

# 点状の位相的欠陥をもつ系の秩序化過程 における自己相似性\*

山梨大学 教育学部 豊 木 博 泰

(1989年5月 受付)

## 1. 序

臨界温度( $T_c$ )以上の無秩序相から  $T_c$  以下の温度に急冷された系における秩序相の形成過程に関する研究は、かなりの歴史がある(Gunton et al.(1983), 太田(1985), Furukawa(1985)などを参照). そこでの興味を中心は、強磁性体における自発磁化やネマティック液晶における配向ベクトルなど、秩序度を表す変数(秩序変数)の空間的パターンの成長の様子である. 観測されるのは分子・原子よりもはるかに大きなスケールのパターンであるから、それらは個々の物質の微視的な個性全体によるのではなく、秩序相の対称性を表す少数のパラメータだけに依存する. そこで、分子・原子のスケールから見れば粗視化されてはいるが、巨視的には局所的な秩序変数場として、ベクトル場  $\phi(\mathbf{r})$  を考える. 秩序変数の成長過程を記述するモデルとして、 $\{\phi\}$  の関数として表される現象論的な自由エネルギー  $F$  を考え、その勾配が  $\phi$  の駆動力になるという、次のような方程式を出発点とするのが自然である.

$$(1.1) \quad \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\delta F}{\delta \phi}, \quad F = \int d^D r \left[ \frac{1}{2} |\nabla \phi|^2 - \frac{1}{2} \gamma |\phi|^2 + \frac{1}{4} g |\phi|^4 \right]$$

( $\gamma > 0, g > 0$ ).

ここで、空間は  $D$  次元ユークリッド空間で、 $\phi$  は  $N$  元ベクトルである. 強磁性体や液晶だけでなく、ヘリウム 4 の常流動-超流動転移や 2 元合金の秩序-無秩序転移における秩序化過程などは、このモデルで記述できる. ただし、前者では  $N=2$ , 後者では  $N=1$  で、強磁性体や液晶ではさまざまな  $N$  の場合があり得る. 秩序変数が  $|\phi| = \psi_{eq} = \sqrt{\gamma/g}$  で一方向にそろったとき、エネルギー  $F$  は最低値をとり、これが秩序相の平衡状態を表す. 初期に無秩序相、つまり、 $|\phi| \ll \psi_{eq}$  で微少なゆらぎがある状態にあった系がエネルギーを散逸させて、最低エネルギーをもつ秩序状態にいきつく過程を記述する最も単純な連続場モデルが (1.1) 式で、時間に依存したギンツブルグ-ランダウ (TDGL) 方程式とよばれる一群の方程式の一つである (モデルの詳細は、Gunton et al. (1983) 参照. 秩序変数が一つのベクトルでは表されない物理系も当然ある). 秩序化過程の研究は、冶金学の分野における合金を対象とした研究が先行したという歴史的な事情もあって、これまで  $N=1$  の系についての研究が主に行なわれてきた. その過程における秩序相の空間的パターンは、二点相関関数  $C(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|, t) = \langle \phi(\mathbf{r}, t) \cdot \phi(\mathbf{r}', t) \rangle$  の時間発展が一つの特徴的長さ  $l(t)$  によってスケールされる (つまり、 $C(r, t) = F(r/l(t))$  を満たす) ことで示されるような相似的發展をすることが知られている (太田 (1985), Furukawa (1985) およびその引用文献, (1.1) 式に類似なモデルを数値計算した例として, Puri and Oono

\* 本稿は、統計数理研究所 共同研究 (63-共会-51) における発表に基づくものである.

「統計数理」第 37 巻 第 1 号 (1989) 「研究詳解」より転載。

(1988)). つまり、各時刻の秩序変数の空間的パターンは、 $l(t)$ を単位として見るといつも同様に見えるのである。最近我々は、液晶や超流動ヘリウムを念頭において、ほとんど研究が進んでいない  $N=2$  の系の秩序化過程に注目してきた (Toyoki and Honda (1987), Toyoki (1988)).

位相的欠陥が存在し得る系では、秩序化過程は、急冷後早期における位相的欠陥の形成過程と、その後のそれらの消滅過程という 2 段階に分けられると考えられている (Kawasaki (1984)). つまり、過程の早期において、空間のほとんどいたるところ  $|\psi| = \psi_{eq}$  であって、向きはそろっていない状態が実現し、その後向きの秩序化がおこるのである。(1.1) 式中、 $F$  の第 2, 3 項の微係数で表される局所的な力は  $\psi$  の振幅  $|\psi|$  の発達に寄与するだけで、その向きをそろえる効果は第 1 項だけから生じるが、それらの速さを評価することにより、上記のシナリオが成り立つことを簡単に示すことができる。このように、後期では、秩序変数の空間は  $N-1$  次元の球面と考えてよく、向きの乱雑さは、 $d$  次元ホモトピー群(ただし、 $d \leq D$ )によって区別される位相的欠陥の分布によって特徴づけられる(位相的欠陥の分類については、Kleman (1983) など)。位相的には区別できないゆらぎは当然あるが、まず欠陥の位置という自由度だけに着目するのが妥当である。ここでは、そのうちでも最も簡単であって、唯一実験が行なわれている  $N=D=2$  の系の振舞いについて考察する。すでに端緒的なデータを公表しているが (Toyoki (1988)), それよりも一歩進んだ理解を示したい。この系での欠陥は、超流動ヘリウム 4 の渦点としてよく知られているように、点状でその強度は整数によって区別される。それらの消滅は対消滅か境界による吸収によってなされる。その過程を考えようというのである。

## 2. モデル

点欠陥の分布  $\{r_i | i=1, 2, \dots, n\}$  が与えられたときの系のエネルギーは、近似的に

$$F_D = - \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \log |r_i - r_j|$$

と表される(例えば、Nelson (1980)). ここで、和はすべての点欠陥対についてのものであり、 $\sigma_i$  は欠陥の強度を表す。運動方程式の作り方は自明ではないが、エネルギーの勾配によって駆動力が表されるという(1.1)式と同様に考えて

$$(2.1) \quad \frac{dr_i}{dt} = - \frac{\partial F_D}{\partial r_i} \\ = \sum_j \sigma_i \sigma_j \frac{r_i - r_j}{|r_i - r_j|^{\beta+1}}, \quad \beta=1$$

と書く。(TDGL 方程式から欠陥の運動方程式を導き出す方法の定式化の試みについては、Kawasaki (1984)). ここで、後の記述との関係で指数  $\beta$  を導入した。強度  $\sigma_i$  と  $\sigma_j$  の欠陥どうしが衝突した場合には、合体して強度  $\sigma_i + \sigma_j$  の欠陥となるものとする。本報告では、単位強度 ( $\sigma_i = \pm 1$ ) の欠陥だけからなる系を考える。正負の欠陥の衝突は対消滅を意味する。欠陥が形成された初期の段階では高次の強度をもつ欠陥も存在し得るが、(i)強度が違う欠陥どうしの衝突が低次の欠陥を生み出すこと、(ii)駆動力は強度に比例することから、高次の欠陥は早く消滅してしまう。従って、秩序化の最後の段階は単位欠陥だけからなる系と考えてよい。

### 3. 数値実験

上記のモデルに対する数値実験を報告する。初期分布として、同数の正負の点欠陥の位置を乱数によって与える（一方符号の初期欠陥数を  $N_0$  で表す）。境界条件は、 ${}^4\text{He}$  のモデルであることを念頭において、超流動速度が壁と平行になるように、鏡映効果をもつ壁とする。矩形の系では無限個の鏡映像ができてしまうが、計算では一次の像だけを考慮に入れることにする。また、すべての欠陥間の相互作用を考えると、計算時間は欠陥数  $N$  の2乗倍で増え、大きな系の計算ができないので、次のようにして、相互作用を有限の範囲に限ることにする。系を格子状に矩形のセルに分け、セル  $(i, j)$  にある欠陥に対してセル  $\{(i \pm k, j \pm l) \mid 0 \leq k, l \leq i_c\}$  中の欠陥との相互作用のみを考えるのである。これによって、計算時間は  $N$  のオーダーにおさえられる。欠陥の配置はランダムであるために、遠くの欠陥からの影響は打ち消しあって大きな影響をもたないであろうから、このような近似は妥当である<sup>註1</sup>。時間発展はオイラー差分によって行ない、欠陥の核の大きさ  $\xi$  以内に近づいた正負の欠陥ペアは消滅させる。欠陥の位置の変化によって所属するセルが変わるから、各欠陥のセル番号の付け替えは1ステップごとに行なう必要がある。また、セルあたりの平均欠陥数  $n_c$  を一定に保つように、欠陥数の減少にとともなって、セル数も減少させる。

図1に示すデータは、初期の欠陥数を正負それぞれ  $N_0=2000$ 、また  $n_c=15$ 、 $i_c=1$  として計算したもので、初期分布が異なる5回の計算の平均である。また、図2, 3でも同様であるが、時間のきざみ幅は  $\Delta t$  で表してある。(a)から  $N \propto t^{-1.05}$  が得られる。これは、第4章で述べる次元解析の結果とほぼ一致する。指数のずれ0.05は系の有限性によるものなのか、本質的なものなのかは分かっていない<sup>註2</sup>。(b)は平均最近接欠陥間距離の変化で、 $d_{++}$ 、 $d_{+-}$  はそれぞれ正どうし、正負間についてのものである。 $d_{++}$ 、 $d_{+-}$  の双方とも  $t^{0.5}$  に比例している。 $N \propto d_{+-}^{-2}$  が成り立っていることから、同符号の欠陥だけの分布に注目すると、初期同様にランダムであると考えられる。一方、初期状態(正の欠陥分布と負のそれは互いに無相関)では  $d_{++}=d_{+-}$  であったものが、べき乗則が成り立つ領域では  $d_{++}/d_{+-}=1.6$  となる。比が一定であることは各時間の分布が相似であることを意味している。しかし、その根拠を理論的に明らかにすることや、この比の値を導くことはできていない(このことの最近の発展については、Toyoki (1989))。

系の特質を知るために、異なる力のレンジをもつ系の数値計算を行なった。(1.1)式における  $\beta$  が2および3である場合についての結果をそれぞれ図2と3に示す。図2は、初期分布が異なる3回の計算をまとめてプロットしたもので、図3は1回の計算についてのものである。点の数の変化は両方とも単一のべきで表される( $N \propto t^{-\delta}$ )<sup>3</sup>が、表1のように  $\delta$  は理論値より小さくなる。これは、 $d_{++} \propto d_{+-}$  が成立していないこと(図2, 3の(b))と関係する。実際の欠陥の分布を例示したものが図4であるが、見て分かる通り、 $\beta=2$  では相似的發展をしておらず、初期分布における濃度ゆらぎが点の消滅過程の間に拡散せず、そのまま後に残ってしまう様子が見られる。 $\beta=2, 3$  の場合には力のレンジが短いため、次元解析的(平均場的)議論ができないのである。そういう意味で、現実の系で見られる  $\beta=1$  のケースは相似則が成り立つ特別な

- 
- 1) ニュートン方程式に従う粒子系(慣性項がある系)の分子動力学シミュレーションを行なう場合には、この点については慎重でなければならないが、ここでのモデルのような純粋に散逸的な系で、かつ、粒子の分布がランダムな場合には、このような近似によっても系の発展の統計的性質は変わらないであろう。先の論文(Toyoki (1988))で、 $\beta=1$  についてだけであるが、近似なしの計算を  $N_0=500$  の系で行なって、同じ結果が得られることを確かめてある。
  - 2) 最近、準周期的境界条件(境界から  $i_c$  個のセルまでについて周期的とする)による計算を行なったところ、次元解析どおりの結果が得られることが分かった(Toyoki (1989))。従って、このずれは境界の影響であると思われる。

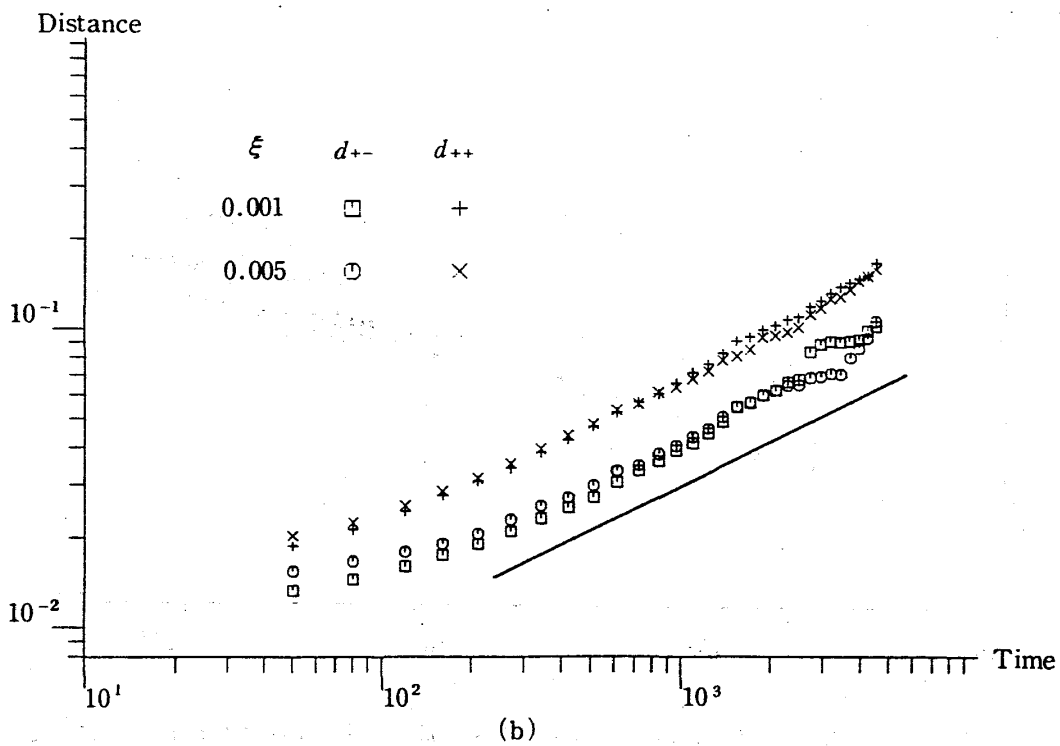
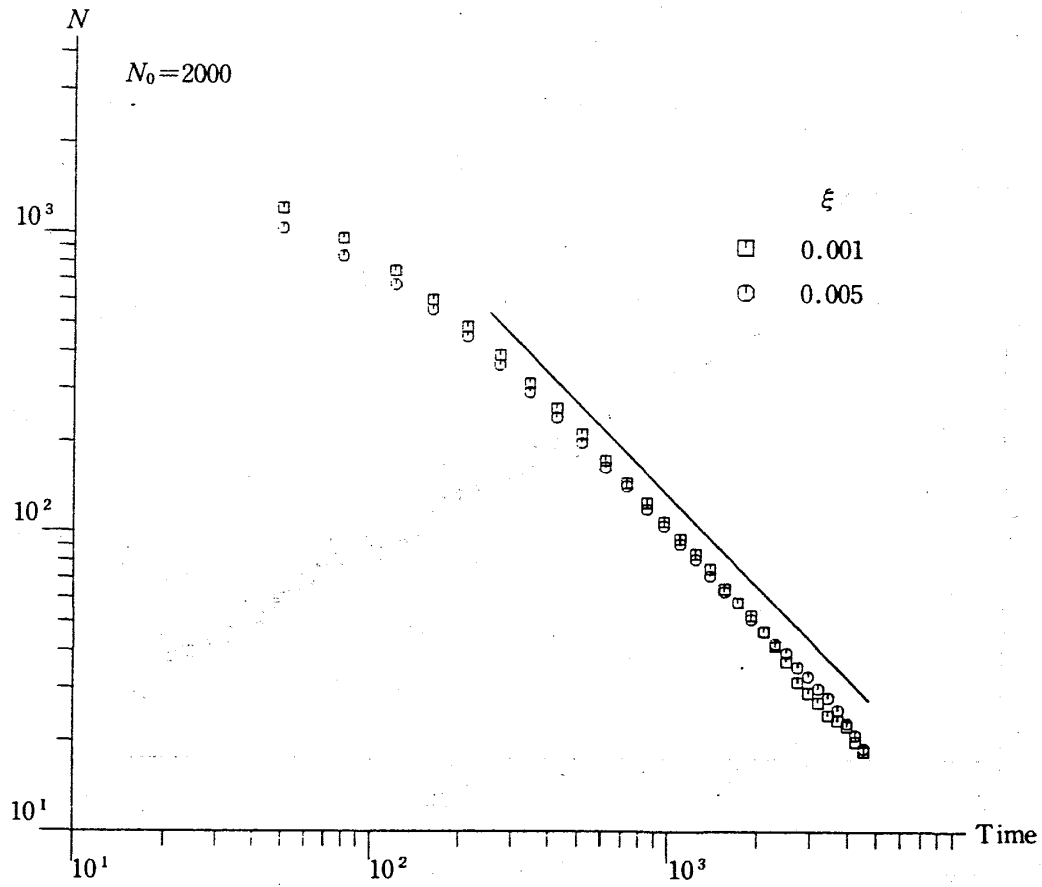


図1. (a): 点欠陥の数, および (b): 最近接点間距離の平均.  $\beta=1$ ,  $\Delta t=5 \times 10^{-7}$ . 初期の欠陥数は  $N_0$  で, 横軸は  $\Delta t$  を単位として表示してある (図2, 3でも同様). 実線は傾きがそれぞれ (a) では  $-1$ , (b) では  $0.5$  で, ガイドラインとして記入したものである.

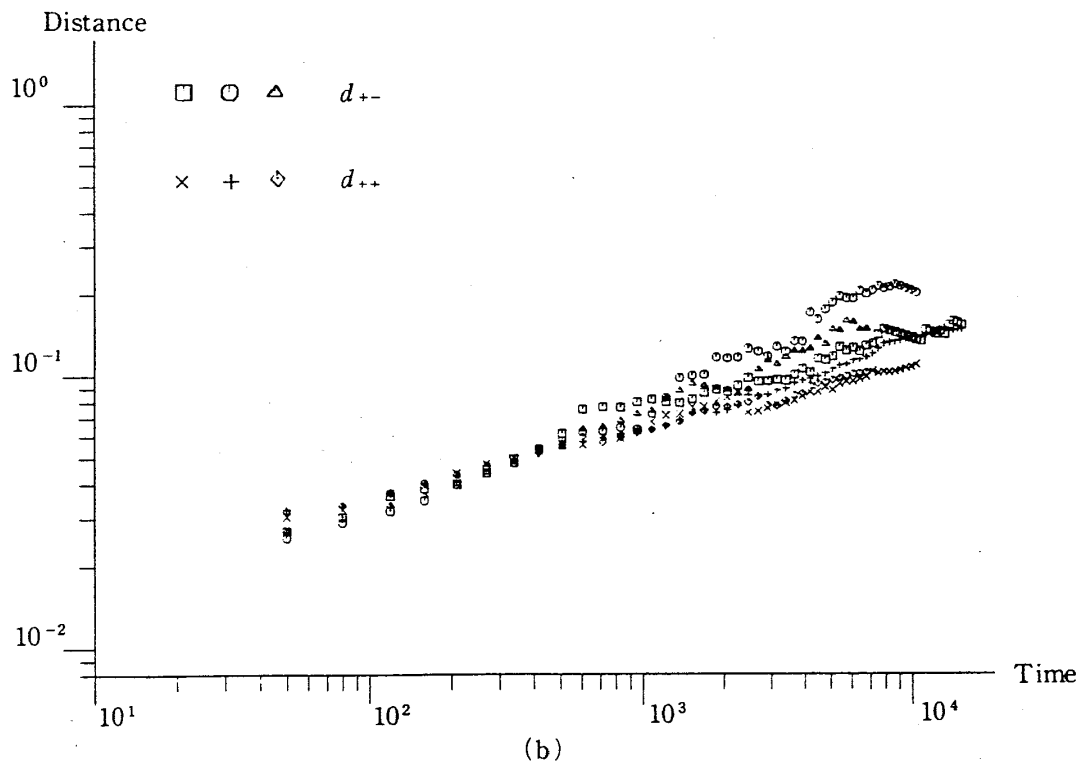
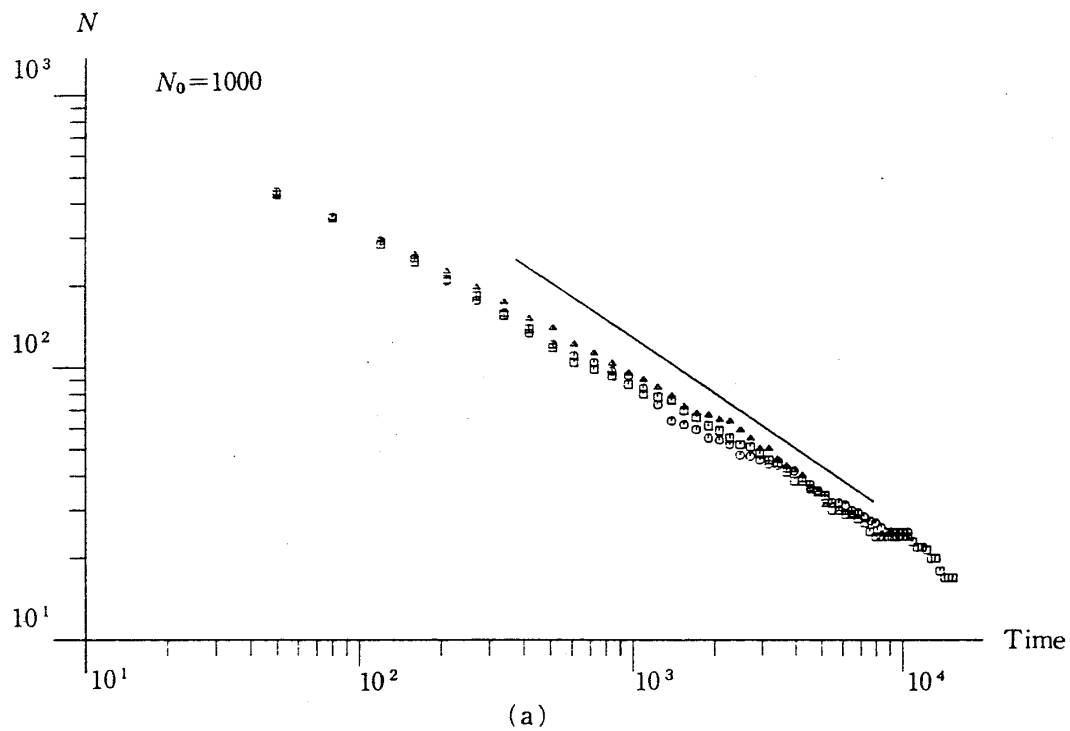


図2. 点の対消滅過程(1).  $\beta=2$ ,  $\Delta t=2.0 \times 10^{-8}$ ,  $\xi=0.005$ の結果. 実線は次元解析的に予想される変化で, 傾きは $-2/3$ .

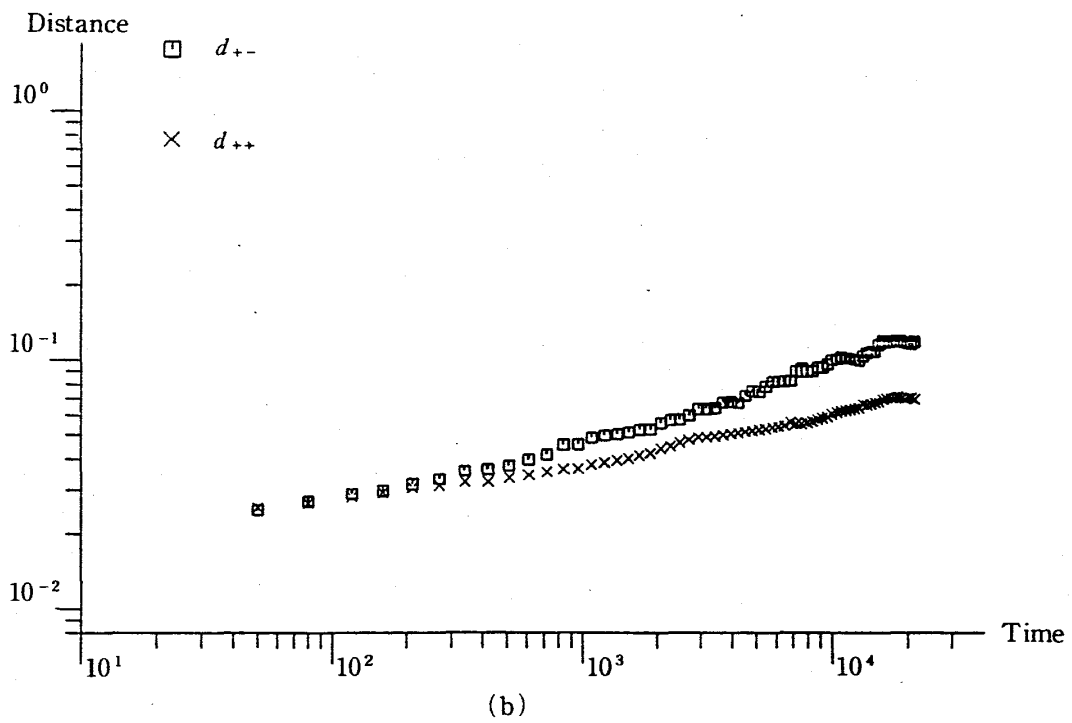
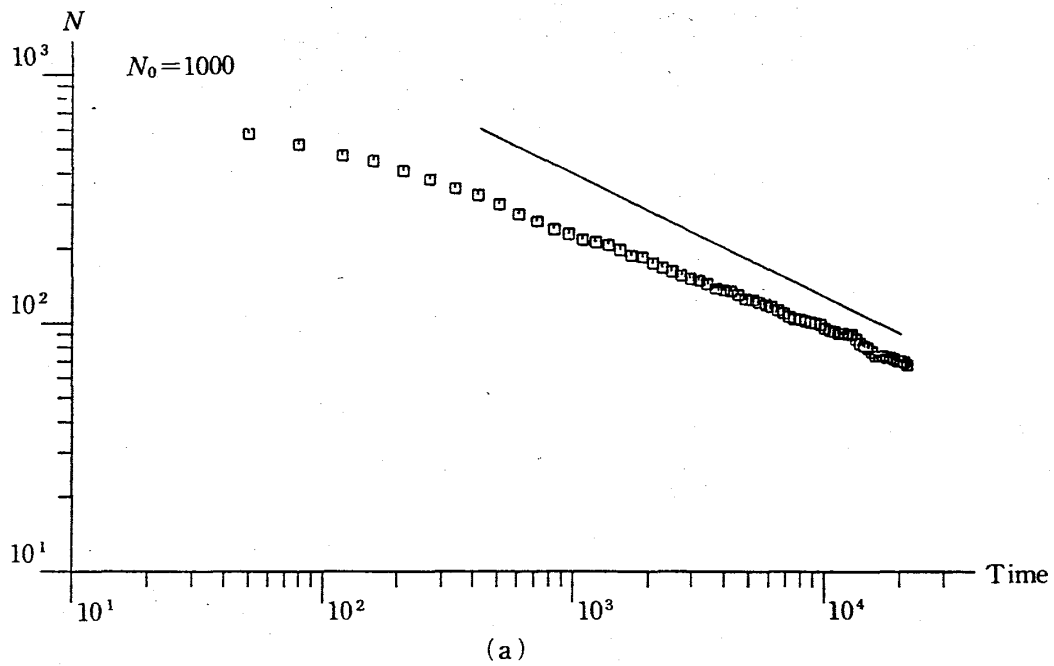


図3. 点の対消滅過程 (2).  $\beta=3$ ,  $\Delta t=1.0 \times 10^{-10}$ ,  $\xi=0.005$  の結果. 実線は次元解析的に予想される変化で, 傾きは  $-1/2$ .

表1. 指数  $\delta$  の理論値および数値実験値.

$\beta$	1	2	3
理論値	1	2/3	1/2
数値実験値	1.05	0.56	0.4

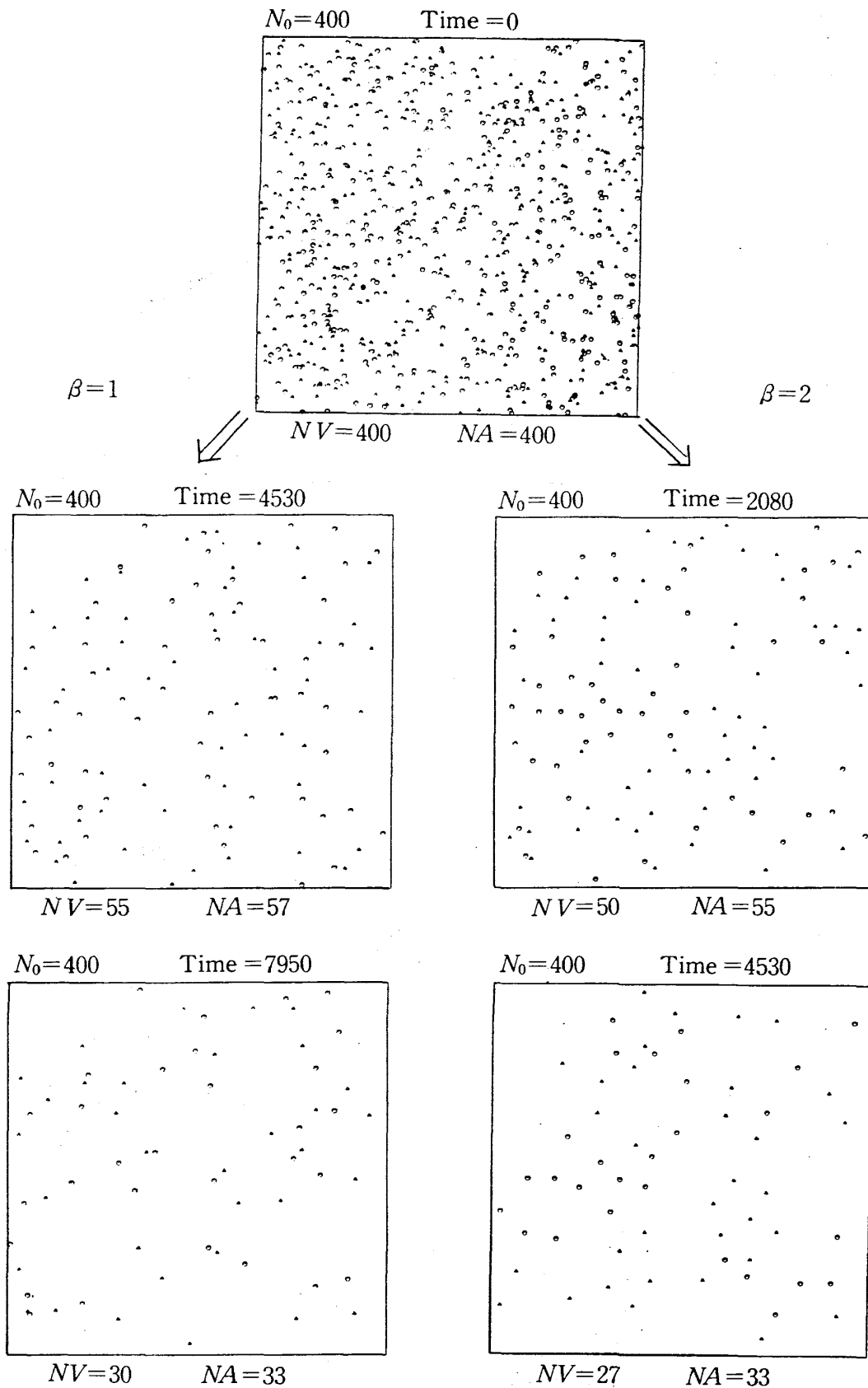


図4. 点(欠陥)の空間分布の変化. 同じ初期分布から出発した  $\beta=1$  と  $\beta=2$  の場合. 強度 $\pm 1$ の欠陥の位置をそれぞれ $\circ$ と $\triangle$ で表してある. 欠陥の消滅につれて,  $\beta=2$ では $\circ$ , および $\triangle$ それぞれの分布に非一様性が見だってくるが,  $\beta=1$ ではランダムなままに見える.

場合であるといえる。

#### 4. 理論的考察

(2.1)式の次元解析からすぐに(長さ) $\propto$ (時間) $^{1/(\beta+1)}$ が得られるが、運動論的には次のように考えられる。 $N \propto d_{+-}^D$ , および  $d_{++} \propto d_{+-}$  が成り立つ相似的発展を仮定しよう。平均衝突時間を  $\alpha(t)^{-1}$  とすると

$$\frac{dN(t)}{dt} = -\alpha(t)N(t)$$

が得られる。最近接の異符号欠陥間距離  $z(t)$  が  $z = -z^{-\beta}$  に従うとき ( $\beta$  は(1.1)式の  $\beta$  と同じ),  $\alpha(t) \propto d_{+-}^{(\beta+1)}$  が成り立つから

$$\frac{dN}{dt} = -N^{1+(\beta+1)/D}$$

と書ける。よって,  $N(t) \propto t^{-D/(\beta+1)}$  が導かれる。 $d_{++}$  や  $d_{+-}$  は系の特徴的長さを表すので, これは次元解析と同じ結果であるといえる。表1にこの結果と数値実験の結果とを対照しておく。

#### 5. ま と め

まだまだ粗い話であるが,  $N=D=2$  の系における点状欠陥の対消滅過程は相似的発展をすること, それには, 力が距離の逆数に比例することが本質的に重要であることが示されたと思う。分布がランダムであれば系中のある面積にはいる欠陥数は二項分布に従うはずであるが, 最近の数値実験で一方符号の分布がそうになっていることを確かめた (Toyoki (1989))。

実験例としては, 分子の配向を膜面内に限ったネマティック液晶膜についてのものが発表されている (Shiwaku et al. (1987))。液晶は棒状分子からなる系で, 分子には前後の区別がないから,  $N=2$  のベクトルとは異なるが, 強度が  $1/2$  の整数倍で区別される点欠陥をもち, それらが対数相互作用をもつことも分かっている。Shiwaku et al. (1987) は, 光学顕微鏡により欠陥数の時間変化を観察し,  $N \propto t^{-0.7}$  を得た。実験では, 高次の強度をもった欠陥も含まれていることが観測されていることから, 本稿の結果との差異はその点に起因すると考えられる。この考えは, 数値実験によって支持されるが, それは別の機会に詳しく述べたい。

また, 同様な描像が他の  $N=D$  の系に対しても成り立つと考えられ, 今後の研究が待たれる。

なお, 数値計算には, 山梨大学情報処理センターの ACOS 850 を用いた。

#### 参 考 文 献

- Furukawa, H. (1985). A dynamic scaling assumption for phase separation, *Adv. in Phys.*, **34**, 703-750.  
 Gunton, J.D., San Miguel, M. and Sahni, P.S. (1983). The dynamics of first-order phase transitions, *Phase Transition and Critical Phenomena* (eds. C. Domb and J.L. Lebowitz), **8**, 267-482, Academic Press, New York.  
 Kawasaki, K. (1984). Dynamical Theory of Topological Defects, *Ann. Physics*, **154**, 319-355.  
 Kleman, M. (1983). *Points, Lines and Walls*, Wiley, Chichester.  
 Nelson, D.R. (1980). Two-dimensional superfluidity and melting, *Fundamental Problems in Statistical*



- Mechanics* (ed. E.G.D. Cohen), 5, 53-108. North-Holland, Amsterdam.
- 太田隆夫 (1985). 界面の不安定性とパターン形成, 『物理学最前線 (大槻義彦 編)』, 11, 3-69, 共立出版, 東京.
- Puri, S. and Oono, Y. (1988). Study of phase-separation dynamics by use of cell dynamical systems II, Two-dimensional demonstrations. *Phys. Rev. B*, 38, 1542-1565.
- Shiwaku, T., Nakai, A., Hasegawa, H. and Hashimoto, T. (1987). Novel method to characterize dynamics of disclination lines in thermotropic liquid crystalline polymers, *Polymer Communications*, 28, 174-178.
- Toyoki, H. (1988). Molecular dynamics of vortex-points in the growth process of a quenched complex field, *Dynamics of Ordering Processes in Condensed Matter* (eds. S. Komura and H. Furukawa), 173-178, Plenum Publishing, New York.
- Toyoki, H. (1989). 急冷系における点状欠陥の運動, 物性研究, 52, 334-338.
- Toyoki, H. and Honda, K. (1987). Ordering dynamics of a deeply quenched complex field, *Progr. Theoret. Phys.*, 78, 237-248.