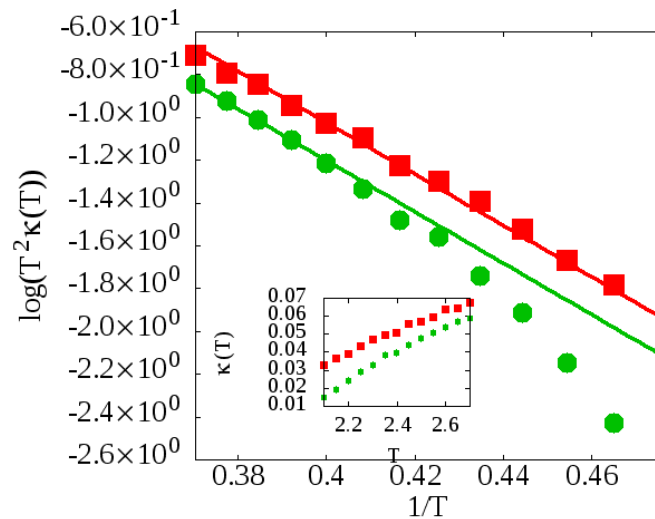


図 4.2: KSC ダイナミクスで時間発展させた場合の熱伝導率 $\kappa(T)$ 。 $\log(T^2 \kappa(T))$ vs $1/T$ の結果を図示している。インセットでは $\kappa(T)$ vs T を図示している。システムサイズは $64 \times 16 \times 16$ である。赤色と緑色の点はそれぞれ界面がない場合とある場合の結果である。赤色と緑色の線は $\kappa(T) \sim 1/T^2 \exp(-12/T)$ を示している。界面がない場合の熱伝導率はある場合よりも大きくなり、界面がある場合は T_R 以下で熱伝導率が急激に減少する。

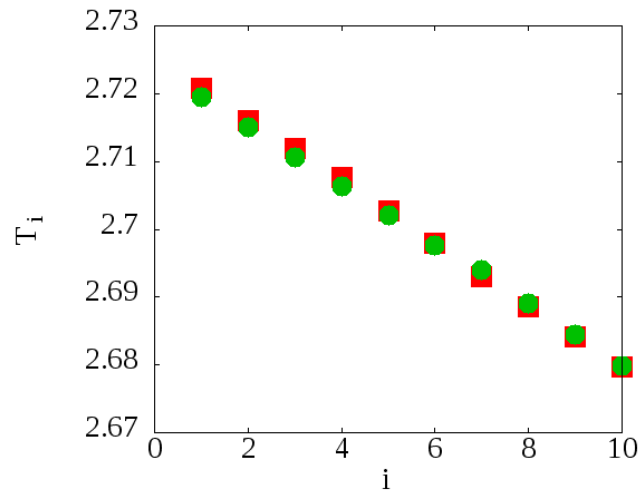


図 4.3: MC ダイナミクスで生成させた温度プロファイル。システムサイズは $10 \times 20 \times 20$ であり、熱浴の設定温度は $T_1 = 2.725$ 、 $T_2 = 2.675$ である。赤色と緑色の点はそれぞれ界面がない場合とある場合の計算結果を示している。

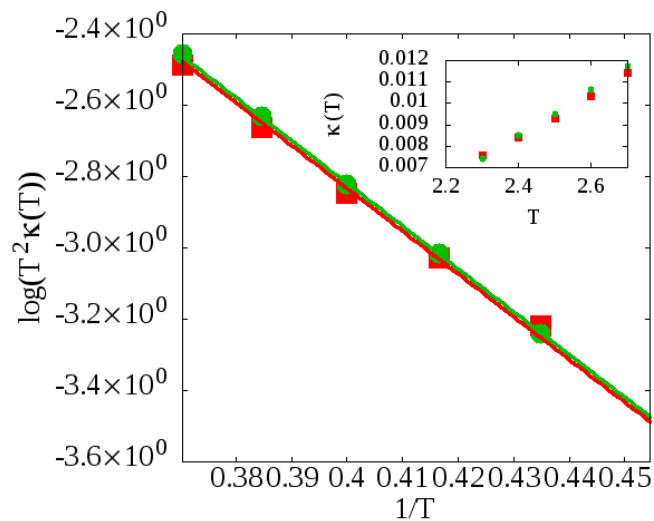


図 4.4: MC ダイナミクスで時間発展させた場合の熱伝導率 $\kappa(T)$ 。 $\log(T^2 \kappa(T))$ vs $1/T$ の結果を図示している。インセットでは $\kappa(T)$ vs T を図示している。システムサイズは $10 \times 20 \times 20$ である。赤色と緑色の点はそれぞれ界面がない場合とある場合の結果である。赤色と緑色の線は $\kappa(T) \sim 1/T^2 \exp(-12/T)$ を示している。界面がない場合の熱伝導率は、ある場合よりも小さくなる。

ここで、KSC ダイナミクスと MC ダイナミクスを用いて熱流に平行な界面をもつシステムに関して熱伝導率を考える。この場合は、どちらのダイナミクスでも著しい有限サイズ効果はない。さらに、図 4.5 や 4.6 を見ると、前述の平均場近似による温度依存性が両方のダイナミクスで適用される。この設定では界面がない領域でエネルギーが輸送できるので、この様な結果になる。

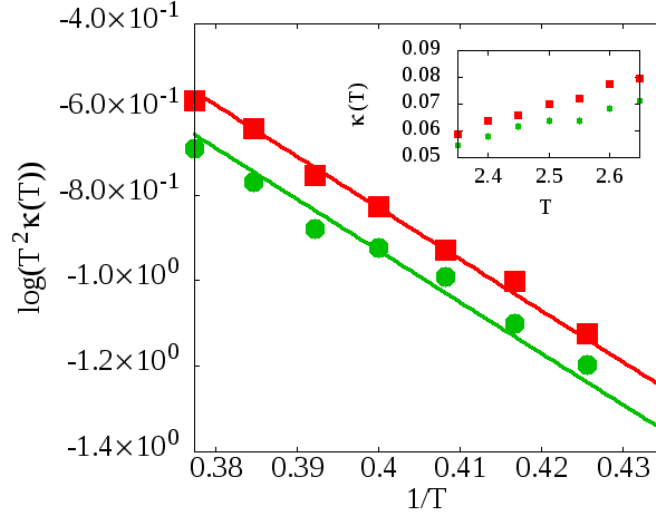


図 4.5: KSC ダイナミクスで時間発展させた場合の熱伝導率 $\kappa(T)$ 。 $\log(T^2\kappa(T))$ vs $1/T$ の結果を図示している。インセットでは $\kappa(T)$ vs T を図示している。システムサイズは $32 \times 32 \times 16$ である。赤色と緑色の点はそれぞれ界面がない場合とある場合の結果である。赤色と緑色の線は $\kappa(T) \sim 1/T^2 \exp(-12/T)$ を示している。界面がない場合の熱伝導率は、ある場合よりも大きくなる。

4.4 拡散係数

界面が熱流に垂直な場合は、2次元系の場合と同様に、界面のダイナミクスは高温側にドリフトがある正常拡散になる。我々は、界面が熱流に平行な場合の拡散係数で興味深い現象が起こることを確認した。拡散係数は以下のように見積もる。初めに、界面の位置 z を以下のような磁化 $m = (L_x L_y L_z)^{-1} \sum_{i,j,k} \sigma_{ijk}$ によって定義する。

$$z = \frac{L_z}{2}(m + 1) \quad (4.2)$$

なお、格子点を座標 (i, j, k) で定義し、それぞれの方向のシステムサイズは L_x 、 L_y 、 L_z とする。したがって、 $m = -1$ のときは界面が下側 $z = 0$ 、 $m = 1$ のときは界面が上側 $z = L_z$ に、存在していることになる。

拡散係数 D は以下のような界面位置 z の平均二乗変位によって計算される。

$$\langle (z(t) - z(0))^2 \rangle = 2Dt \quad (4.3)$$

この設定では界面に沿って温度が異なる。それゆえ、ラフさは界面の位置による。それにも関わらず、界面全体としては界面運動を表す拡散係数を得る事ができる。図 4.7 は、 $T_1 = T_2$

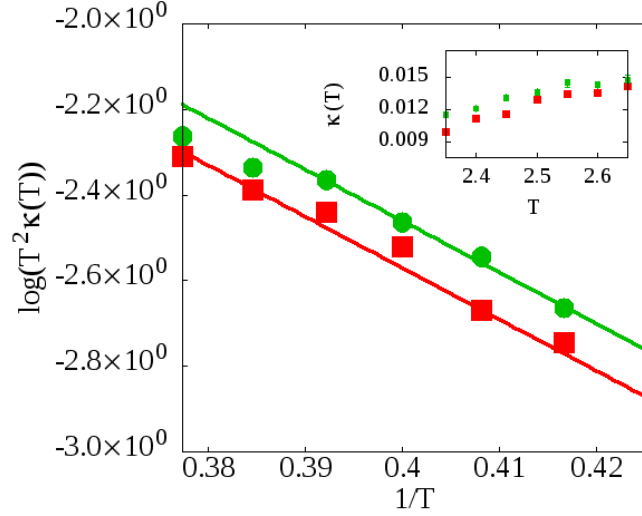


図 4.6: MC ダイナミクスで時間発展させた場合の熱伝導率 $\kappa(T)$ 。 $\log(T^2\kappa(T))$ vs $1/T$ の結果を图示している。インセットでは $\kappa(T)$ vs T を图示している。システムサイズは $64 \times 16 \times 16$ である。赤色と緑色の点はそれぞれ界面がない場合とある場合の結果である。赤色と緑色の線は $\kappa(T) \sim 1/T^2 \exp(-12/T)$ を示している。界面がない場合の熱伝導率は、ある場合よりも小さくなる。

の平衡系の場合で KSC ダイナミクスと MC ダイナミクスを用いて得られる拡散係数の対数を图示している。拡散係数の大きさは、KSC ダイナミクスの場合よりも MC ダイナミクスの方が大きくなる。しかし、拡散係数の温度依存性はどちらも同じである。つまり、拡散係数は T_R 以上で $\exp(-12/T)$ に比例し、 T_R 以下で急激に減少する。この結果はスムーズな界面の場合には、界面が動きにくくなることを示唆する。

図 4.8 は温度勾配があるシステムでの MC ダイナミクスによって得られる拡散係数の対数を图示している。高温側では、平衡系の場合のように $D \sim \exp(-12/T)$ のような温度依存性を持ち、あるクロスオーバー温度 T_X 以下で急激に減少する。 T_X は以下のような方法で見積もる。まず、高温側で $D_+ = \exp(-12/T + a)$ という関数で数値計算結果をフィットする。なお a はフィッティングパラメタである。次に、 D_+ からのずれである $\Delta = \log D_+ - \log D$ という量を計算する。図 4.9 を見ると、 $\sqrt{\Delta}$ は低温側でおおよそ $1/T$ に比例しており、 $\sqrt{\Delta} = A(1/T - B)$ でフィッティングする。なお A と B はフィッティングパラメタである。それゆえ、低温側の拡散係数は図 4.8 で見られるように、 $D_- = \exp(-12/T + a - A^2(1/T - B)^2)$ でフィッティングされる。

したがって、 $T_X = 1/B$ としてクロスオーバー温度を見積もる事ができる。そのようにして得られたクロスオーバー温度は図 4.12 で見られるように $T_X \sim T_R + 0.121\Delta T$ のような温度依存性を見せる。

平衡系では T_X と T_R の大きさはほぼ等しい。したがって、上記の結果はラフニング転移温度が熱伝導によってシフトするというを示唆している。それを確認するために、我々は [58] で定義される以下のような界面の幅によって熱伝導システムでのラフニング転移温度を見積もった。

$$W^2 = \frac{1}{(L_x L_y)^2} \sum_{i,j,k,l} \langle (h_{ij} - h_{kl})^2 \rangle \quad (4.4)$$

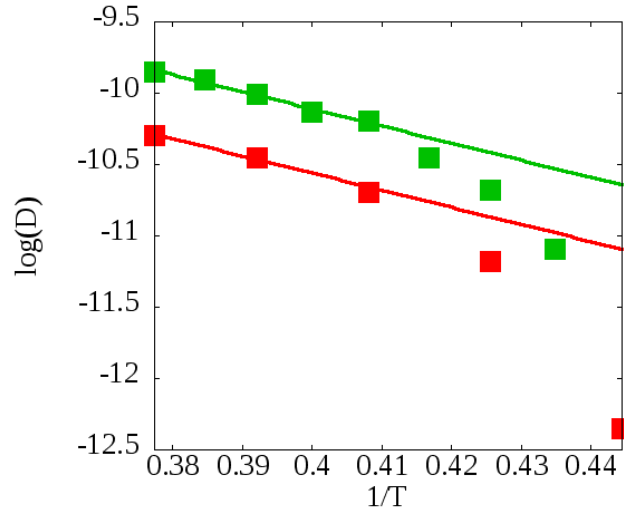


図 4.7: システムサイズが $32 \times 32 \times 16$ である系で、 $\log(D)$ を $1/T$ の関数として図示している。赤色と緑色の点はそれぞれ KSC ダイナミクスと MC ダイナミクスの結果を示している。赤色と緑色の線は $D(T) \sim \exp(-12/T)$ を示す。

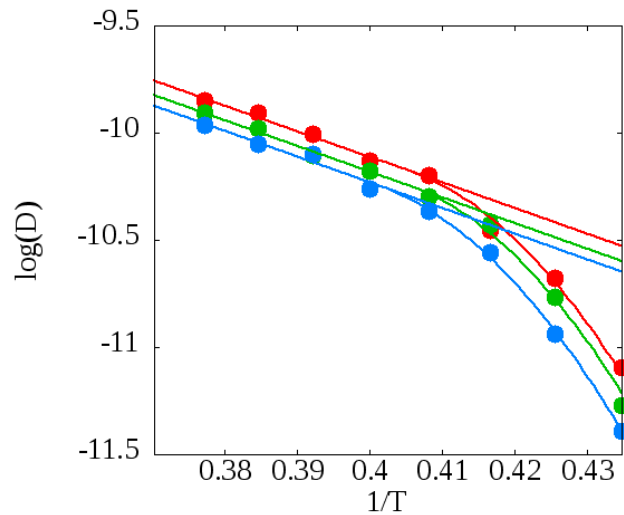


図 4.8: システムサイズが $32 \times 32 \times 16$ である系で、 $\log(D)$ を $1/T$ の関数として図示している。赤色、緑色、青色の点は $\Delta T = 0.0, 0.3, 0.5$ の結果である。赤色、緑色、青色の直線は $D_+(T) = \exp(-12/T + a)$ で、赤色、緑色、青色の曲線は $D_-(T) = \exp(-12/T + a + A^2(1/T - B)^2)$ を示す。

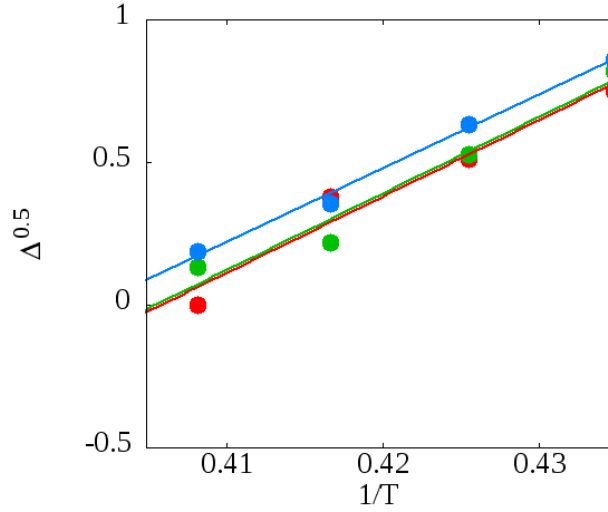


図 4.9: $\sqrt{\Delta}$ vs $1/T$ の結果を図示する。赤色、緑色、青色の点は $\Delta T = 0.0, 0.3, 0.5$ の結果である。赤色、緑色、青色の線は見積もられた曲線 $D_-(T)$ による。

なお、 $h_{ij} = 1/2 \sum_k \sigma_{ijk}$ は $(x, y) = (i, j)$ での界面の高さである。平衡系では W^2 は以下のように表されることが知られている [49]。

$$W^2 \sim (c_1 + c_2(T - T_R)^{1/2}) \log L \quad (T > T_R) \quad (4.5)$$

$$W^2 \sim c_3 + c_4(T_R - T)^{-1/2} \quad (T < T_R) \quad (4.6)$$

なお、 c_1 、 c_2 、 c_3 、 c_4 は定数である。我々は、有限の温度差 ΔT がある場合について数値的に式 (4.5) と (4.6) は、低温領域 (図 4.10) と高温領域 (図 4.11) でよく満たされていることを確認した。そこで、我々はフィッティングパラメタとして非平衡系のラフニング転移温度を得た。ラフニング転移温度は ΔT の関数として $T_R(\Delta T) \sim T_R + 0.155\Delta T$ のようになる。図 4.12 は T_X と $T_R(\Delta T)$ の間の比較であり、エラーバーの範囲でそれらは一致している事を示す。我々の数値計算の結果は熱伝導によってラフニング転移温度がシフトすることを示しているとみなせるだろう。

4.5 まとめと展望

この章では、3次元イジングモデルでの界面の拡散ダイナミクスと熱伝導現象の関係に関して数値的に研究した。特に、我々はダイナミクスと界面の配置は熱伝導と界面の動きにどのように影響するかを調べた。

まず、KSC ダイナミクスと MC ダイナミクスの二つのダイナミクスを用いて界面が熱流に平行な場合と垂直な場合の二つの場合での熱伝導を調べた。我々は界面が熱伝導率を促進するか否かはダイナミクスによることを確認した。MC ダイナミクスの場合は促進し、KSC ダイナミクスの場合は促進しない。界面が熱流に垂直な場合は、KSC ダイナミクスは T_R 以下での熱伝導率の急激な減少をもたらす。MC ダイナミクスではそのようなことは起こらない。したがって低温でのシミュレーションに用いるダイナミクスとしては、MC ダイナミクスの方が KSC ダイナミクスよりも優れていると言える。

次に、熱流に平行な界面が存在する場合について拡散係数を計算した。拡散係数はダイナ

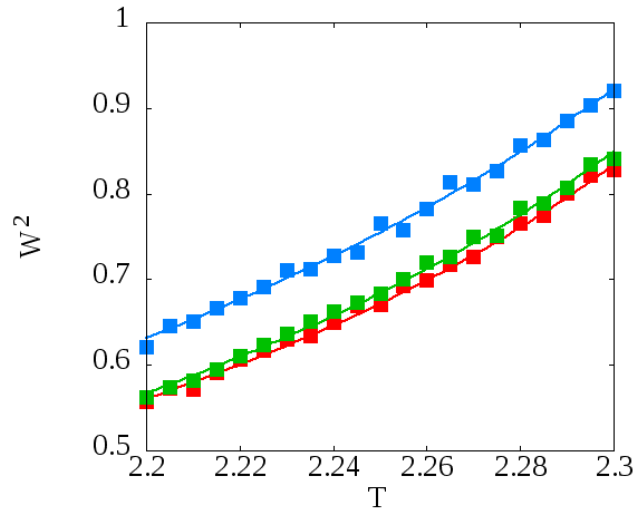


図 4.10: システムサイズ $128 \times 128 \times 20$ での低温領域 $T < T_R$ での W^2 の温度依存性。赤色、緑色、青色の点は $\Delta T = 0.0, 0.1, 0.3$ の結果を示している。赤色、緑色、青色の線は式 4.6 を表している。

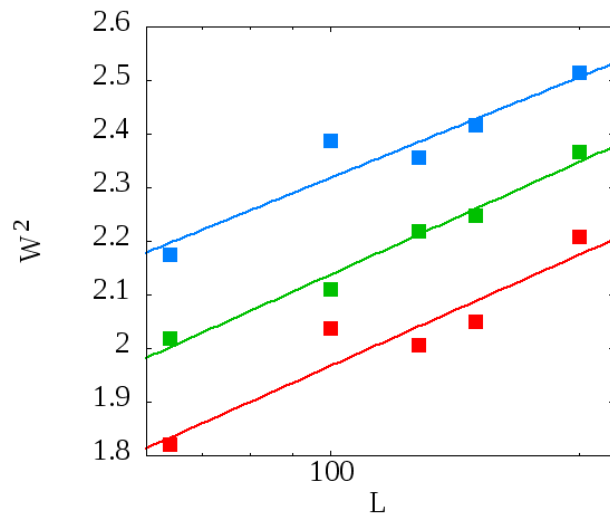


図 4.11: システムサイズ $L \times L \times 20$ かつ温度差 $\Delta T = 0.1$ の場合の高温領域 $T > T_R$ での W^2 のサイズ依存性を図示している。赤色、緑色、青色の点はそれぞれ $T = 2.55, 2.60, 2.65$ の結果である。赤色、緑色、青色の線は $W^2 \sim \log L$ を示す。

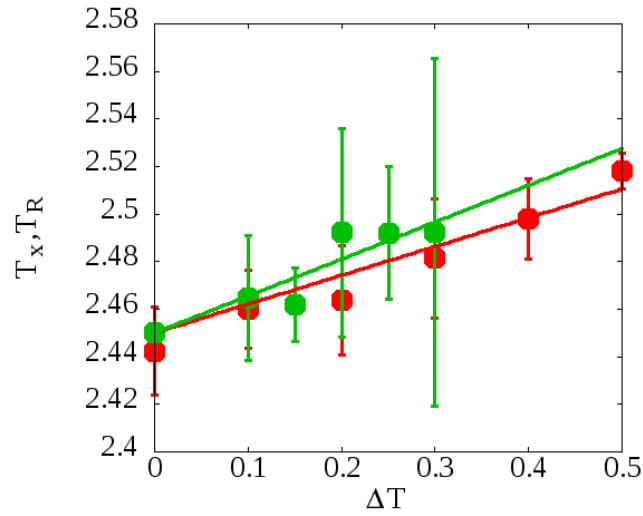


図 4.12: T_X (赤色の点) と $T_R(\Delta T)$ (緑色の点) の比較. 赤色と緑色の線はフィットした直線である。

ミクスによらず温度依存性においてクロスオーバーを見せる。我々はそのクロスオーバー温度 T_X を見積もり、平衡系ではラフニング転移温度 T_R と一致し、温度勾配がある場合はそこから高温側にずれる事を確認した。その結果は界面のラフさと運動の間のいくつかの関係を示唆するが、フィッティングに使用される関数形はその場限りのものであり、理論的な根拠があるわけではない。そこで、我々は境界の温度差 ΔT があるシステムでの界面の幅を計算し、それらの温度依存性からラフニング転移温度を見積もった。その結果、そのラフニング温度 $T_R(\Delta T)$ はエラーバーの範囲で T_X と一致するが、そのデータはかなり誤差が大きい。我々の結果は熱伝導がラフニング転移温度をシフトさせるという推測を示唆している。我々の知る限り、そのような証拠がイジングモデルでの界面ダイナミクスで確認されたのは初めてである。その推測の正しさを示すには、理論的な考察を行う必要があり、それは今後の課題である。

5 まとめと展望

5.1 各章のまとめ

最後に本研究の結果について述べている、3章と4章の内容をまとめる。

3章

3章では、まず初めに Creutz ダイナミクスの低温での問題を数値シミュレーションによって示している。そこで、我々は、Creutz ダイナミクスと KS ダイナミクスを組み合わせた Kadanoff-Swift-Creutz (KSC) ダイナミクスを提案し、低温の問題が解決する事を数値シミュレーションで確認している。続いて、2次元イジングモデルにおいて、界面の存在がフーリエ則や熱伝導率にどのように影響するかを KSC ダイナミクスを用いて調べた。その結果、界面の有無に関わらずフーリエ則は成立し、界面がない場合の熱伝導率が界面がある場合よりも熱伝導率が大きくなることが確認された。このダイナミクスで時間発展させた場合は、界面の存在は熱伝導現象を抑制するという結果になる。次に、2次元イジングモデルでの平衡系および熱伝導が起きる非平衡系における界面のダイナミクスの性質を調べた。我々は非対称単純排他過程 (ASEP) のような非平衡相転移が起きる 1次元系で既に明らかにされている、スピンの時系列のパワースペクトルと界面の拡散ダイナミクスの関係に着目した。その結果、熱伝導下では、界面のダイナミクスは高温側へのドリフト力がある正常拡散であるということが明らかになった。この結果は、磁壁が高温側に動くという実験結果に対応している。

4章

4章では、2次元イジングモデルから3次元イジングモデルに拡張し、界面の拡散ダイナミクスと熱伝導現象の関係を数値的に調べた。まず、KSC ダイナミクスと MC ダイナミクスを用いた場合の熱伝導率を計算した。また、本章では熱流に垂直な界面と平行な界面について考えている。その結果、KSC ダイナミクスで時間発展させ、熱流が界面に垂直な場合では、熱伝導率が、ラフニング転移温度以下で急激に減少するという性質が確認された。次に、平衡系および熱流のある非平衡系に関して熱伝導率を数値的に計算した。その結果、界面が熱流に平行な場合の熱伝導率を計算し、それが温度依存性においてクロスオーバーを見せることが明らかになった。具体的にはある温度以下で急激に拡散係数が減少するという温度依存性をみせる。平衡系の場合はそのクロスオーバー温度はラフニング転移温度と等しく、熱流のある非平衡系にすると、クロスオーバー温度がラフニング温度から離れ高温側にシフトする。この結果から、非平衡系ではラフニング転移温度が高温側にシフトするのではないかと予想できる。実際に、熱伝導システムにおいて界面の幅を計算し、そこからラフニング転移温度を見積もると、やはり高温側にシフトし、クロスオーバー温度とほぼ等しくなることが確認できた。

5.2 今後の課題および展望

界面のゆらぎまで反映したパワースペクトル解析

本研究の3章では、ステップ関数で表される1次元の界面を幅を考慮した界面に拡張し、その界面がドリフトのあるランダムウォークをする場合の時系列パワースペクトルを解析的に導出した。そして、その解析解とイジングモデルにおける平衡系および非平衡系のコラム平均磁化の時系列パワースペクトルの数値計算結果を比較し、幅を考慮しない場合に比べて広い範囲で一致することを確認した。この結果から、時系列パワースペクトルから界面の幅やドリフト力などといった界面の性質を読み取れることを確認した。しかし、サイト1点の時系列パワースペクトルに関しては、この解析解で再現できていない。サイト1点の時系列パワースペクトルは、コラム平均の場合よりも界面のゆらぎの影響をうけて大きい値をとる。このような時系列パワースペクトルの性質をを説明できるようにし、界面の幅やドリフト力のみではなく界面のゆらぎの情報を時系列パワースペクトルから読み取れるようにするのは今後の重要な課題であろう。界面のゆらぎまでサイト1点の時系列パワースペクトルによって理解できるようになれば、本研究でも考えた3次元系のラフニング転移に関しても時系列パワースペクトルの観点で議論できるかもしれない。

本研究の時系列パワースペクトル解析の様々な界面現象への応用

今回考えた時系列パワースペクトル解析は、イジング系だけではなく、その他のスピン系の界面ダイナミクスの解析にも応用できると考えられる。また、界面現象を伴い、その界面がダイナミカルに運動する実験等で確認できる現象(例としては結晶粒界の運動など [57])の解析にも用いることができるだろう。特に、オーバハングなどがあり界面の位置を定義するのが困難な場合にこの解析は役立つと考えられる。さらに、交通流などの社会系にも応用できる可能性がある。1次元の界面の時系列パワースペクトル解析の先行研究で考えられていた ASEP [56] は交通流のモデルとしても考えられていることもあり、今回の2次元性や非平衡性も考慮した時系列パワースペクトル解析も交通流などの理解に役立てることができ可能性がある。

3次元イジングモデルでの拡散係数の解析的な理解

本研究の4章で、平衡系においてラフニング転移温度以下で急激に拡散係数が減少し、界面が動きにくくなることを数値的に確認した。しかし、本研究での数値計算は非常に誤差が大きかったため、もう少し高精度な数値解析も行う必要があるだろう。このような温度依存性を示すメカニズムに関しては、本研究では理論的な説明はできておらず、その説明は今後の課題である。本研究で考えた KSC ダイナミクスと MC ダイナミクスのどちらのダイナミクスも界面を動かす、すなわち一つのスピンを反転させるのに貢献するのは Creutz ダイナミクス (MC ダイナミクスの場合は厳密な Creutz ダイナミクスではない) のみである。そのダイナミクスのルールから平均場近似などを用いて拡散係数の温度依存性を計算するというのは、理論的な説明の一つの方針であろう。また、ラフニング転移点以上の温度と以下の温度で、界面のゆらぎの性質はどのような違いがあるのかを界面に沿った方向のパワースペクトル解析などによって明らかにすることも、界面ダイナミクスのメカニズムの理解に役立つと考えられる。さらに、イジングモデル以外のラフニング転移を示すモデルである SOS

モデルや離散ガウスモデルなどのラフニング転移を示す数理モデルによる説明も考えられる。非平衡系のクロスオーバー温度のシフトに関して平衡系の場合と同様に、メカニズムの理論的な説明が必要である。また、今回の数値計算によって得られたクロスオーバー温度は非常に誤差が大きかったため、より高度な数値解析を行う必要がある。

非平衡ラフニング転移の更なる研究

本研究では、非平衡系の拡散係数の温度依存性のクロスオーバー温度が高温側にシフトする事との対応として、非平衡系のラフニング転移温度を数値的に見積もり、クロスオーバー温度と誤差の範囲で等しくなることを確認した。しかし、本研究で用いた KSC ダイナミクスや MC ダイナミクスは、これまで界面の幅を数値的に計算する際に用いられてきたクラスターアルゴリズムなどに比べ、非常に長いシミュレーション時間が必要となることもあり、多くのサンプルをとることができなかった。そのため、非平衡ラフニング転移温度の誤差が非常に大きくなってしまった。高精度な計算による数値の見積もりは今後の課題である。また、今回は同様の理由で大きな系の数値計算を行うことができなかったため、十分大きなシステムサイズの計算も必要である。さらに、本研究では熱伝導によって温度勾配が形成される場合を考え、Glauber ダイナミクスのような確率的な時間発展ダイナミクスによって、温度勾配をつけた場合との比較なども考え、熱流の影響などを調べる事も重要であると考え。拡散係数の場合と同様にイジングモデル以外のラフニング転移を示すモデルである SOS モデルや離散ガウスモデルなどのラフニング転移を示す数理モデルでの非平衡ラフニング転移の議論も行うべきであると考え。

謝辞

本論文の作成にあたり、多くの方々にお世話になりました。

指導教員の武末真二氏には、非常にお世話になりました。修士課程と博士課程を通して、研究の進め方や研究への向き合い方のみならず、論文等の執筆の仕方やプレゼンテーションなどの発表方法などまで、指導していただきました。また、研究テーマに関する様々な論文や書籍を紹介していただく事で、研究テーマの背景などの知識を円滑に身につけることができました。博士論文を執筆する事ができるまでの研究成果を出す事ができたのは、氏の懇切丁寧な指導のおかげです。心より感謝申し上げます。

研究を進めるにあたって、特に以下の方々にお世話になりました。大阪大学大学院の湯川諭氏には研究テーマに関する先行研究のプレプリントを提供していただくなど、大変お世話になりました。氏に提供していただいたプレプリントは、私の研究テーマの元となる非常に重要なものでした。またそれを提供していただくのみならず、日本物理学会等でお会いした際に非常に有益な様々なアドバイスを頂くなど、大変お世話になりました。非線形動力学研究室の佐々真一氏には、お忙しい中議論の場を設けていただき、そこで有益なコメントを頂いたり、私の研究に関連する内容のノートを提供していただくなど大変お世話になりました。この場を借りて感謝の意を表します。

修士課程および博士課程の5年間の学生生活を送るにあたり、非平衡物理学研究室所属の井上篤生氏、OBの金泰三（三は火へんに華）氏、深津卓弥氏、元研修員の光藤哲也氏にお世話になりました。また他研究室所属の同期である中野裕義氏、蛭田佳樹氏には、研究に関する事のみならず様々な事に関して相談に乗っていただきました。その他にも、多くの人に支えられることで大変有意義な5年間を過ごすことができました。この場を借りて感謝の意を表します。最後に、研究に理解を示し様々な手助けをしてくれた両親に感謝します。

本研究の4章の数値計算は湯川基礎物理学研究所の計算機システムを利用し、行われました。

Appendix

境界条件 (3.25) での式 (3.24) を解く。

その結果、遷移確率は以下のように得られる。

$$P(x, t|x_0, 0) = \left(\frac{K e^{-KL}}{\sinh(KL)} \right)^2 \exp(2K(x + x_0)) \quad (\text{A.1})$$

$$+ \sum_n \frac{2}{L} \exp(-k_n t) \frac{\exp(K(x + x_0)) e^{-KL}}{\alpha_n^2 + K^2} (\alpha_n \cos \alpha_n x_0 + K \sin \alpha_n x_0) (\alpha_n \cos \alpha_n x + K \sin \alpha_n x)$$

なお、 α_n と k_n は以下のように定義される。

$$\alpha_n = \frac{n\pi}{L} \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (\text{A.2})$$

$$k_n = D(\alpha_n^2 + K^2) \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (\text{A.3})$$

界面の幅 L' を持つコラム平均磁化のプロファイルである式 (3.17) を用いて、自己相関関数 $\delta s_y(t) = s_y(t) - \langle s_y \rangle_{st}$ は以下ようになる。

$$\begin{aligned} \langle \delta s_y(t) \delta s_y(0) \rangle = & \sum_n \left(\frac{2}{L^2} \right) \left(\frac{2}{L'} \right)^2 \frac{e^{2Ky}}{(\alpha_n^2 + K^2)^3} \frac{KL}{\sinh(KL)} \exp(-k_n t) \left\{ \frac{1 + (-1)^{n+1} \cos(2\alpha_n y)}{2} (K \cos(\alpha_n \frac{L'}{2}) \sin(K \frac{L'}{2})) \right. \\ & + \alpha_n \sin(\alpha_n \frac{L'}{2}) \cos(K \frac{L'}{2})^2 + \frac{1 + (-1)^n \cos(2\alpha y)}{2} (\alpha_n \cos(\alpha_n \frac{L'}{2}) \sin(K \frac{L'}{2})) \\ & - K \sin(\alpha_n \frac{L'}{2}) \cos(K \frac{L'}{2})^2 + 2 \sin(\alpha_n y) \cos(\alpha_n y) (K \cos(\alpha_n \frac{L'}{2}) \sin(K \frac{L'}{2})) \\ & \left. + \alpha_n \sin(\alpha_n \frac{L'}{2}) \cos(K \frac{L'}{2}) (\alpha_n \cos(\alpha_n \frac{L'}{2}) \sin(K \frac{L'}{2}) - K \sin(\alpha_n \frac{L'}{2}) \cos(K \frac{L'}{2})) \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

$y = L/2$ とし、パワースペクトルを得るためにフーリエ変換する。

$$I(\omega) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2k_n}{k_n^2 + \omega^2} \frac{1}{L^2} \left(\frac{2}{L'} \right)^2 \frac{KL}{\sinh(KL)} \frac{1}{(\alpha_n^2 + K^2)^2} \{ \sinh^2(K \frac{L'}{2}) + \sin^2(\alpha_n \frac{L'}{2}) \} \quad (\text{A.5})$$

L が大きいとき、 n での和を積分に置き換えられる。

$$I(\omega) \sim \frac{1}{\pi L} \int_0^{\infty} dx \frac{2D}{D^2(x^2 + K^2)^2 + \omega^2} \frac{KL}{\sinh(KL)} \frac{1}{(x^2 + K^2)} \{ \sinh^2(K \frac{L'}{2}) + \sin^2(\frac{L'}{2} x) \} \quad (\text{A.6})$$

留数計算で以下のように求められる。

$$\begin{aligned}
I(\omega) \sim & \frac{2}{DLL'^2} \frac{KL}{\sinh(KL)} \left(\frac{\omega}{D}\right)^{-2} \frac{\sqrt{\sqrt{(K^2)^2 + (\frac{\omega}{D})^2} + K^2}}{\sqrt{(K^2)^2 + (\frac{\omega}{D})^2}} \left[-\frac{1}{\sqrt{2}} \cosh(KL') \right. \\
& + \exp\left(-L' \sqrt{\frac{\sqrt{(K^2)^2 + (\frac{\omega}{D})^2} - K^2}{2}}\right) \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} \cos\left(L' \sqrt{\frac{\sqrt{(K^2)^2 + (\frac{\omega}{D})^2} - K^2}{2}}\right) \right. \\
& \left. \left. - \left(\frac{\omega}{D}\right)^{-1} \left(\sqrt{(K^2)^2 + (\frac{\omega}{D})^2} - K^2\right) \sin\left(L' \sqrt{\frac{\sqrt{(K^2)^2 + (\frac{\omega}{D})^2} - K^2}{2}}\right) \right\} \right. \\
& \left. + \left(\frac{\sqrt{\sqrt{(K^2)^2 + (\frac{\omega}{D})^2} + K^2}}{\sqrt{(K^2)^2 + (\frac{\omega}{D})^2}}\right)^{-1} L' \left(\frac{\sinh(KL')}{KL'}\right) \right]
\end{aligned} \tag{A.7}$$

参考文献

- [1] S. Lepri, R. Livi, and A. Politi, *Physics Reports*, **377**(1) (2003).
- [2] C. W. Chang, D. Okawa, H. Garcia, A. Majumdar and A. Zettl, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 075903 (2008).
- [3] C. W. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods* (Springer, 2004).
- [4] Z. Rieder, J. L. Lebowitz, and E. Lieb, *J. Math. Phys.* **8**, 1073 (1967).
- [5] S. Lepri, R. Livi and A Politi, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1896 (1997).
- [6] T. Mai, A. Dhar and O. Narayan, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 184301 (2007).
- [7] H. Spohn, *J. Stat. Phys.* **154**, 1191 1227 (2014).
- [8] A. Dhar, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5882 (2001).
- [9] K. Aoki and D. Kusnezov, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 4029 (2001).
- [10] O. Narayan and S. Ramaswamy, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 200601 (2002).
- [11] K. Saito and A. Dhar, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 040601 (2010)
- [12] A. V. Sologubenko, K. Giannò, H. R. Ott, A. Vietkine, and A. Revcolevschi, *Phys. Rev. B* **64**, 054412 (2001).
- [13] T. Kawamata, N. Takahashi, T. Adachi, T. Noji ,K. Kudo , N. Kobayashi and Y.Koike, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 034607 (2008).
- [14] D. L. Huber and J. S. Semura, *Phys. Rev.* **182**, 602 (1969).
- [15] K. Sakai and A. Klümper, *J. Phys. A: Math. Gen.* **36**, 11617 (2003).
- [16] J. Wu and M. Berciu, *Phys. Rev. B* **83**, 214416 (2011).
- [17] T. Kawamata, N. Kaneko, M. Uesaka, M. Sato and Y. Koike, *J. Phys.: Conf. Series* **200**, 022023 (2010).
- [18] L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).
- [19] B. Kaufman, *Phys. Rev.* **76**, 1232 (1949).

- [20] Y. Nambu, Prog. Theor. Phys. **5**, 1 (1950).
- [21] M. Kac and J. C. Ward, Phys. Rev. **88**, 1332 (1952).
- [22] R. B. Potts, J.C. Ward, Prog. Theor. Phys. (Kyoto), **13**, 38 (1955).
- [23] T. D. Schultz, D. C. Mattis, and E. H. Lieb, Rev. Mod. Phys. **36**, 856 (1964).
- [24] A. L. Talapov and H. W. J. Blöte, J. Phys. A: Math. Gen. **29** 5727 (1996).
- [25] K. Binder and D. W. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics* (Springer, 2010).
- [26] R. J. Glauber, J. Math. Phys. **4**, 294 (1963).
- [27] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
- [28] K. Kawasaki, Phys. Rev., **145**, 224 (1965).
- [29] M. Creutz, Ann. Phys., **167**, 62 (1986).
- [30] K. Saito, S. Takesue, and S. Miyashita, Phys. Rev. E **59**, 2783 (1999).
- [31] G. Y. Vichniac, Physica D, **10**, 96 (1984).
- [32] W. Jiang, P. Upadhyaya, Y. Fan, J. Zhao, M. Wang, L. T. Chang, M. Lang, K. L. Wong, M. Lewis, Y. T. Lin, J. Tang, S. Cherepov, X. Zhou, Y. Tserkovnyak, R. N. Schwartz, and K. L. Wang, Phys. Rev. Lett. **110**, 177202 (2013)
- [33] D. Hinzke and U. Nowak, Phys. Rev. Lett. **107**, 027205 (2011)
- [34] S. Selzer, U. Atxitia, U. Ritzmann, D. Hinzke, and U. Nowak, Phys. Rev. Lett. **117**, 107201 (2016)
- [35] Z. Yan, Z. Chen, M. Qin, X. Lu, X. Gao, and J. Liu, Phys. Rev. B. **97**, 054308 (2018)
- [36] P. Yan, X. S. Wang, and X. R. Wang, Phys. Rev. Lett. **107**, 177207 (2011)
- [37] K. Harano and S. Yukawa, preprint.
- [38] M. Kardar, G. Parisi, and Y. -C. Zhang, Phys. Rev. Lett, **56**, 889 (1986)

- [39] A. -L. Barabási and H. E. Stanley, *Fractal concepts in surface growth* (Cambridge University Press, 1995)
- [40] P. Devillard and H. Spohn, *Europhys. Lett.*, **17(2)**, 113 (1992).
- [41] P. Devillard, *J. Stat. Phys.* **62**, 443 (1991).
- [42] K. A. Takeuchi, *Physica A* 504, 77 (2018).
- [43] D. Stauffer and D. P. Landau, *Phys. Rev. B* 39, 9650 (1989).
- [44] J. Stecki, A. Maciolek, and K. Olausen, *Phys. Rev. B* 49, 1092 (1994).
- [45] A. Ciach, *Phys. Rev. B* 34, 1932 (1986).
- [46] A. Ciach and J. Stecki, *J. Phys. A: Math. Gen.* 20 5619 (1987).
- [47] A. V. Babkin, D. B. Kopeliovich, and A. Ya. Parshin, *Sov. Phys. JETP* **62** (6) (1985)
- [48] M. Hasenbusch, S. Meyer, and M. Pütz, *J.Stat.Phys.*, 85, 383 (1996).
- [49] K. K. Mon, D. P. Landau and D. Stauffer, *Phys. Rev. B* 42 (1990) 545.
- [50] M. Casartelli, N. Macellari, and A. Vezzani, *Eur. Phys. J. B* **56**, 149 (2007).
- [51] Y. Masumoto and S. Takesue, *Phys. Rev. E*, **97**, 052141 (2018)
- [52] E. Agliari, M. Casartelli, and A. Vezzani, *J. Stat. Mech.* (2009) P07041.
- [53] Y. Masumoto and S. Takesue, submitted for publication
- [54] J. P. Sethna, *Statistical Mechanics: Entropy, Order Parameters, and Complexity* (Oxford University Press, Oxford, 2006)
- [55] B. Derrida, *Phys. Rep.* **301**, 65 (1998).
- [56] S. Takesue, T. Mitsudo and H. Hayakawa, *Phys. Rev. E* **68**, 015103(R) (2003).
- [57] T. O. E. Skinner, D. G. A. L. Aarts, and R. P. A. Dullens, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 168301 (2010).
- [58] M. Hasenbusch, M. Marcu, and K. Pinn, *Physica A* **208**, 124 (1994).