

相分離過程における相似則

京大・教養 畠田博之

次のようなTDGL系を考える。

$$\Gamma(\{s(r)\}) = \int dr [f(s(r)) + \frac{K}{2} (\nabla s)_r^2] \quad (1)$$

$$f(s) = -\frac{a}{2} s^2 + \frac{g}{4} s^4 \quad (\text{磁場なし})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle s_0 s_r \rangle_t = L (i\nabla)^\alpha \left\{ k_B T \delta(r) + K \nabla^2 \langle s_0 s_r \rangle_t + [a \langle s_0 s_r \rangle_t - g \langle s_0^3 s_r \rangle_t] \right\} \quad (2)$$

ここで α は、order-parameter を保存しない系 (case 1) では $\alpha=0$, 保存する系では $\alpha=2$ (case 2) であり、以下では、いずれも $\langle s \rangle_t = 0$ の場合を考える。

Langer 達¹⁾ は (2) の $\langle s_0^3 s_r \rangle$ 項を、相関より多に對し、 $r \gg \xi$ とし、

$$\langle s_0^3 s_r \rangle_t \cong \frac{\langle s^4 \rangle_t}{\langle s^2 \rangle_t} \langle s_0 s_r \rangle_t \quad (3)$$

と仮定し、 $\langle s^2 \rangle_t$, $\langle s^4 \rangle_t$ は局所分布 (一体分布) 関数から近似的に求め、(2) を同じさせて数値的に解いた。この時、structure function

$$S(q, t) = \int dr e^{iq \cdot r} \langle s_0 s_r \rangle_t$$

に対する運動方程式は

$$\frac{1}{L} \frac{\partial}{\partial t} S(q, t) = g^\alpha [K(r(t) - g^2) S(q, t) + k_B T] \quad (4)$$

の形になる。線形理論では $r(t)$ は一定で、 $r = a/K = 2\xi^{-2}$ である。(4) は Langer 達の方法でもよいが、sum-rule

$$\int dq S(q, t) = \langle s^2 \rangle_t \cong a/g \quad (5)$$

を用いることにより計算を簡単化することができる。²⁾ いずれにしても非線形効果が入ることにより、 $r(t)$ は $t \rightarrow \infty$ とともに $r(t) \rightarrow 0$ となり、不安定

域が次第に縮小され、 $t \rightarrow \infty$ で $g \sim 0$ に鋭角的なピークが成長する。

case 2 ($\alpha=2$) に対しては、ピークの位置 $g_m(t)$ は、^{1), 2)}

$$g_m(t) \sim t^{-0.21} \quad (6)$$

case 1 ($\alpha=0$) では、ピークは常に $g=0$ で、その中が ³⁾

$$g_c(t) \sim t^{-0.5} \quad (7)$$

のふるまいを示す。この値は数値計算の範囲内で、系の次元には依存しない。

Ref. 1), 2) の方法は、系の不安定性と安定化を定性的に理解することができ、定量的にも (6), (7) は計算機実験等の値とよく一致している。最大の欠陥は (4) が、

$t \rightarrow \infty$ で平衡形 (Ornstein-Zernike 形) になる。

$$S(g, \infty) = \frac{k_B T}{K g^2} \quad (8)$$

となることである。筆者は Ref. 2) の段階では、これは Interface のぼやけた、Spherical モデルであると考えていたが、(4) の $r(t) \rightarrow 0$ は、

$$\langle S^4 \rangle \rightarrow \frac{a}{g} \langle S^2 \rangle$$

に対応し、 $\langle (S^2 - \langle S^2 \rangle)^2 \rangle \rightarrow 0$ となっており、Interface は存在する。むしろ、(8) は臨界点に類似の、ramified-interface を表わしていると考えた方がよいであろう。Percolating-limit とでも呼ぶべき。不安定状態を示唆していると思われる。

今回、上記の欠陥を改善する方法を試みた。以下、case 1 ($\alpha=0$) についてのみ報告する。すなわち、(3) の仮定は、 r の全領域で成立つはずはなく、短距離に対しては、むしろ平衡状態を強制すべきである。これは (4) において、 $r(t)$ は、適当な cut-off を入れて、 $g > g_c(t)$ では、

$$r(t) = -r_{eg} \quad (9)$$

(ただし、 r_{eg} は、 $S_{eg}(g) \sim k_B T / (r_{eg} + g^2)$ で決める。) を強制することである。ただし、特徴的な波数としては、 $K \equiv \xi^{-1}$ と、(4) の不安定域 $r(t)^{1/2}$ 以外には現れないとすれば、 $g_c(t)$ は $r(t)^{1/2}$ の数倍とすべきであろう。

もし、相似則

$$S(g, t) \cong l(t)^d \mathcal{S}(l(t)g) \quad (10)$$

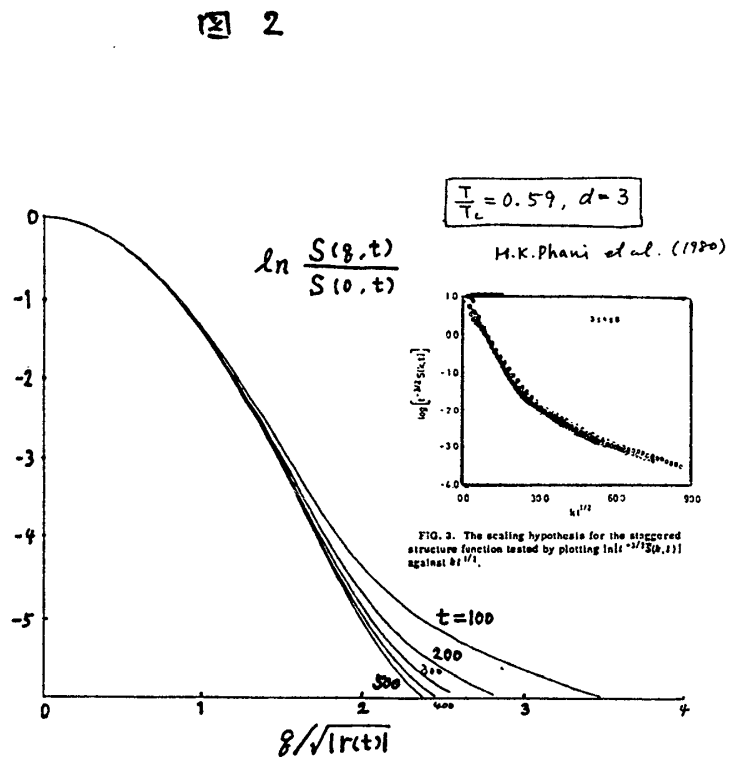
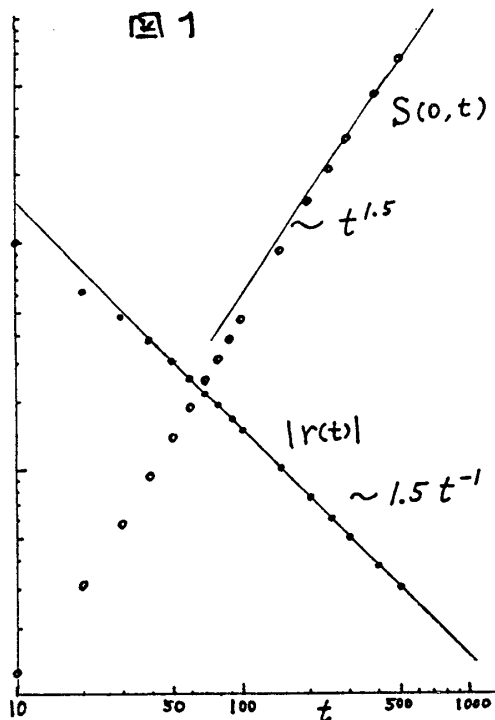
が成立つならば、(d は次元) 時間を新たに

$$KLt \rightarrow t$$

として.

$$\begin{aligned} r(t) &\cong \frac{d}{2} t^{-1} \\ S(0, t) &\propto t^{d/2} \end{aligned} \quad (11)$$

が成立しなければならず. $\ell(t) \propto t^{1/2}$ となる. 図は. $d=3$ の場合で. $g_c(t) = 2 r(t)^{1/2}$ とした時の結果で. (11) は予想とおりである.



しかし図2の関数形の方は. $t=100 \sim 500$ では. $tail$ の部分は相似則には乗っておらず. 漸近形は

$$S(g, t)/S(0, t) = e^{-t g^2} \quad (12)$$

の Gaussian である. 図2の右上は. Phani 達の計算機実験⁴⁾で. 太田達⁵⁾の Interface - Theory で見事に再現されたように. $tail$ 部は

$$S(g, t) \propto 1/g^{d+1} \quad (13)$$

の Porod 則 に一致していると考えべきである. これが再現されるのは.

$$\kappa \gg g \gg |r(t)|^{1/2}$$

に対しては(9)の仮定が強すぎるためであろう. 以下に研究会後の結果を補足する.

Interface の密度が小さい時は, Interface の形は TDGL 方程式の定常解

$$K \nabla^2 S = \frac{\partial f}{\partial S} = -a S + g S^3$$

で与えられるとしてよい。この時, (2) 式の右辺の [] の項は

$$a \langle S_0 S_r \rangle - g \langle S_0^3 S_r \rangle \cong K \langle (\nabla S)_0 \cdot (\nabla S)_r \rangle \quad (14)$$

となる。Interface 上の各点での曲率を, 接平面内で2束平均した量を $1/\rho(a)^2$ (3次元では主曲率を $1/R_1, 1/R_2$ として $1/\rho^2 = (3/R_1^2 + 2/R_1 R_2 + 3/R_2^2)/8$) として,

$$\xi \ll r \ll \rho(a) \quad (15)$$

の範囲では展開式

$$\frac{g}{a} \langle (\nabla S)_0 \cdot (\nabla S)_r \rangle \cong (d-1) \gamma_d \frac{1}{r} \int \frac{d\alpha}{V} \left(1 - \frac{d+1}{8} \frac{r^2}{\rho(a)^2} \right) \quad (16)$$

$$\frac{g}{a} \langle S_0 S_r \rangle \cong 1 - \gamma_d r \int \frac{d\alpha}{V} \left(1 - \frac{d-1}{24} \frac{r^2}{\rho(a)^2} \right) \quad (17)$$

$$\gamma_d = 2^d \Gamma(\frac{d}{2})^2 / \pi \Gamma(d)$$

を得る。 $\int$ は Interface について行う。 $\int d\alpha/V = A$ は Interface の密度を表わし, (16), (17) は A についての展開とみなせる。ただし, $\langle S \rangle \cong 0$ では, cluster の曲率半径, cluster 間のさより)は, いずれも A^{-1} 程度になるので, (16), (17) のオ2項は, cluster 相関の初項 ($\sim A^2$) と same order になり, 意味を失う。ともかく (16) は, r の小さい所で (14) に対し A/r の singularity を与える。この項が, 相関々数の r の一次の項に対応し, 構造関数の tail $1/g^{d+1}$ (Porod 則) を与えることになる。この tail 部分も同じ相関則に従うならば, 系を特徴づける長さは A^{-1} のみ ($A^{-1} \gg \xi$) となる。元の TDGL 方程式にもとづけば $A(t) \sim t^{-1/(d+2)}$ を得る。case 1 に対しては $t^{-1/2}$ となり他の理論と一致するが, case 2 に対しては, $t^{-1/4}$ となり, 太田達の次元解析の結果 $t^{-1/3}$ とは一致しない。

1) J.S. Langer et al. Phys. Rev. A11 (1975), 1417

2) H. Tomita, Prog. Theor. Phys. 59 (1978), 1116

3) H. Tomita, C. Murakami, Prog. Theor. Phys. 60 (1978), 683

4) M. K. Phani et al. Phys. Rev. Lett. 45 (1980), 366

5) T. Ohta et al. Phys. Rev. Lett. 49 (1982), 1223 ; 本研究会講演