

基盤上でのグレイングロース

山口大学教育 古川浩

多少誤解を生むタイトルであるが、むしろ基盤上からのグレイングロースと言
い替える方がよい。相分離のダイナミックスでは、主として一様な冷却によって
系を不安定な状態へ移し、その後の時間発展を調べることに研究されてきた。こ
のような一様な冷却では実験室での注意深い温度コントロールが要求されること
が多い。しかし自然界においては程度の差はあっても冷却は不均一である。この
ような不均一な冷却においてよく知られている現象は結晶の界面の不安定に伴う
複雑な形態形成である。それらはまたフラクタルの研究とも関連する。ところで
界面の不安定は熱の流れが大きく、かつ結晶の成長方向と熱の流れの方向とが一
致する場合に限る。従ってその条件が満たされない場合には当然であるが界面は
安定である。ところが界面が安定でも冷却による不安定は常にある。一様な冷却
の場合この不安定が強調されていた。不安定な領域が次々に広がっていく時、新
たに付け加わる不安定領域とすでに存在する不安定領域の間には単に時間的遅れ
があるだけではなく、複雑な関連が生じる。ここでは簡単なモデルによって不均
一なオーダーリングのシミュレーションを行った。タイトルからすればオーダーパ
ラメーターは非保存であるが保存系のオーダーパラメーターでも同じ条件でシミュ
レーションが可能である。両方の結果を報告する。

モデル

保存系： カーン-ヒリヤード方程式を、時間と共に不安定な領域を広げながら数
値的に解く。計算は二次元で行った。外側（安定な領域）はランダムにしておく。
自由エネルギーの形として元のギンツブルグ-ランダウ型ではなく大野-ブリに
よる修正されたものを用いた。一様な冷却では相分離をおこす。

非保存系： 無限個の状態を持つボッツモデルを用いた。ダイナミックスは界面
の運動に必要なプロセスだけを抜きだしてモンテカルロ法でおこなった。但し、
スピンの変化は常にエネルギーの増加がないようにし、温度の影響は初期状態の
みとした。計算は二次元と三次元で行った。一様な冷却ではグレイングロースを
おこす。

結果

保存系、非保存系共に線（二次元）または面（三次元）から出発して不安定である領域の幅（体積）を増やしていった。そのとき領域の広がる速度 v はパラメーターとしてあつかった。

保存系： 相分離によって生じるドメインのパターンが v の変化と初期のオーダーパラメーターの値によって変化する。 v が大きい場合パターンは本質的には一様な冷却と同じである。ただ一様な冷却に対して場所毎に時間的遅れが見られる。 v が中位の大きさで、あまり熱的な揺らぎがない場合、ドメインのパターンは非常に特徴的なものになる。すなわち、不安定領域の境界面に（平均として）平行な縞模様（またはラメラ状）となる。この縞模様の方向は自己形成的に定まる。さらに小さな v の値になると、ドメインのパターンは境界面に垂直な柱状となる。このようなパターンは出発点での境界条件にはよらない。

非保存系： この場合もグレインの形態は領域の拡大速度 v によって変化する。但し、グレインの形態は出発点の境界条件にも依存する。その境界がランダムな場合、グレインは v の大きい場合本質的に一様な冷却と同じであるが、 v が小さくなれば柱状となる。但し、この二つの間の転移はそれほど急激でもないし、また柱状のグレインの側面もそれほどまっすぐではない。一方、均一な境界条件のもとでは柱状のグレインに相当するものが単一の相（単結晶）になることを除けばランダムな境界条件の場合とほぼ同じである。この単結晶の体積は時間に比例し、普通のグレングロースの場合の $t^{1/2}$ に比べてずーと効率がよい。

シミュレーションで得られたいろいろなパターンや結果は注意深く観察すれば自然界によくみられる。保存系の縞状の構造はあまり馴染みがないが、しかし岩石学の分野でスピノーダル分解といえば、このような縞状のパターンを指すほどであり、そのようなものと何等かの関連が期待される。急速に凍らせた氷は顕微鏡写真で小さなグレインの集合体であることがわかるが、つららの断面は放射状に並んだ柱状の集合である。また、工業的に重要である、単結晶の製造も、単結晶の種を融解した物質からゆっくりと引き上げることによってなされるが、これもここでのシミュレーションの結果と同じである。このように、条件によって、得られるパターンが著しく違ってくることは、他の現象にもしばしば見られるこ

とである。典型的な例としては、流体の運動がある。流れの速さに応じて、流線は規則的なものから非常に乱れたものへと変化し、とくに乱れた状態として乱流になる。この例も含め急速な変化に対して、乱れたパターンが出現することは一般的である。

参考文献

H. Furukawa, Physica A 180, 128 (1992)

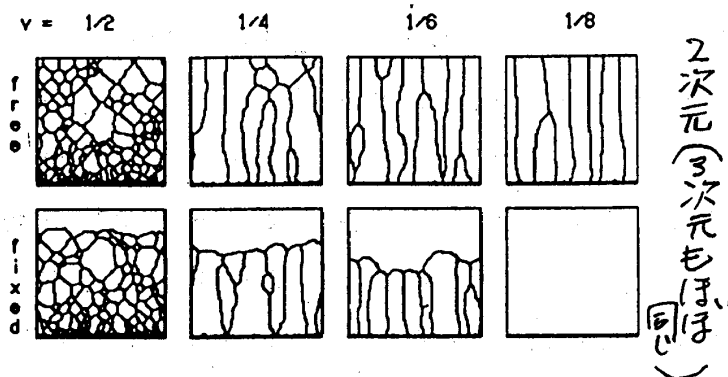
H. Furukawa, Prog. Theor. Phys. 87, 871 (1992)

シミュレーションによって得られたいろいろなパターン



Domain morphology for $v = 1/6$; the system size is 200×200 and $\delta\psi_0 = 0.1$. The left-hand diagram represents the domain morphology and the dark parts represents $\psi > 0.2$. The quench boundary is shifting downwards. This is the same for all similar figures in this paper. The middle diagram represents a superposition of the order parameter of a part with a horizontal width of 40. This represents an exponential build-up of the fluctuation. The right-hand diagram represents the order parameter profile at a fixed horizontal position.

非保存系



Patterns of grain boundary for several quench boundary velocities and two different system boundary conditions. Upper figures: ordering in contact with a disordered phase, which is set freely to evolve. Lower figures: ordering in contact with a single ordered phase, which is fixed temporally. Note that the quench boundary is the lower system edge in each figure and is shifting downward. The system size is 100 by 100.