

ランダム系における相分離過程

東北大学 理学部 岩井俊哉、早川尚男

§1. Introduction

本講演ではスカラーの秩序変数の場の中に静的不純物が乱雑に分布している系での動的秩序化に関する研究を報告した。ここでは不純物との相互作用を秩序変数の符号反転対称性を持つ Random Bond Model と同じ Universality に属するものとし、系の Effective Hamiltonian として次式の Ginzburg - Landau Hamiltonian を考えた

$$H_{eff}[S] = \int d^d \tau \left[\frac{K(\vec{\tau})}{2} (\nabla S(\vec{\tau}))^2 - \frac{\tau(\vec{\tau})}{2} S(\vec{\tau})^2 + \frac{g}{4} S(\vec{\tau})^4 \right], \quad (1)$$

但し $S(\vec{\tau})$ は秩序変数場であり、 $K(\vec{\tau}) (\geq 0)$, $\tau(\vec{\tau})$ に不純物の効果が含まれる。また秩序化の動力学を記述する方程式は次式の時間に依存した Ginzburg - Landau 方程式 (TDGL 方程式) である。

$$\frac{\partial S(\vec{\tau})}{\partial t} = -L_\beta(\nabla^2) \frac{\delta H_{eff}}{\delta S(\vec{\tau})} + \eta(\vec{\tau}, t) \quad (2)$$

ここで $L_\beta(\nabla^2)$ は ∇^2 の関数であり、秩序変数が保存しない系 (非保存系) では β を 0 とし $L_0(\nabla^2)$ は正定数 $\tilde{L}_0$ であり、保存する系 (保存系) では β を 1 とし $L_1(\nabla^2)$ は ∇^2 の関数となる、不純物のない系では $\tilde{L}_1$ を正定数として $L_1(\nabla^2) = -\tilde{L}_1 \nabla^2$ となる。また $\eta(\vec{\tau}, t)$ は熱揺動力であり、その平均が次式で与えられる Gaussian White Noise とする。

$$[\eta(\vec{\tau}, t)]_{av} = 0, \quad [\eta(\vec{\tau}, t) \eta(\vec{\tau}', t')]_{av} = 2TL_\beta \delta(\vec{\tau} - \vec{\tau}') \delta(t - t') \quad (3)$$

不純物のない系を高温のいわゆるパラ状態 ($T > T_c$) から低温の秩序相 ($T < T_c$) に急冷すると (T_c は平均場の臨界温度)、系は多数のドメインに分かれ、それらは時間と共に成長する。このときドメインの平均サイズ $l(t)$ の時間発展則は非保存系では $l(t) \sim t^{1/2}$ となり、保存系では $l(t) \sim t^{1/3}$ となる。一方本講演の様に不純物の存在する系の急冷を行うと、ドメインを隔てる界面が不純物にピン止めされるため、不純物のない系に比べ相分離の進行が著しく遅くなる。Huse と Henley [1] は、充分時間が経過した段階での時間発展は熱揺動力によって界面が不純物から離れる過程が最も重要であると考え、ドメインの平均サイズ $l(t)$ の時間発展則が保存系、非保存系共に $l(t) \sim (T \log(t))^{\alpha(d)}$ となる事を予言した (ここで d は空間次元であり、 $\alpha(2) = 4$ である。また T は急冷後の温度である)。この予言はいくつかのグループによる非保存系に対する数値実験 [2] と矛盾していないが、定量的な一致は未だどこのグループからも示されていない。

我々は (1) 式のように不純物を含む系に対し秩序変数が保存する場合、しない場合、両方での相分離の数値実験を行った。また不純物がある場合の界面の運動を記述する方程式を解析的に求めた。

§2. 数値計算の方法と結果

数値計算の方法は Oono と Puri [3] のセルダイナミック法を用いた。2次元の系を 128×128 の二種類の正方形セル、不純物セルと非不純物セル、に分割した。位置ベクトルが $\vec{n}$ であるセルの秩序変数を $S_{\vec{n}}$ とおくと、不純物セルに於ては $S_{\vec{n}}$ を 0 とし、非不純物セルでのみ $S_{\vec{n}}$ を定義した。(1) を離散化したハミルトニアンを

$$H_{eff} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}} \left[\sum_{\vec{n}' \in NN(\vec{n})} K_{\vec{n}, \vec{n}'} (S_{\vec{n}} - S_{\vec{n}'})^2 - \tau_{\vec{n}} S_{\vec{n}}^2 + \frac{1}{2} g S_{\vec{n}}^4 \right] \quad (4)$$

とする。但し $\tau_{\bar{n}} = \frac{T}{2d} \sum_{\bar{n}' \in NN(\bar{n})} D_{\bar{n}, \bar{n}'} - T$, $K_{\bar{n}, \bar{n}'} = \frac{K_0}{2} D_{\bar{n}, \bar{n}'}$ とした。ここで $D_{\bar{n}, \bar{n}'}$ は $\bar{n}$ と $\bar{n}'$ の何れかが不純物セルである場合 $D_{\bar{n}, \bar{n}'} = 0$ であり、他の場合 $D_{\bar{n}, \bar{n}'} = 1$ である。また $NN(\bar{n})$ は $\bar{n}$ セルの最隣接セルを表し、 g と K_0 は正定数である。以下では $S_{\bar{n}} = \sqrt{\frac{\tau_0}{g}} \tilde{S}_{\bar{n}}$, ($\tau_0 = T_c - T$) により $S_{\bar{n}}$ を規格化し、適当に無次元化した時間を用いる。(以下 $\sim$ を省く。) 非保存系に於けるセルダイナミクスモデルは

$$S_{\bar{n}}(t+1) = \mathcal{F}[S_{\bar{n}}(t)] + \eta_{\bar{n}}(t) = D\hat{\Delta}_{imp}S_{\bar{n}}(t) + f(S_{\bar{n}}(t)) + \eta_{\bar{n}}(t) \quad (5)$$

となる。但しマップ関数として $f(S) = A^{\tilde{\tau}_{\bar{n}}} S / \sqrt{1 + \tilde{\tau}_{\bar{n}}^{-1}(A^{2\tilde{\tau}_{\bar{n}}} - 1)S^2}$ を使い、 $\tilde{\tau}_{\bar{n}} = \tau_{\bar{n}}/\tau_0$, $A = 1.3$, $D = 0.5$ とした。また $\hat{\Delta}_{imp}$ は次式で定義される差分演算子である。

$$\hat{\Delta}_{imp}S_{\bar{n}} = \frac{1}{6} \sum_{\bar{n}' \in NN(\bar{n})} D_{\bar{n}, \bar{n}'}(S_{\bar{n}'} - S_{\bar{n}}) + \frac{1}{24} \sum_{\bar{n}' \in NN(\bar{n})} \sum_{\bar{n}'' \in NNN(\bar{n})} D_{\bar{n}, \bar{n}'} D_{\bar{n}', \bar{n}''}(S_{\bar{n}''} - S_{\bar{n}}) \quad (6)$$

ここで $NNN(\bar{n})$ は $\bar{n}$ の第二隣接セルを表わす。 $\hat{\Delta}_{imp}$ は隣接セルに不純物がない場合には Laplacian に対応する差分演算子であり、不純物がある場合は不純物とのカップリングを切る効果を持った差分演算子である。また熱揺動 $\eta_{\bar{n}}(t)$ を $[-B, B]$ の値をとる一様乱数とし、 $B = 0.3\sqrt{T/T_c}$ とした。保存系に於けるセルダイナミクスモデルは

$$S_{\bar{n}}(t+1) = S_{\bar{n}}(t) - \hat{\Delta}_{imp}\{\mathcal{F}[S_{\bar{n}}(t)] - S_{\bar{n}}(t)\} + \eta_{\bar{n}}(t) \quad (7)$$

となる。但し熱揺動は次式のベクトル熱揺動 $\vec{\sigma}_{\bar{n}}(t)$ を使い

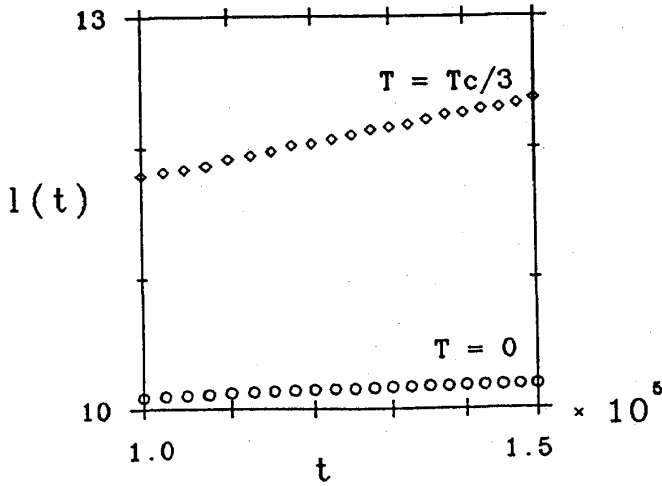
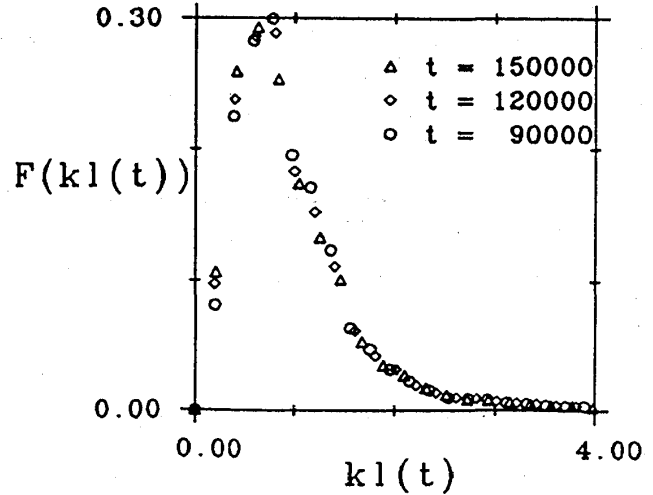
$$\eta_{\bar{n}}(t) = D_{\bar{n}, \bar{n}+\hat{x}}(\sigma_{\bar{n}+\hat{x}, x}(t) - \sigma_{\bar{n}, x}(t)) + D_{\bar{n}, \bar{n}+\hat{y}}(\sigma_{\bar{n}+\hat{y}, y}(t) - \sigma_{\bar{n}, y}(t)) \quad (8)$$

とした。ここで $\hat{x}, \hat{y}$ はそれぞれ x, y 方向の単位ベクトルである。またベクトル熱揺動の x, y 成分 $\sigma_{\bar{n}, x}(t), \sigma_{\bar{n}, y}(t)$ を $[-B, B]$ の値をとる一様乱数とした。数値実験に含まれるコントロールパラメータは不純物濃度 (c) と急冷の深さ T/T_c があり、各パラメータ ($c, T/T_c$) に対して行った実験の回数は、不純物配位による平均数 (5 或は 7) と秩序変数の初期配位とノイズ列による平均数 (5 或は 7) を併せて 5×5 回或は 7×7 回である。非不純物セルでの $S_{\bar{n}}$ の初期値は $[-0.125, 0.125]$ の一様乱数とした。また周期境界条件を用いている。

実験では秩序変数の同時刻二体相関関数のフーリエ変換である散乱関数 ($S(k, t)$) を測定した。また系の特徴的長さ $l(t)$ を保存系では散乱関数の一次のモーメントの逆数として定義し、非保存系では $l(t) = 128 \times 128 / [\text{界面長}]$ と定義して、その時間発展も測定した。但し界面長とは秩序変数の符号の変わる隣接セル対の数である。

保存系の数値実験で得られた 100000 ステップ以降の時間領域での $l(t) - \log(t)^4$ プロットを次頁の図 1 に示した。実験のデータは直線上に並んでいる様に見える Huse と Henley の予言と矛盾しない、非保存系でも同様 $l(t) \sim \{\log(t)\}^x$ が成立している事を確認した。但し指数 x の値については解析中であり、今の処 $x = 4$ と同定する根拠はない。

またパターンの自己相似的時間発展 (スケール性) の有無を見るため、散乱関数のスケールングプロットを行った。不純物のない系では充分時間が経過すると、系の持つ特徴的長さがドメインの平均サイズだけとなるため、スケール性が成立すると考えられている。一方不純物の有る系に於ける特徴的長さは、ドメインの平均サイズ ($l_D(t)$) の他不純物分布に依存した長さ (例えば平均不純物間距離) (l_I) があるため、厳密な意味でのスケール性は成立しない筈である。しかし相分離の進んだ後期段階では $l_D(t) \gg l_I$ が成立し、この二つの長さが分離されるならば、散乱関数のピーク付近では $l_D(t)$ によるスケール性が成立するだろう。もちろん初期段階ではこの二つの長さが拮抗する為スケール性は現われないだろう。

図1 $l(t) - \log(t)^4$ プロット ($c = 0.1$)図2 $F(kl(t)) - kl(t)$ プロット ($T = \frac{2}{3}T_c, c = 0.1$)

数値実験の結果、保存系、非保存系共にある程度時間が経過した後スケール性が成立している様に見える。図2に保存系の数値実験で得られた100000ステップ以降のスケール関数 $F(kl(t)) = S(k, t)l(t)^{-2}$ の一例を示した。スケール性が現われている様に見える。また100000ステップ以前ではスケール性は現れていない。

以上数値実験の結果、保存系に於いても特徴的長さの時間発展則が Huse と Henley の予言と矛盾しない事が確認された。またランダム磁場の問題ではスケール性は現われなと言われていたが、本講演の様な Random Bond Model と同じ Universality に属する系に於てはスケール性が現れるのではないだろうか。

§3. 界面の運動方程式

前節では数値実験の結果を提示した。本節では不純物のある系での界面の運動を理解するために、非保存系の TDGL 方程式に基づき不純物と界面の相互作用を検討してみる。簡単の為一次元非保存系に於て、不純物が一つ存在する場合の界面の運動について考える。本節でも適当に規格化した秩序変数場、無次元化した時間を用いる。ここで考える系の Effective Hamiltonian は次式で与えられる

$$H_{eff}[S] = \int dx \left[\frac{\epsilon^2}{4} (\partial_x S(x))^2 - \frac{\tilde{\tau}(x)}{2} S(x)^2 + \frac{1}{4} S(x)^4 \right], \quad \tilde{\tau}(x) = 1 - \tilde{\tau}_R \delta(x), \quad (9)$$

ここでは局所的な不純物が原点にあり、簡単の為不純物の効果は $\tilde{\tau}(x)$ だけに表われるとした。また ϵ と $\tilde{\tau}_R$ は正定数であり、 $\delta(x)$ はデルタ関数である。系の動力学を記述する TDGL 方程式は

$$\frac{\partial S(x, t)}{\partial t} = -\frac{\epsilon^2}{2} \frac{\partial^2 S(x, t)}{\partial x^2} + S(x, t) - S(x, t)^3 - \tilde{\tau}_R \delta(x) S(x, t) + \eta(x, t) \quad (10)$$

となる。ここで $\eta(x, t)$ は熱揺動力であり、以下では熱揺動力を無視する。

(6) 式には次の2つの境界条件を満たす線形安定な定常解が存在する。一つは境界条件

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} S(x) = \pm 1, \quad \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \partial_x S(x) = 0 \quad \text{を満たす解で}$$

$$S(x) = M(x) = \tanh\{x/\epsilon\} \quad (11)$$

で与えられ、不純物位置への界面のピン止め状態を表わしている。もう一つは境界条件

$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} S(x) = 1$, $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \partial_x S(x) = 0$ を満たす解で

$$S(x) = u_0(x) = \tanh\{(|x| + \Delta x)/\epsilon\}, \quad \frac{\Delta x}{\epsilon} = \frac{1}{2} \ln\left\{\sqrt{1 + \left(\frac{2\epsilon}{\tilde{\tau}_R}\right)^2} + \frac{2\epsilon}{\tilde{\tau}_R}\right\} \quad (12)$$

で与えられ、不純物の影響による秩序変数場の変化（以下ホールと呼ぶ）を表わしている。

さて界面の位置と不純物の位置が異なる場合は、界面と不純物近傍のホールの相互作用で界面の運動が生じると予想される。それを示すため、上の解を用い秩序変数場を近似的に表現し、並進運動のモードを取り出す事により界面の位置に対する運動方程式を求めてみる。

まず界面を表わすキंक解 $M(x - x_0) = \tanh\{(x - x_0)/\epsilon\}$ と以下で求める不純物近傍のホールを表わす関数 $h(x)$ との重ね合わせで秩序変数場を近似的に表現する。ここで界面の位置を $x = x_0(t)$ とし、しばらくは $x_0 < 0$ とする。 $S(x, t) = M(x - x_0(t)) + h(x, t)$ を TDGL 方程式に代入すると

$$\begin{aligned} -\frac{dx_0}{dt} \frac{\partial M(x - x_0(t))}{\partial x} + \frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = & -\frac{\partial^2 M(x - x_0)}{\partial x^2} + M(x - x_0) - M(x - x_0)^3 \\ & -\frac{\partial^2 h(x, t)}{\partial x^2} + (h(x, t) + 1) - (h(x, t) + 1)^3 - \tilde{\tau}_R \delta(x)(M(x - x_0) + h(x, t)) \\ & + 3(1 - M(x - x_0)^2)h(x, t) + 3(1 - M(x - x_0))h(x, t)^2 \end{aligned} \quad (13)$$

となる。ここで (13) 式右辺第 1 行目は $M(x - x_0)$ の定義より 0 である。 $h(x)$ を境界条件

$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} h(x) = 0$, $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \partial_x h(x) = 0$ を満たし、[(13) 式右辺第 2 行目] = 0 の解とする。従って $h(x)$ は $x_0 > 0$ の場合も含めて次式で与えられる。

$$h(x) = \frac{\text{sign}(x_0) h_0 \exp(-|x/\epsilon|)}{\cosh(x/\epsilon) + (1 - h_0) \sinh(|x/\epsilon|)}, \quad (14)$$

$$h_0 = 1 + \frac{\tilde{\tau}_R}{2\epsilon} - \sqrt{\left(1 + \frac{\tilde{\tau}_R}{2\epsilon}\right)^2 - \frac{\tilde{\tau}_R}{\epsilon} \tanh\left|\frac{x_0}{\epsilon}\right|} \quad (15)$$

ここで $\text{sign}(x)$ は階段関数で $x > 0$ の時 $\text{sign}(x) = 1$ であり、 $x < 0$ の時 $\text{sign}(x) = -1$ である。この $S(x)$ は次の二つの性質を持つ。(a) 界面の位置 $x_0 \rightarrow \pm\infty$ でホールの定常解 (8) に一致し、(b) $x_0 = 0$ で定常解 (7) に一致する。(13) 式右辺第 3 行目をホールとキंकの相互作用項と考え、この項から並進運動のモードを取り出すため (13) 式両辺に $\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial M(x - x_0)}{\partial x}$ を施す。不純物と界面が充分離れている ($|x_0| \gg \epsilon$) 場合の界面の運動方程式を求めると

$$\sigma \frac{dx_0(t)}{dt} = -16 \text{sign}(x_0) \exp(-2|x_0/\epsilon|) + o(\exp(-4|x_0/\epsilon|)), \quad \sigma = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{\partial M}{\partial x}\right)^2 \quad (16)$$

となる。これよりキंक-不純物間には、指数関数的短距離引力が働く事が分かった。またこれは一次元キंक-アンチキंकの相互作用と本質的に同一の形となっている。

references

- [1] D.A.Huse and C.L.Henley :Phys.Rev.Lett.54(1985)2708.
- [2] H.Hayakawa :J.Phys.Soc.Jpn.60(1991)2492.
- A.J.Bray and K.Humayun :J.Phys.A24(1991)11185
- S.Puri, D.Chowdhury and N.Parekh J.Phys.A24(1991) L1087
- [3] Y.Oono and S.Puri :Phys.Rev.Lett.58(1987)836, Phys.Rev.A38(1988)434
- S.Puri and Y.Oono :Phys.Rev.A38(1988)1542, J.Phys.A21(1988)L755