

縮退した系のドメイン成長

九大・理・物理 太田成俊 太田隆夫 川崎恭治

非保存一次相転移系で、安定相が、 P 重の縮退をもつときの、核生成・成長過程における、Volume FractionやCorrelation Function等をexactに計算する方法について報告した。非保存一次相転移系をクエンチすると、高温相(これ以後"0"相と名づける)が、準安定化し、ある時刻、ある点に、臨界半径をこえた安定相が、ある確率で核生成する。このときできた安定相として P 種を考へる。それらは互いに縮退しており、 P -states Potts modelと同様に、いわゆる P simplex という対称性をもっている。以下ではこれらの安定相に、内部の状態に対応して"1"~" P "の"色"をつけ区別することにする。時空間のさまざまな点に核生成し成長してゆくドメインは、異なる起源(生成中心)から出たドメインとぶつかったとき、互いの色が同じであればそれらは一体化し、それら2つのDomain Boundaryは存在しない。また互いの色が異なれば、それらのDomain Boundaryは、ぶつかった場所に停ったままでいるとする。空間は時々刻々、そのパターンをかえ、 $t \rightarrow \infty$ では、生成中心の分布により、一意的にきまるパターンをもち、そのような系について、ある色のVolume Fractionは、どのような時間依存性を示すか、あるいは、任意の2点間の相関はどうであるかを議論するのは実験的にも重要なことである。

これらの系では、 P とともに2つの物理量が本質的な役割を果たす。すなわち、核生成率 $I(t)$ と、"0"相中でのGrainの形態 $R(t)$ である。($t=0$ で、 $R=0$ は核生成したとする)これ以下の計算は任意の $I(t)$, $R(t)$ に応用できるが、計算をわかりやすくするために、いわゆる P -states Johnson-Mehl (pJM) モデルに話をしぼる。すなわち $I(t) = I(-\text{一定})$ $R(t) = \nu t$ (等方的) である。ここででてくる2つの定数 I, ν により、この系に特徴的な距離 ξ と時間 τ が決定される。 $\xi = (I\nu^{-1})^{-1/(d+1)}$, $\tau = (I\nu^d)^{-1/(d+1)}$ 以下で使う ξ, τ は、実際の長さや時間を、それぞれ ξ と τ でスケールした無次元量である。($I = \nu = 1$ としたものと同一))

次の関数を定義しよう。

$$g_i(\underline{r}, t) = \begin{cases} 1 & : \text{時空}(\underline{r}, t) \text{が } i \text{相領域に含まれる} \\ 0 & : \text{ } \end{cases} \quad (1)$$

この関数を用いると、volume Fraction や相関関数はたやすく計算される。"i"相のVolume Fraction は、 $\phi_i = \langle g_i(\underline{r}, t) \rangle$ で定義されるが、 P simplex 対称性や、恒等式

$$\sum_{i=0}^P g_i(\underline{r}, t) = 1 \quad (2)$$

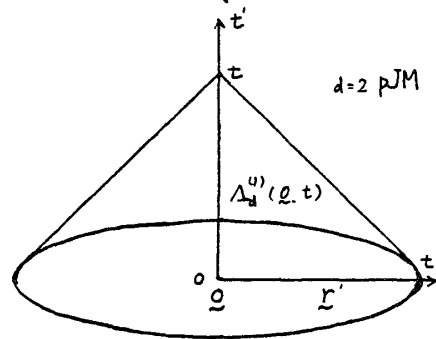
を用いると、本質的な量は、 $\phi_0(t)$ と、 $\phi_1(t)$ であり、それらには、 $\phi_1(t) = (1 - \phi_0(t))/P$ の関係があることがわかる。また、相関関数 $\langle g_i(\underline{r}, t) g_j(\underline{r}', t) \rangle$ についても、 P simplex であることから、 $G_0(\underline{r}-\underline{r}', t) = \langle g_0(\underline{r}, t) g_0(\underline{r}', t) \rangle$, $G_1(\underline{r}-\underline{r}', t) = \langle g_1(\underline{r}, t) g_1(\underline{r}', t) \rangle$, $H_0(\underline{r}-\underline{r}', t) = \langle g_0(\underline{r}, t) g_1(\underline{r}', t) \rangle$, $H_1(\underline{r}-\underline{r}', t) = \langle g_1(\underline{r}, t) g_2(\underline{r}', t) \rangle$ の4つが、本質的

であり、さらに恒等式(2)Eを用いると、 $H_0(r, t) = [\phi_0(t) - G_0(r, t)]/P$, $H_1(r, t) = [C_0(r, t) - PG_1(r, t)]/P(P-1)$, $C_0(r, t) = 1 - 2\phi_0(t) + G_0(r, t)$ なる関係式を得るため、2点相関関数で必要な関数は、“0”相のVolume Fraction $\phi_0(t)$ 、“0”相同志の相関関数 $G_0(r, t)$ 、“1”相同志の相関関数 $G_1(r, t)$ の3つであることがわかる。(P>1の時)。一般に、これらの方法は、n点相関関数においても役立つ。P simplex系において L_n^P のn点相関関数が独立である。 L_n^P は、非負整数のset $\{m_i\}$ のすべての可能な組に対し、

$$L_n^P = \sum_{\{m_i\}} \theta(m_1 \geq m_2 \geq m_3 \dots \geq m_p) \theta\left(\sum_{i=1}^p m_i = n\right) \quad (3)$$

で与えられる。ここで $\theta(x)$ は論理関数であり、 x が真のとき1、偽のとき0の値をとる。 $n < P$ のとき、 L_n^P の $n = 1, 2, \dots$ の値は、1, 2, 3, 5, 7, 11, 15, ...となる。(以上のことが、pJMモデルに限らずに成り立つことは重要である。)

“0”相のVolume Fractionを考之よう。 $\phi_0(t)$ はその定義より時刻 t において点 o が依然として“0”相である確率である。ここで、 $d+1$ 次元の円錐を考之よう。座標系 (r', t') において、 $t' = t_1$ ($0 \leq t_1 \leq t$) における断面が、半径 $t-t_1$ の d 次元球であるとする。この円錐の内側に1つでも核生成が起きると、時刻 t において点 o は決して“0”相であることはできない。右図は $d=2$ の場合のこの“因果円錐”を示している。

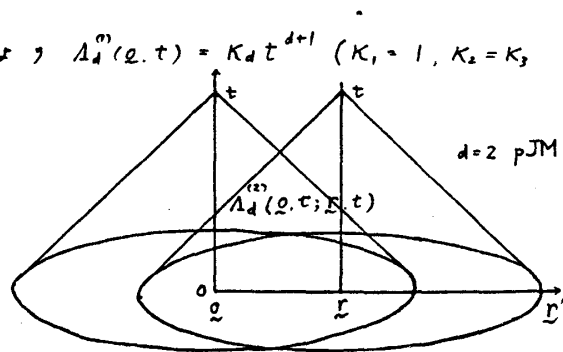


この因果円錐の体積を $\Lambda_d^{(1)}(o, t)$ とすると、密度 $1 (= I)$ で生成中心となる点をばらまいたときに、この因果円錐の中に1つも点が入らなければ、点 o は、時刻 t で、依然として“0”相のままである。Poisson分布の性質より、求める確率は、

$$\phi_0(t) = \exp[-\Lambda_d^{(1)}(o, t)] \quad (4)$$

となる。pJMモデルでは、単なる幾何学的計算より $\Lambda_d^{(1)}(o, t) = K_d t^{d+1}$ ($K_1 = 1, K_2 = K_3 = \pi/3$) となる。

次に“0”相同志の相関関数を考之る。論理の進め方は上と同様で、 $G_0(r, t)$ は時刻 t において、点 o と点 r が依然としてともに“0”相である確率であり、 (o, t) と (r, t) の2点と因果的である。 $0 \leq t_1 \leq t$ の2つの因果円錐を考之る。その体積 $\Lambda_d^{(2)}(o, t; r, t)$ において、この中に1つも核生成が起らなければよい。よってPoisson分布より、



$$G_0(r, t) = \exp[-\Lambda_d^{(2)}(o, t; r, t)] \quad (5)$$

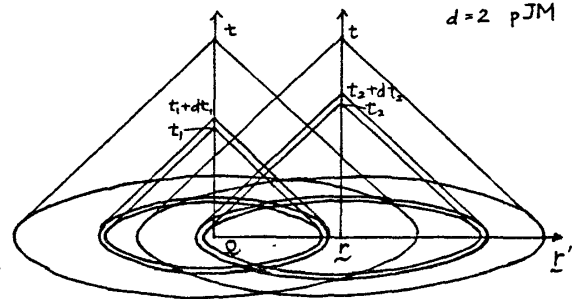
を得る。実際 $r = o$ のとき、 $\Lambda_d^{(2)}(o, t; o, t) = \Lambda_d^{(1)}(o, t)$, $r \geq 2t$ のとき、 $\Lambda_d^{(2)}(o, t; r, t) = 2\Lambda_d^{(1)}(o, t)$ より、 $G_0(o, t) = \phi_0(t)$, $G_0(r, t) = \phi_0^2(t)$ ($r \geq 2t$) という境界条件を満足することがわかる。pJMモデルでは、 $\Lambda_d^{(2)}(o, t; r, t)$ は、

$$\Lambda_d^{(2)}(\rho, t; \rho, t) = \begin{cases} K_1(t^2 + tr - r^2/4) & (d=1) \\ 2K_2 t^3 - \frac{2}{3} t^3 \cos^{-1}\left(\frac{r}{2t}\right) + \frac{1}{3} tr^2 \sqrt{\frac{4t^2}{r^2} - 1} - \frac{r^3}{12} \log\left[\frac{2t}{r} + \sqrt{\frac{4t^2}{r^2} - 1}\right] & (d=2) \\ K_3(t^4 + rt^3 - tr^3/4 + r^4/16) & (d=3) \end{cases}$$

$$\text{for } 0 \leq r \leq 2t. \quad (6)$$

さらに、"1"相同志の相関関数を考之よう。

$G_1(\rho, t)$ は、時刻 t において、 ρ 点と ρ 点があるときも"1"相である確率である。 $G_0(\rho, t)$ の時と同様に、 $r > 2t$ であれば、2点 (ρ, t) と (ρ, t) の真因果円錐は重ならないので、因果的に独立であるので、 $G_1(\rho, t) = \rho_1^2(t)$ となる。 $0 \leq r \leq 2t$ において、次のように考之る。



すなわち、 ρ 点は時刻 $t_1 \sim t_1 + dt_1$ において、 ρ 点は時刻 $t_2 \sim t_2 + dt_2$ において、"はじめで"

"1"相になることをする。これは2つの可能性があり、①異なる2つの生成中心から出た"1"領域が、点 ρ と点 ρ をそれぞれ包含する。②1つの生成中心から出た"1"領域が、点 ρ と点 ρ をともに包含する。①の場合、 ρ 点が t_1 以前、 ρ 点が t_2 以前に存在するならば、 $\exp[-\Lambda_d^{(2)}(\rho, t_1; \rho, t_2)]$ なる確率が必要である。ここで $\Lambda_d^{(2)}(\rho, t_1; \rho, t_2)$ とは (ρ, t_1) と (ρ, t_2) の2点の因果円錐の体積である。さらに $[t_1 - dt_1, t_1 + dt_1]$ で ρ 点があり、 $[t_2 - dt_2, t_2 + dt_2]$ で ρ 点があり、"1"相になるためには、円錐殻 $dt_1 \frac{\partial^2 \Lambda_d^{(2)}(\rho, t_1; \rho, t_2)}{\partial t_1^2}$ 中に1つの"1"相が、円錐殻 $dt_2 \frac{\partial^2 \Lambda_d^{(2)}(\rho, t_1; \rho, t_2)}{\partial t_2^2}$ 中に1つの"1"相が、核生成する必要がある。"1"相が2つある nucleation rate は $\frac{1}{p}$ であるので①の確率は、

$$dt_1 \left(\frac{1}{p} \frac{\partial^2 \Lambda_d^{(2)}(\rho, t_1; \rho, t_2)}{\partial t_1^2} \right) dt_2 \left(\frac{1}{p} \frac{\partial^2 \Lambda_d^{(2)}(\rho, t_1; \rho, t_2)}{\partial t_2^2} \right) \exp(-\Lambda_d^{(2)}(\rho, t_1; \rho, t_2)) \quad (7)$$

である。②の場合、 $\exp(-\Lambda_d^{(2)})$ の上にさらに1つの円錐殻 $-dt_1 dt_2 \frac{\partial^2 \Lambda_d^{(2)}(\rho, t_1; \rho, t_2)}{\partial t_1 \partial t_2}$ 中に1つ2つあることが必要十分である。②の確率は、

$$-dt_1 dt_2 \left(\frac{1}{p} \frac{\partial^2 \Lambda_d^{(2)}(\rho, t_1; \rho, t_2)}{\partial t_1 \partial t_2} \right) \exp(-\Lambda_d^{(2)}(\rho, t_1; \rho, t_2)) \quad (8)$$

で与えられる。 t_1, t_2 をそれぞれ $[0, t]$ で積分すると、 $G_1(\rho, t)$ が得られる。

$$G_1(\rho, t) = \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \left[\frac{1}{p^2} \left(\frac{\partial^2 \Lambda_d^{(2)}}{\partial t_1^2} \right) \left(\frac{\partial^2 \Lambda_d^{(2)}}{\partial t_2^2} \right) - \frac{1}{p} \left(\frac{\partial^2 \Lambda_d^{(2)}}{\partial t_1 \partial t_2} \right) \right] \exp(-\Lambda_d^{(2)}) \quad (9)$$

$$= \frac{1}{p^2} C_0(\rho, t) + \frac{p-1}{p^2} C_1(\rho, t) \quad (10)$$

$$C_1(\rho, t) = \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \left[-\frac{\partial^2 \Lambda_d^{(2)}}{\partial t_1 \partial t_2} \right] \exp(-\Lambda_d^{(2)}) \quad (11)$$

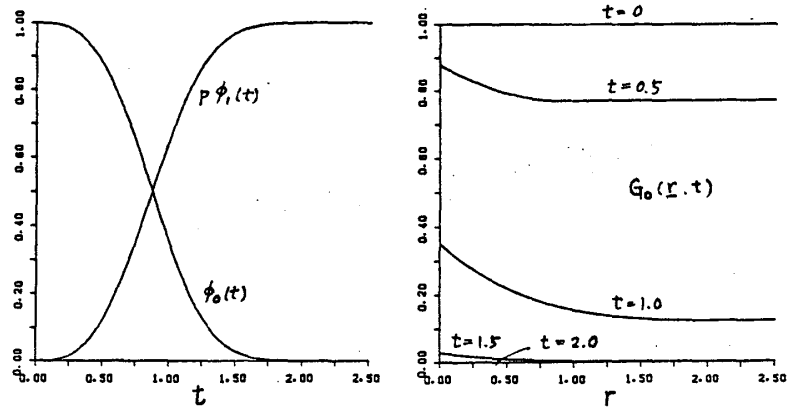
$C_0(\rho, t)$ は前に定義したが、それは $p=1$ のときの"1"相相関関数にはかたがたない。一方、 $C_1(\rho, t)$ は、 $p=\infty$ のときの相関関数にはかたがたない。(PEかけると) 任意の p に対して、相関関数、 $G_1(\rho, t)$ は、それらの単なる線形和であるということがわかる。

この方法により、任意の n 点相関関数を求めることができる。すなわち、

$$\langle g_{k_1}(r_1, t_1) g_{k_2}(r_2, t_2) \dots g_{k_n}(r_n, t_n) \rangle = \left[\prod_{k=1}^n \int_0^{t_k} dt'_k \right] \left[\prod_{k=1}^{m_0} \delta(t'_k - t_k + 0) \right] \exp(-\Lambda_d^{(m)}) \times \left[\prod_{i=1}^p \left\{ \exp\left(\frac{\Lambda_d^{(m)}}{p}\right) \left(\prod_{k=1}^{m_i} \left(-\frac{\partial}{\partial t'_{i,k}}\right) \right) \exp\left(-\frac{\Lambda_d^{(m)}}{p}\right) \right\} \right] \quad (12)$$

ここで、 $m_j = \sum_{i=1}^n \delta_{j,k_i}$, $l_i = \sum_{j=0}^{i-1} m_j$, $\Lambda_d^{(m)} = \Lambda_d^{(m)}(r_1, t'_1; r_2, t'_2; \dots; r_n, t'_n)$ である。 $\Lambda_d^{(m)}$ は n 点 (r_i, t'_i) に対する因果円錐の総体積である。これは単なる幾何学的計算により与えられる量である。

右図に、 $d=2$ を与える。pJM model の Volume Fraction $\phi_0(t)$, Correlation Function, $G_0(r, t)$, $C_0(r, t)$, $C_1(r, t)$ を示した。

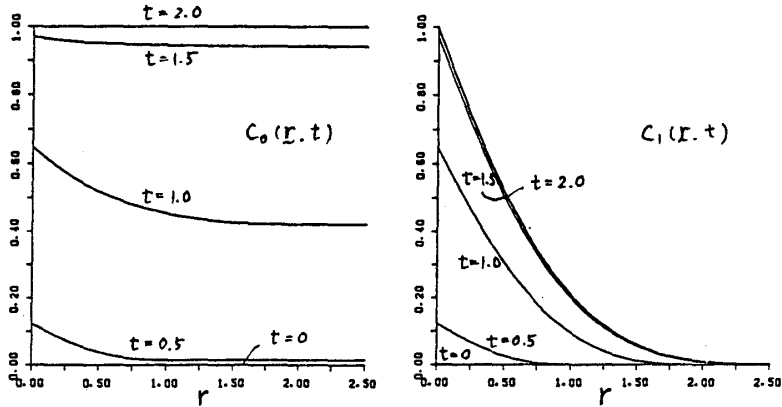


以上の方法は、pJMに限らず、次のような系ならば適用できる。

I. $1 \leq p < \infty$ である。

II. "0"領域中では、 i 種の核は形 $R(t)$ で単調増加的に大きくなる。 $R(t)$ は i によらないが、等方的でなくともよい。

III. 2つのドメインがぶつかるとき、同種であれば一体化し、異種であればぶつかった場所で境界は停ったまゝでいる。



— $d=2$ p-states Johnson-Mehl model —

IV. 核生成率 $I(t)$ は、時刻 t の関数であり、"0"相内には、無相関に核生成する。

II, IV の拡張に対し、わけわけは、今まで求めてきた式に対して何の変形も要しない。ただし単に $\Lambda_d^{(m)}(r_1, t'_1; r_2, t'_2; \dots; r_n, t'_n)$ の定義を、 $(r_1, t'_1), (r_2, t'_2), \dots, (r_n, t'_n)$ に頂点をもち、形 $R(t)$ に対応した、因果錐体を、 $I(t)$ の重みつきで積分した全質量と見做すことによりよい。これにより、I ~ IV を満足するモデルの n 体相関関数等が、exactに計算できることがわかる。

参考文献としては、日本物理学会誌 関本謙 40 450 (1985) 等、を