

21. 保存的 T D G L 系における等方性の保存

京大教養 富田博之

一様等方的な保存的 T D G L 方程式で記述される相分離過程において、スケイリング則に現われる局所的な空間パターンの成長と、巨視的な対称性の破れ、すなわち異方性の成長は異なる概念である。昨年度の当研究会において、後者を表現する量として秩序パラメータの一次モーメントすなわち「双極能率」を導入し、その保存性をカインティックイジングモデルを用いて調べた。今回は揺ぎのない Cahn-Hilliard 方程式に対応する大野たちのセル動力学の方法（2次元）を用い、構造関数のスケイリング形の小波数域における q^d 則を説明できる結果を得た。

空間的平均量 \bar{s} を差し引いた秩序パラメータ $s(r)$ を用いれば、双極能率は

$$P = (1/V) \int r s(r) dV$$

で表され、Cahn-Hilliard 方程式

$$\partial s / \partial t = -\nabla \cdot j, \quad j = L \nabla \mu$$

より

$$dP/dt = -(1/V) \oint_{S(\infty)} [(j \cdot n)r + L \mu n] dS$$

となる。自然境界条件 $j \cdot n = 0$ の元では第2項の表面積分の寄与のみとなる。（周期境界条件の元では第2項が消える代わりに第1項を0とおくことができないが、異方性の成長を考えているのであるから、ここでは周期境界条件を考えることは無意味である。）この異方性を表す双極能率 P は、運動学的な意味での保存量ではないが、上の方程式からわかるようにその成長は系の大きさが大きくなるに従い遅くなる。これは直観的に自明であろう。これに対して、パターンの特性波数として用いられる「界面密度」 $A(t)$ は、少なくともスケイリング則が成り立つ範囲では、当然ながら系の大きさ（および境界条件）にはよらない。

実際の計算では $\bar{s} = 0$ (50%-50% mixture) とし、 $A(t)$ としては

1) Perimeter: $s(r)$ の符号が変わるセル間の壁の長さ/セル数

2) 未飽和度: 飽和値を s_0 として $A(t) = (1/V) \int [1 - s(r)^2/s_0^2] dV$

の2通りで計算した。いずれの場合も、セル数 (64×64, 128×128, 256×256), 初期条件にはよらず、ほぼ同じ時間が経過した後にスケイリング域に入り $A(t) \sim t^{-1/3}$ 則に乗っている。構造関数

$$S(q, t) = \int dV \exp(iq \cdot r) (1/V) \int s(r_1) s(r_1 + r) dV_1$$

は、波数の大きいところ、および小さいところでは、各々

$$S(q, t) \sim (2s_0)^2 2A(t)/q^3 \quad (2次元 Porod 則)$$

$$S(q, t) \sim V P(t)^2 q^2/2$$

と展開できる。特性波数として $A(t)$ を用い、波数を $x = q/A(t)$ とスケールして構造関数のスケイリング形を

$$F(x) = 1/x^3 \quad (x \gg 1)$$

と規格化したと仮定したときの（実際には構造関数は計算していない）小波数展開 x^2 ($x \ll 1$) の係数は、後に示した 256×256 の等方的パターンのスケイリング域 ($t > 500$) において 0.001 程度以下であった。すなわち、構造関数のスケイリング形を求めれば x^2 形は実際上認知できないであろう。これに対し x^4 の係数は計算の度に揺らいでおり、 x^4 則を導くには何回か繰り返して平均的な構造関数を求めなければならないことを示している。

以下の図はすべてセル数 256×256 の場合で、マップ関数に現われるパラメータはすべて大野たちの原論文 (Phys.Rev.A38(1988),434) と一致させてある。また、等方性保存の意味を逆に理解するため、最初から異方性のある初期条件から出発した場合のパターンも示しておいた。初期条件では組成比が左端で 1.0 、右端で 0.0 にとってあるが、以後の時間でこれを拘束はしていない。この場合、セルサイズを長さの単位として $P_x(0) = 42.0$ に対し $P_x(10000) = 42.6$ であり、図のようなパターンの成長にもかかわらず、異方性は 0.1% 程度しか変化していない。

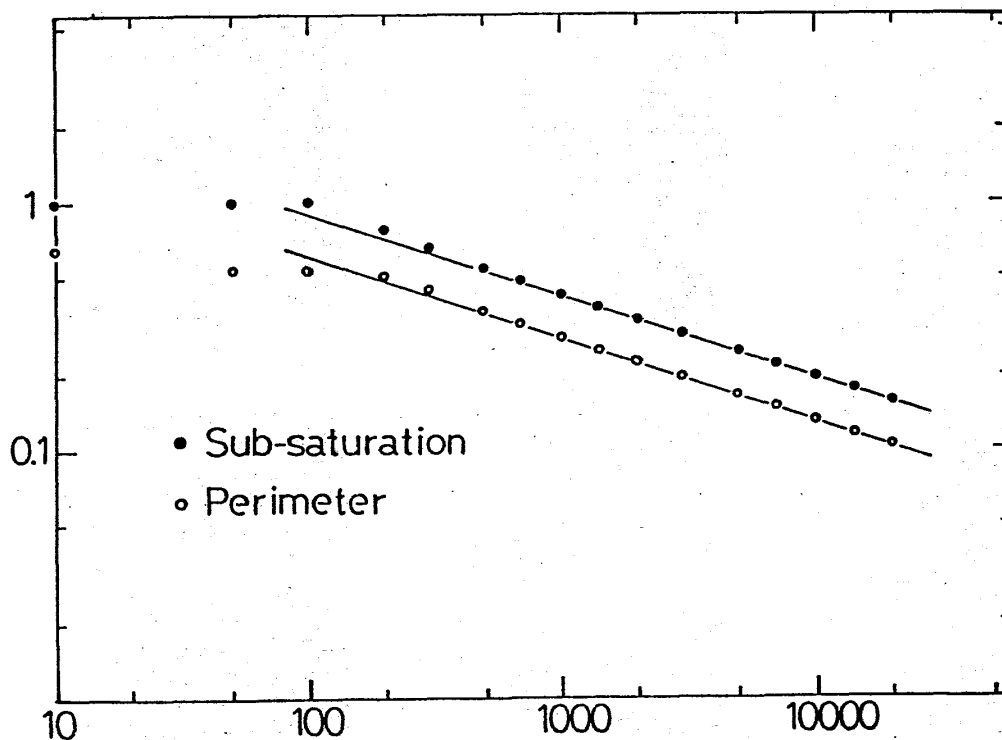


図1 特性波数 $A(t)$ の時間依存性: 2通りの計算法によるものが、スケイリング域ではほぼ比例しており、いずれも $t^{-1/3}$ 則を充している。

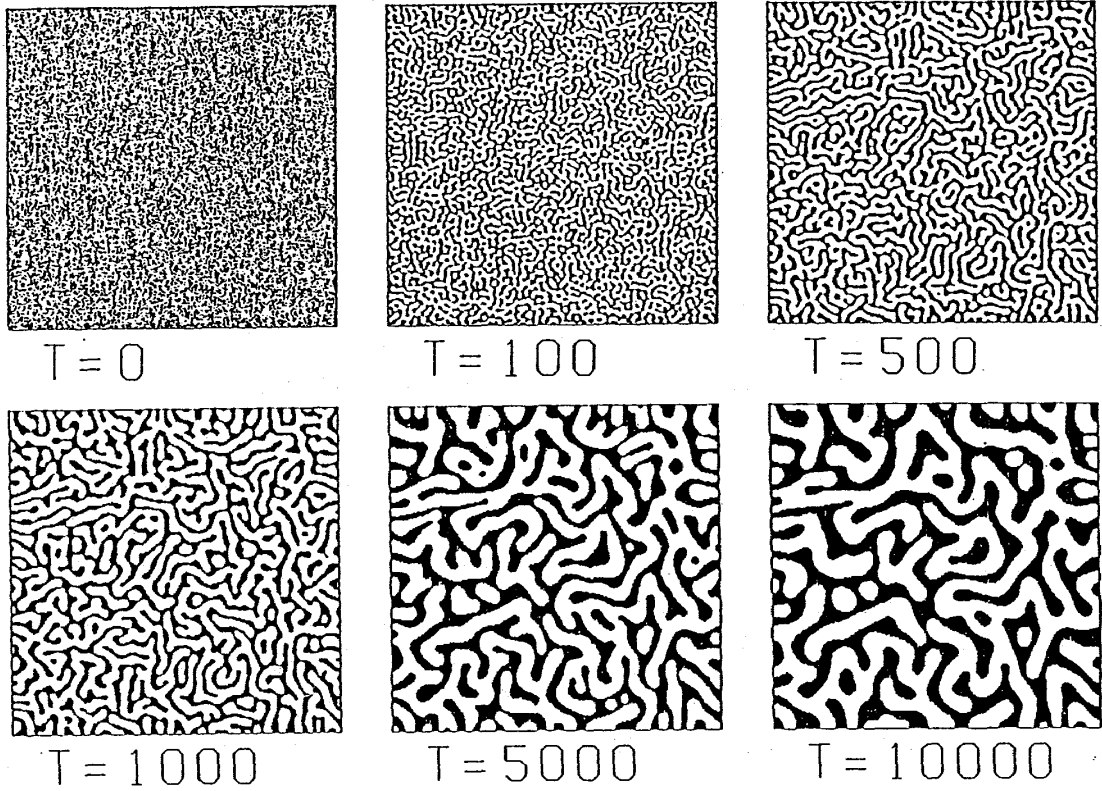


図2 一様等方的な初期条件から出発した場合 ($|P(10000)| \sim 0.0524$)

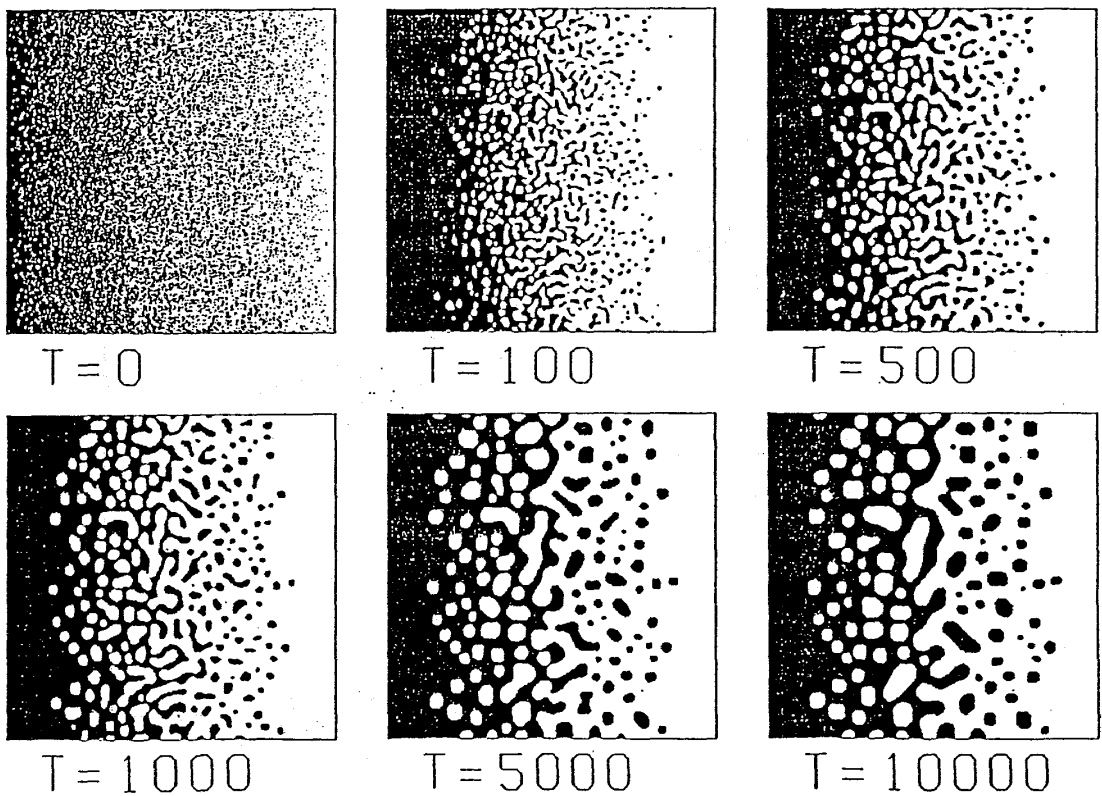


図3 x方向に一様な濃度勾配のある状態から出発した場合
($P_x(0) \sim 42.0$, $P_x(10000) \sim 42.6$)