

急冷系における点状欠陥の運動

山梨大教育 豊木博泰

秩序変数が非保存で N 元ベクトルの D 次元系 (ただし、 $N=D$) を急冷したときの秩序化過程は点状欠陥の対消滅過程として捉えられる。2 次元系についての数値計算を以前報告したが、その要点は、欠陥数が $N \propto t^{-1}$ 、最近接ペア間の平均距離は $d_{++} \propto d_{+-} \propto t^{1/2}$ 、 $d_{++}/d_{+-} \sim 1.6$ のように変化し、これは次元解析と一致することであった¹⁾。このような点状欠陥の描像は高次元系 ($N \geq 3$) においても成り立つと考えられるが、そのときにも次元解析の結果が妥当するののかということは興味深い問題である。 $N \geq 3$ における欠陥間の相互作用エネルギーが二体相互作用の和で書けるかどうかは甚だ疑問であるが、系に1個および2個の欠陥が存在するときについて計算すると、エネルギーは次元によらず二体間距離に比例するという結果が得られる (下の(1)式の $\beta = 0$ に対応)²⁾。これに次元解析を行えば、 $N \propto t^{-D}$ が得られるが、これは正しいであろうか。ここでは、二体相互作用でエネルギーが表されるとして、その距離依存性を変えたときの系の振舞いについて考えてみる。ただし、数値実験は2Dについてのものだけを報告する。

I 数値実験

点状欠陥の運動方程式を

$$\dot{x}_i = - \frac{\partial F}{\partial x_i}, \quad F = \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j |x_i - x_j|^{-\beta+1} \quad (\sigma_i = \pm 1) \quad (1)$$

として (ただし、 $\beta=1$ は対数的相互作用を表す)、以下のような数値実験を行った。初期分布として、正負同数の欠陥の位置を一様乱数によって与え、オイラー差分により時間発展をさせる。もし、欠陥のコアの大きさに相当する距離 ξ (ただし、 $\xi \ll$ (欠陥間の平均距離)) のように選ぶ) 以内に近づいた正負の欠陥ペアは対消滅させる。分布が一様で乱雑であるために遠くの欠陥からの力は打ち消しあって大きな影響をもたないと考えられるので、つぎのように相互作用を有限の範囲に限ることにする。即ち、系を格子状のセルに分け、セル (i, j) にある欠陥にたいしてセル $(i \pm k, j \pm l)$ (ただし、 $0 \leq k, l \leq i_c$) にある欠陥からの寄与だけを考

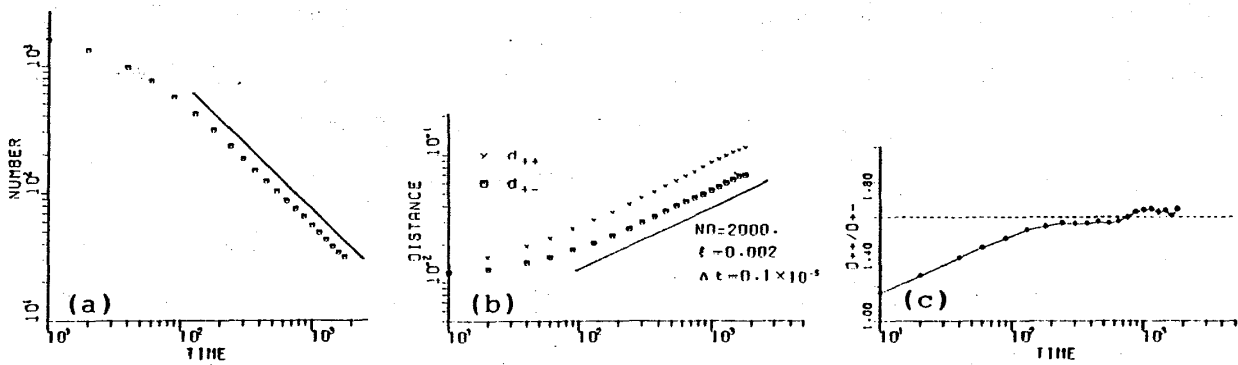


図 1. (a)欠陥数 N , (b)最近接欠陥間距離の平均 d_{++} と d_{+-} , (c) d_{++}/d_{+-} .

β	0.5	1	2	3
γ の理論値	4/3	1	2/3	1/2
γ の数値実験	*	1.0	0.56	0.4

表 1. 力のべき指数 β と欠陥数の時間変化を表す指数 γ ($N \sim t^{-\gamma}$).
* はべきで表されるかどうか疑問.

えるのである。計算の途上においては、セルあたりの欠陥数の平均 n_c が一定に保たれるよう N にあわせてセルの大きさを変えるものとする。また、境界から n_c 番目までのセルについて周期的境界条件を課す。

図 1 に $\beta = 1$ のデータを示す。これは、 $i_c = 3$, $n_c = 2$ として、20 サンプルの平均をとったものである。文献 1) での計算では鏡像効果を持つ吸収壁を境界としていたために次元解析の予想よりも僅かに傾きが大きかったが、今回の結果は、前者よ

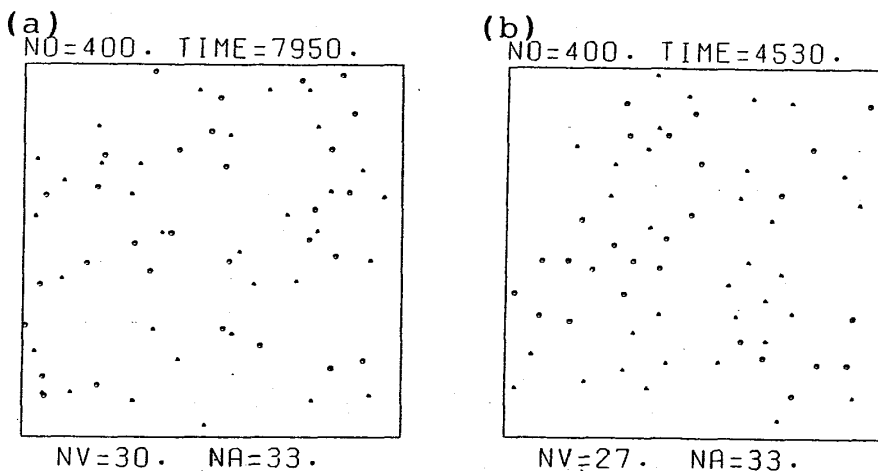


図 2. 同じ初期分布から出発した (a) $\beta = 1$ と (b) $\beta = 2$ のスナップショット。○と△で正負それぞれの欠陥の位置を表してある。
(境界は吸収壁)。

りも良い一致を示している。初期分布での d_{++}/d_{+-} の値は 0.99 ± 0.02 であった。これは乱雑さから予想されるとおりの値である。これが、べき変化の領域では約1.6という数値になることが、この系の特徴であることを強調したい。

ところが、表1に示すように β が他の値の場合には次元解析と一致しないのである。同じ初期分布から出発した $\beta=1$ と2のスナップショットを示した図2よりその定性的理由はすぐ分かる。 $\beta=1$ の場合には乱雑な分布であるのに対し、 $\beta=2$ では、正負それぞれの分布の非一様性が目だつ。後者の場合には初期の濃度ゆらぎが点の消滅のあいだに「拡散」せず、そのまま後に残ってしまうのである。

その濃度ゆらぎを調べるために、適当な大きさのセルを設定し、セル内にある欠陥数の分布関数を計算した。 $\sigma=1$ の欠陥についての分布関数を図3に示す。初期同様に一樣でランダムであれば二項分布になるはずである。従って、それぞれの分布における平均値から得られる二項分布を破線で示して対照できるようにした。 $\beta=1$ では予想どおり二項分布が保持されている。 $\beta=1/2$ では分布の狭まり、

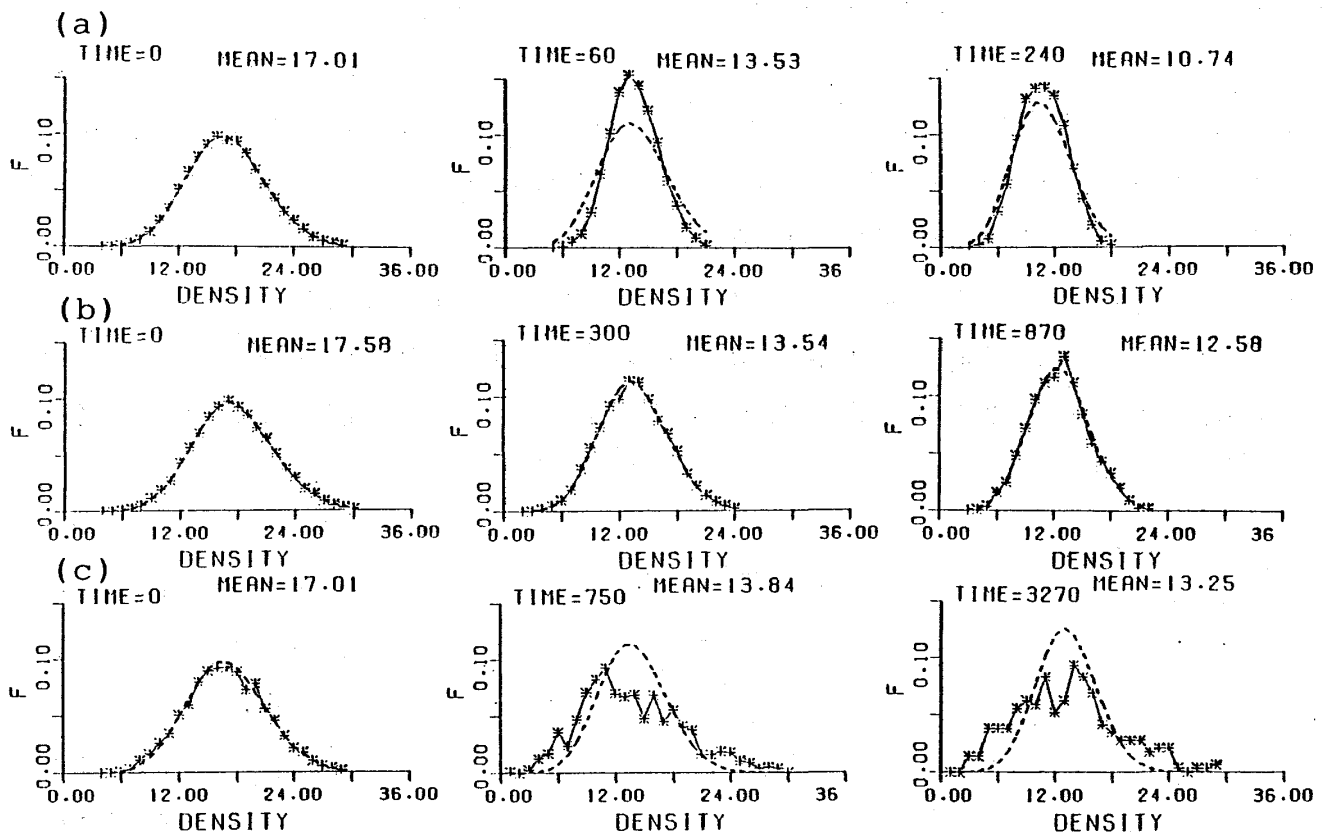


図3. 系を矩形のセルに分け、セルに含まれる欠陥数の分布関数を求めたもの。

縦軸は規格化されたセル数。(a) $\beta=0.5$, (b) $\beta=1.0$, (c) $\beta=2.0$.

(a), (b)は20サツノ平均, (c)は4サツノ平均。

つまり、初期分布以上の均質化がおこり、 $\beta=2$ では逆に分布の広がりがみられる。後者は、図2(b)にみられる正負の欠陥それぞれの「住み分け」を表している。

II 相似的発展の条件

対消滅がすすんでも二項分布が保持されるためには、対消滅とともに「拡散」も進行しなければならない。同符号の欠陥どうしは反発しあって一様な分布を目指すであろう。ここでの拡散とはそのような分布の一様化をさす。その速さと対消滅の速さがバランスしているときに相似的発展が現れるのである。「拡散」の速さは力のゆらぎの大きさによっている。欠陥の濃度を $\rho_{\pm}(\underline{r})$ すると力は

$$\underline{f} = \pm \int d^D r' \delta \rho(\underline{r}') \frac{\underline{r} - \underline{r}'}{|\underline{r} - \underline{r}'|^{\beta+1}}$$

と書ける。ただし、 $\delta \rho = \rho_+ - \rho_-$ である。この分散

$$\sigma_f^2 = \iint d^D r' d^D r'' \langle \delta \rho(\underline{r}') \delta \rho(\underline{r}'') \rangle \frac{(\underline{r} - \underline{r}') \cdot (\underline{r} - \underline{r}'')}{|\underline{r} - \underline{r}'|^{\beta+1} |\underline{r} - \underline{r}''|^{\beta+1}} \quad (2)$$

を次のように評価する。 $\delta \rho$ の相関関数は Gaussian で表してよいであろう：

$$\langle \delta \rho(\underline{r}') \delta \rho(\underline{r}'') \rangle = A_0 \exp[-|\underline{r}' - \underline{r}''|^2 / 2 l(t)^2], \quad (3)$$

ただし、 $A_0 = 2 \rho_0^2 (1 - \Delta(t))$ 、 $\Delta(t) = \langle \rho_+ \rho_- \rangle / \rho_0^2$ 、 $\rho_0^2 = \langle \rho_+^2 \rangle = \langle \rho_-^2 \rangle$ である。もし、時間変化が相似的であるならば、 $\Delta(t)$ は時間に依らないであろう。したがって、 A_0 の時間変化は密度の2乗、つまり $l(t)^{-2D}$ に比例するはずである。(3)を(2)に代入して、積分する。積分の上限は系の長さのスケール L 、下限はコアの大きさ ξ である。結果を $L \rightarrow \infty$ 、 $\xi \rightarrow 0$ の最主要項で評価すると、それは次の3つの振舞いに分けられる：

領域(a) $D > 2\beta$: $L \rightarrow \infty$ で発散.

$$\sigma_f \sim L^{D/2 - \beta} l(t)^{-D/2} \quad (4-a)$$

領域(b) $\beta < D \leq 2\beta$: L にも ξ にも依らない.

$$\sigma_f \sim l(t)^{-\beta} \quad (4-b)$$

領域(c) $D \leq \beta$: $\xi \rightarrow 0$ で発散.

$$\sigma \sim \xi^{(D-\beta)} l(t)^{-D} \quad (4-c)$$

(図4)。Iの数値実験における $\beta = 1/2, 1, 2$ はそれぞれ領域(a), (b), (c)に入る。 $\beta = 0.5$ における均質化の進行は、(4-a)式のような力の異常なゆらぎに起因していることが分かる。領域(b)は、次元解析的(平均場的)議論が成立つ領域である。それは、次のようにして分かる。距離 l だけ離れた正負の欠陥ペアが対消滅するまでの時間は $t_0 \sim l^{\beta+1}$ であり、この時間のあいだに「拡散」する距離は $\eta_D \sim \sigma \sqrt{t_0} \sim l(t)$ と計算される。両者がバランスして増大するので、相似性が保たれるのである。一方、(c)のように、振舞いが ξ に依存することは本質的に異常であり、乱雑性の仮定(3)が破綻している、つまり、次元解析的考察がゆるされないということを意味している。これは、 $\beta = 2, 3$ の結果に符合する。

以上、濃度ゆらぎによる「拡散」についての考察と数値実験により対消滅過程には3つの領域があることを示した。この結果は、 $D \geq 3$ ではペア相互作用で系のエネルギーが書けるとしても $2D$ のような相似性が成り立たないだろうことを示唆している。

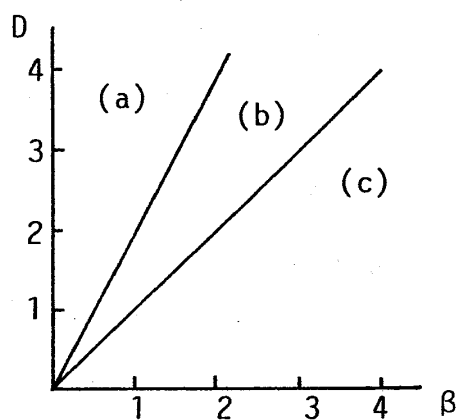


図4. 力の「ゆらぎ」より区別される3領域

- 1) H. Toyoki, in 'Dynamics of Ordering Processes in Condensed Matter', edited by S. Komura and H. Furukawa (Plenum, 1988).
- 2) S. Ostlund, Phys. Rev. B24(1981), 485.