物性研究 43－5(1985－2)

講義ノート

相転移のダイナミクス

九大・理　川　崎　恭　治

（1984年12月11日受理）

§1　はじめに

“相転移”というと非常に広範な領域がその中に含まれる。なかでもひと昔前までは“相転移＝臨界現象”の感が強かったが，ここでは臨界現象については一切取り扱わず，主として一次相転移の dynamics およびそれから発生する種々の問題について述べる。

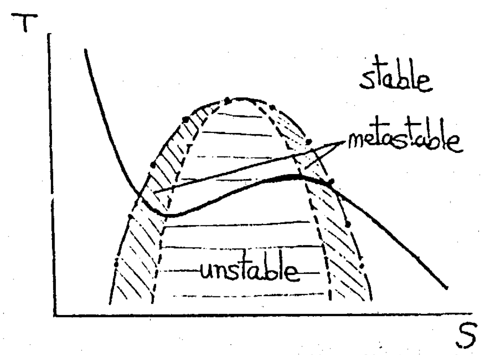

Fig. 1　van der Waals気体の状態曲線
－・－・　共存曲線
…………　spinodal線

KAWASAKI, Kyōji
記録：京大・理　化学　大志万洋人，松本充弘

Fig. 1 はよく知られた van der Waals 気体の状態曲線である。(T は温度，S はオーダパラメタ，ここでは密度と考えればよい) 相図は，平衡状態である安定領域，非平衡状態で無限小の摂動に対してさえ不安定な不安定領域，そして同じく非平衡状態ではあるが小さな摂動に対しては安定に存在し得る準安定領域の 3 つに分けられる。周知のとおり安定領域と準安定領域を分ける曲線が共存曲線であるが，準安定領域と不安定領域を分ける曲線は，“spinodal 線”と呼ぶことができる。これは，何らかの方法で系を安定領域からこの線上まで急冷したとすると，いわゆる spinodal 分解が起こるからである。この事情は Fig. 2 を見ればよくわかる。これは，同じく van der Waals 気体について一定圧力の下で，ギブス自由エネルギー G を温度に対してあらわしたものである。系の温度を下げてゆくと，平衡状態から共存点を通り越して準安定状態となり，spinodal 線にぶつかって不安定となり，相転移が起きる。この状態線と spinodal 線の交点付近が“とげ (spine)”のように見えることがその名の由来である。

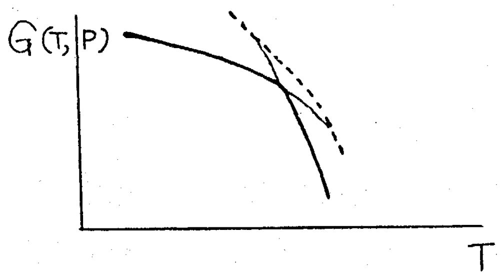

Fig. 2　van der Waals 気体の等圧曲線
━━ 平衡状態　─── 準安定状態
……… spinodal 線

Fig. 3 は急冷により非平衡状態におかれた系の時間的ふるまいを模式的に示したものである。準安定領域に急冷した場合には，有限の大きさの臨界核が生成し，それが次第に広がっていくという形で相転移が進行する。これに対して不安定領域に急冷した場合は無限小の摂動に対してさえ不安定であるから熱的ゆらぎが平面波の形で伝わっていく。

このような現象は古くから実在の系で広く観察されており，また Ising model の計算機実験などでも同様の結果が見出されている。

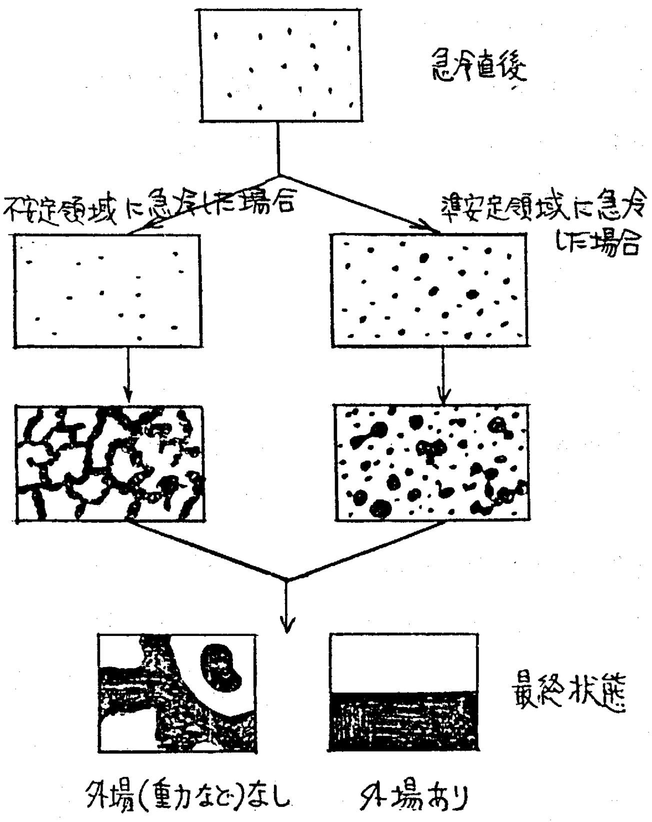

Fig. 3　非平衡状態への急冷

§2　非可逆過程の熱力学——線型理論

上に見たような熱的ゆらぎと熱力学的不安定性をどのように結びつければよいだろうか。最も単純なモデルとして，1950年代

Cahn, Hilliardらによって次のような線型理論が提出された。

Sを相転移を記述するオーダパラメタとする。Sが時間的にどう変化するかが興味の中心であり，これを（2.1）式のように，熱力学的力Xと輸送係数L（>0）であらわすことができる。

$$\frac{\partial S}{\partial t} = LX \tag{2.1}$$

力Xは熱力学的ポテンシャル$\Phi(S)$であらわせるものとする。

$$X = -\frac{\partial \Phi}{\partial S} \tag{2.2}$$

$\Phi(S)$としてはさまざまな形が考えられるが，時刻$t=0$で$S=0$という初期条件をつけると，最も簡単には

$$\Phi(S) = \frac{1}{2}KS^2 \qquad (K\text{はある定数}) \tag{2.3}$$

このとき

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -LKS \tag{2.4}$$

となりKの正負によって系のふるまいが記述できたことになる。即ち

$$\begin{cases} K>0\text{のときゆらぎは時間と共に減衰し，系は安定である。} \\ K<0\text{のときゆらぎは時間と共に増大し，系は不安定である。} \end{cases}$$

ここでSが時間と空間の関数であると考えよう。

$$S = S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}},\ t) \tag{2.5}$$

そうすると，（2.4）よりSの全空間での積分$\int d\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}\,S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}},\ t)$が時間に依ることから，上の取り扱いは（$S$に関して）非保存系の場合であることがわかる。保存系の場合には，輸送係数Lの代わりに$-L\nabla^2$を用いればよい。このとき（2.4）は

$$\frac{\partial S}{\partial t} = LK\nabla^2 S \tag{2.4$'$}$$

となるから

$$\frac{\partial}{\partial t}\int d\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}\,S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}},\ t) = LK\int d\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}\,\nabla^2 S = 0 \tag{2.6}$$

であって，確かに保存系であることがわかる。

保存系の例としては，溶液の相分離や合金のスピノーダル分解などがあり，非保存の例には，

合金のorder-disorder転移や誘電体・磁性体の相転移などがあげられる。

次に，熱力学的ポテンシャル$\Phi(S)$に空間の非一様性を含めることにしよう。

$$\Phi(S)=\int \mathrm{d}\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}\left[\frac{1}{2}KS^2+\frac{1}{2}(\underset{\sim}{\nabla}S)^2\right] \tag{2.7}$$

先に述べたように転移点付近ではKがゼロに近くなるため，第2項が大きな寄与をもつ可能性がある。この第2項は$S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}},t)$が空間的に一様になろうとする性質を記述しているものである。(2.7)を用いると，$S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}},t)$の時間変化を記述する方程式として次式を得る。

$$\frac{\partial S}{\partial t}=L(-\mathrm{i}\underset{\sim}{\nabla})^{\alpha}[\tau+\nabla^2]S \tag{2.8}$$

$$\alpha=\begin{cases}0 & \text{非保存系}\\ 2 & \text{保存系}\end{cases}$$

ここで$-K=\tau$とおいた。我々は，不安定領域でのdynamicsに注目しているのであるから，今後$\tau>0$（$K<0$）の場合に限って話をすすめる。

(2.8)は，空間的にFourier展開することにより，容易に解くことができる。

$$S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}},t)=\sum_{\underset{\sim}{\boldsymbol{k}}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underset{\sim}{\boldsymbol{k}}\cdot\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}}S_{\underset{\sim}{\boldsymbol{k}}}(t) \tag{2.9}$$

とおくと，(2.8)は

$$\begin{cases}\dfrac{\partial S_{\underset{\sim}{k}}}{\partial t}=\Gamma_k S_{\underset{\sim}{k}}\\[2ex] \Gamma_k=Lk^{\alpha}(\tau-k^2)\end{cases} \tag{2.10}$$

となる。このΓ_kは波数kのゆらぎの成長率をあらわすことになる。

Fig. 4にΓ_kの波数依存性を示す。非保存系($\alpha=0$)の場合は$k=0$のゆらぎが最も不安定であり速く成長する。ある値($\sqrt{\tau}$)以上の波数のゆらぎは成長しない。一方保存系($\alpha=2$)では，$k=0$付近のゆらぎは保存則のために成長を押えられており，ある値($k_{\mathrm{m}}=\sqrt{\dfrac{\tau}{2}}$)で最大の成長率をもっている。

1970年代に至るまで，この非可逆過程の熱力学を用いた理論はこの線型理論を越えて大きく発展することはなく，せいぜい非線型性を摂動論で議論する程度のものであった。しかし，実際の現象と比較すると，この線型理論は大きな欠点を持っていることがわかる。1つには，$t\to\infty$の極限で，波数が$\sqrt{\tau}$よりも小さなゆらぎは際限なく大きくなって，共存曲線上に落ちつくことが決してない。これは線型理論がSの無限小のゆらぎの時間発展を記述する式(2.8)から出発していることを思えばむしろ当然のことであろう。また，この理論で取り扱うと局所

的な相分離が実際の現象がおこる time scale（数分～数時間以上）に比べて極めて短時間のうちに終わってしまうことも重大な難点である。

線型理論の欠点を端的にあらわすものとして，各種散乱実験において観測される散乱強度 $I_k(t) \propto \langle |S_k(t)|^2 \rangle$ を調べてみよう。保存系では Fig. 5 のようになる。線型理論では明らかにスペクトルのピークは時間によって移動せず，常に $\sqrt{\tau/2}$ のところにあることが期待される。これに対して，多くの実験ではピークの位置が時間と共に小さくなっていくことが観測される。時間が十分にたつとこのピークの位置は $k=0$ のところにくるが，これは空間的に相分離が完成されたことを意味している。このようなスペクトルの移動は，線型理論では全く説明のつかないものであり，最初から非線型性を考慮した一般的な取り扱いが必要であることを示唆している。

§3　非可逆過程の熱力学――非線型理論

非線型性をとり入れたモデルとして最も簡単なのは熱力学ポテンシャルに S の4次の項を含めたものである。

$$\left\{\begin{aligned} &\Phi(S)=\int d\underset{\sim}{r}\left[\frac{1}{2}(\nabla S)^2+\phi(S)\right] \\ &\phi(S)=-\frac{1}{2}\tau S^2+\frac{g}{4!}S^4 \qquad \tau,\ g>0 \end{aligned}\right. \tag{3.1}$$

$$\frac{\partial S}{\partial t}=L\left\{(\tau+\nabla^2)S-\frac{g}{6}S^3\right\} \tag{3.2}$$

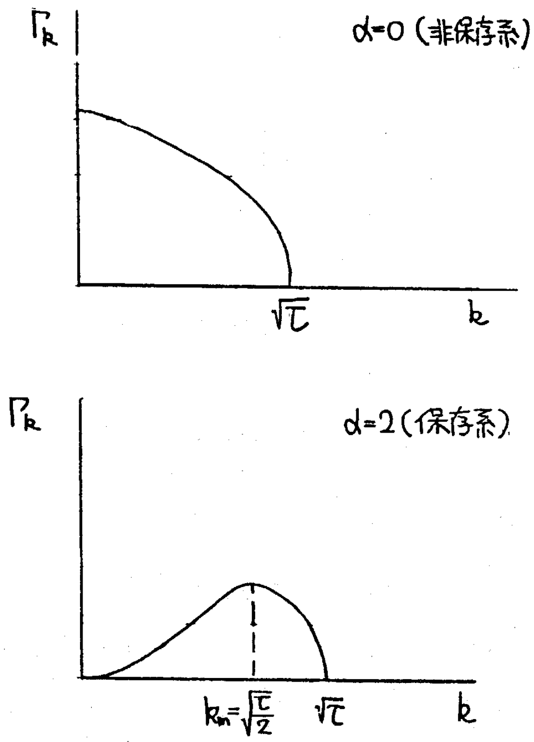

Fig. 4　ゆらぎの成長率

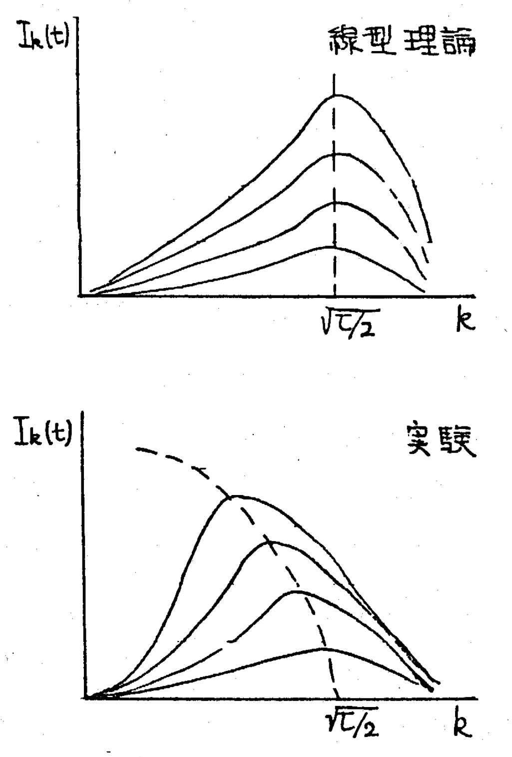

Fig. 5　ゆらぎの時間的成長（保存系）

こうすると $t\to\infty$ でゆらぎが際限なく大きくなることはあり得ず，最終的にはポテンシャル最小の点に落ち着くことが期待される。共存曲線は

$$0=\phi'(S)=-\tau S+\frac{g}{6}S^3 \qquad \therefore\ S=\pm\sqrt{\frac{6\tau}{g}}\equiv\pm M_e \tag{3.3}$$

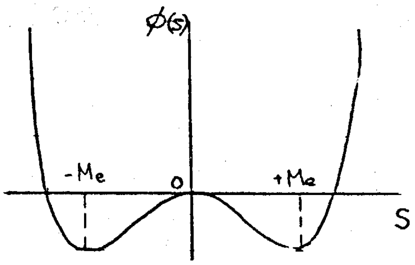

Fig. 6　非線型ポテンシャル

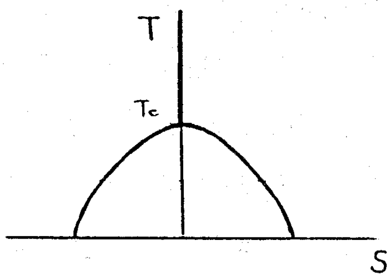

Fig. 7　共存曲線

ここで，τ は転移点の前後で符号を変えるから最も簡単には

$$\tau = a\,(T_c - T) \qquad a\text{は正の定数} \tag{3.4}$$

(3.2) を見れば，非線型性を普通の摂動として扱う線型理論が破綻した原因がわかる。なぜなら仮に g が小さいとしても S が時間と共に指数関数的に増大するために，やがて $\frac{g}{6}S^3$ の項を摂動と見なすことが不可能になるからである。

Laser 発振の問題のように空間的変化を考えない ((3.2) で $\nabla^2 S$ の項がない) 場合には，既に鈴木増雄氏らによって Scaling 理論・特異摂動論として発展させられている。

これに対して空間的自由度をも取り入れた (3.2) 式自体は非線型項による Fourier成分間の coupling と，gradient 項による実空間内の coupling が共存しているために極めて解析が困難なものになっている。

一般的な考察は §4 で行うことにして，ここでは gradient 項の重要性について調べてみよう。考えている系の大きさをあらわす長さを R，また coherent lengthを ξ_0 とすると，$\xi_0 \gg R$の場合には，系は常に空間的に一様であると考えることができて，active な自由度はただ時間的なものだけに限られる。これに対して $R \gg \xi_0$ の場合には，空間的に active な自由度の数が $(R/\xi_0)^d$ (d は空間の次元) 程度になる。ξ_0 は Laser 発振の場合の $10^3 \sim 1$m，超伝導体の場合の $10^4 \sim 10^2$Å といった特殊な例を除くと，一般に $10^2 \sim 1$Å の程度であるから，巨視的な系を扱う際には，空間的自由度は決して無視できない。このような事情は相転移に限られたものではなく，広く非平衡系の dynamics を論ずる際に問題となってくる。たとえば Bénard対流の例では空間的自由度の数をロールの本数で見つもることができ，ξ_0として厚さをとると [Fig. 8]〝aspect比″ $\Gamma \equiv R/\xi_0$ の大きさによって，系が全く異なったふるまいをすることが知られている。つまり $\Gamma \ll 1$ ではロール形成が見られず，また $\Gamma \gtrsim 1$ では数本のロールからなる少数自由度系として〝力学系のカオス″という

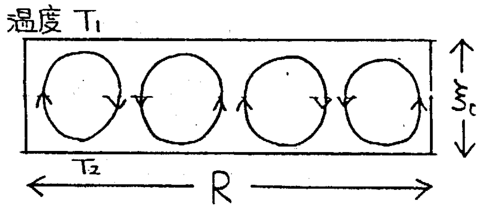

Fig. 8　Bénard対流 ($T_1 < T_2$)

観点から研究が進んでいるが，$\Gamma \gg 1$ の場合には問題に質的な差があると考えられており，今後に残された大きな問題である。

§4 Time-Dependent Ginzburg-Landau モデル

空間的自由度の非常に大きい場合には，§3で述べたことから次のような Time-Dependent Ginzburg-Landau (TDGL) モデルが考えられる。

$$\frac{\partial}{\partial t} S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}, t) = -L(-\mathrm{i}\underset{\sim}{\nabla}) \frac{\delta \Phi(S)}{\delta S} + f(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}, t) \tag{4.1}$$

$$L(-\mathrm{i}\underset{\sim}{\nabla}) = L_0 \cdot (-\mathrm{i}\underset{\sim}{\nabla})^{\alpha} \qquad L_0 \text{ は正定数} \tag{4.2}$$

$$\alpha = \begin{cases} 0 & \text{非保存系} \\ 2 & \text{保存系} \end{cases}$$

$$\Phi(S) = \int \mathrm{d}\underset{\sim}{\boldsymbol{r}} \left[\frac{1}{2} (\underset{\sim}{\nabla} S)^2 - \frac{\tau}{2} S^2 + \frac{g}{4!} S^4 \right] \qquad \tau,\ g \text{ は正定数} \tag{4.3}$$

(4.1) は一般に非線型 Langevin 方程式と言われるものであり，$\frac{\delta}{\delta S}$ は S による汎関数微分をあらわす。$f(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}, t)$ は熱的ゆらぎの効果をあらわす random force であって，揺動散逸定理から輸送係数の演算子 $L(-\mathrm{i}\underset{\sim}{\nabla})$ と次のような関係がある。

$$\langle f(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}, t) f(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}', t') \rangle = 2 k_{\mathrm{B}} T L(-\mathrm{i}\underset{\sim}{\nabla}) \delta(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{r}}') \delta(t - t') \tag{4.4}$$

ただし T は系の温度，k_{B} はBoltzmann定数である。

同じことを S の分布関数 $P(\{S\}, t)$ の方程式として書けば

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\{S\}, t) = \int \mathrm{d}\underset{\sim}{\boldsymbol{r}} \frac{\delta}{\delta S} L(-\mathrm{i}\underset{\sim}{\nabla}) \left[\frac{\delta}{\delta S} + \frac{1}{k_{\mathrm{B}} T} \frac{\delta \Phi(S)}{\delta S} \right] P(\{S\}, t) \tag{4.5}$$

となる。(4.5) から，このモデルが定常解

$$P_{\mathrm{e}}(\{S\}) \propto \exp\left[-\Phi(S)/k_{\mathrm{B}} T \right] \tag{4.6}$$

を有することがただちにわかる。

(4.1), (4.5) で与えたモデルは連続体に対するものであるが，discreteなモデルを同様にしてつくることもできる。一般に連続体モデルは理論的解析に便利であり，discreteモデルは計算機実験に向いている。しかし，系の適当な粗視化によってdiscreteモデルから連続体モデルに移行することが可能である。たとえば Monte Carloシミュレーションで使われる Ising モデルにおいては個々のスピンを平均して粗視化することにより，連続体と見なすことができる。この場合，各スピンの独立な反転を許すGlauber型シミュレーションは $\alpha = 0$ の非保存系

に対応し，またスピン対での交換のみを許すSpin Exchange型シミュレーションは$\alpha=2$の保存系に対応している。

TDGLモデルはまた適当な項をつけ加えることによって広範囲の現象に適用できるという長所をもっている。例として溶液の臨界現象を考えてみよう。オーダパラメタとしては臨界濃度からのずれ$C(\underset{\sim}{r},t)-C_c\equiv S(\underset{\sim}{r},t)$をとることにする。この場合には，格子点そのものが動くために局所的なオーダパラメタの時間変化を記述するには(4.1)だけでは不十分であり，速度場$\underset{\sim}{v}(\underset{\sim}{r},t)$の効果を考慮すると

$$\left\{\begin{array}{l}\dfrac{\partial}{\partial t}S(\underset{\sim}{r},t)=-\underset{\sim}{\nabla}[S(\underset{\sim}{r},t)\cdot\underset{\sim}{v}(\underset{\sim}{r},t)]-L_0(-i\underset{\sim}{\nabla})^2\dfrac{\delta\Phi(S)}{\delta S}+f(\underset{\sim}{r},t)\\[2ex] \Phi(S)=\int d\underset{\sim}{r}\left[\dfrac{1}{2}(\underset{\sim}{\nabla}S)^2-\dfrac{\tau}{2}S^2+\dfrac{g}{4!}S^4\right]\end{array}\right. \tag{4.7}$$

としなければならない。速度場は流体力学の式に従い

$$\left\{\begin{array}{ll}\dfrac{\partial}{\partial t}\underset{\sim}{v}(\underset{\sim}{r},t)=-(\underset{\sim}{\nabla}\mathcal{T})_\perp+\dfrac{\eta}{\rho}\nabla^2\underset{\sim}{v}_\perp+\underset{\sim}{f}_v & (\eta:\text{粘性係数}\quad\rho:\text{密度})\\[2ex] \mathcal{T}=\underset{\sim}{\nabla}S\underset{\sim}{\nabla}S & (\text{Stress tensor})\end{array}\right. \tag{4.8}$$

ここで⊥をつけた量はその発散がゼロになるsolenoidal partをあらわす。(4.7)と(4.8)からS，$\underset{\sim}{v}$を決めるのであるが，Sの時間変化に比べて$\underset{\sim}{v}$の時間変化は通常極めて速いために，$\underset{\sim}{v}$はSの変化に常に追随していると考えられる。そこで$\dfrac{\partial}{\partial t}\underset{\sim}{v}=0$という近似(断熱消去法)をすることができる。

結果を，Sの分布関数$P(\{S\},t)$の時間変化についてあらわすと

$$\frac{\partial}{\partial t}P(\{S\},t)=\mathcal{L}P(\{S\},t) \tag{4.9}$$

$$\mathcal{L}=\mathcal{L}_{\mathrm{TDGL}}+\mathcal{L}_{\mathrm{HD}}$$

$$\left\{\begin{array}{l}\mathcal{L}_{\mathrm{TDGL}}=\int d\underset{\sim}{r}\dfrac{\delta}{\delta S}L_0\cdot(-i\underset{\sim}{\nabla})^2\left[\dfrac{\delta}{\delta S}+\dfrac{\Phi(S)}{k_BT}\right]\\[2ex] \mathcal{L}_{\mathrm{HD}}=\iint d\underset{\sim}{r}_1\,d\underset{\sim}{r}_2\dfrac{\delta}{\delta S(\underset{\sim}{r}_1)}2\underset{\sim}{\nabla}_1S(\underset{\sim}{r}_1)T(\underset{\sim}{r}_1-\underset{\sim}{r}_2)\underset{\sim}{\nabla}_2S(\underset{\sim}{r}_2)\end{array}\right.$$

$$\times\left\{\frac{\delta}{\delta S(\underset{\sim}{r}_2)}+\frac{1}{k_BT}\frac{\delta\Phi(S)}{\delta S(\underset{\sim}{r}_2)}\right\}$$

$$T(\underset{\sim}{r})=\frac{1}{8\pi\eta}\left(\frac{1}{\eta}1+\frac{\underset{\sim}{r}\underset{\sim}{r}}{r}\right)\qquad(\text{Oseen tensor})$$

これは通常の TDGL モデルによる S の時間変化に加えて，$T(\underset{\sim}{r})$ による stress tensor の伝播が含まれている点で TDGL モデルの拡張になっている。このような融通性が TDGLモデルの特徴である。

§5 TDGL モデルの近似解法と実験との比較

TDGLモデルを使って，§2 で述べた散乱強度 $I_k(t) \propto < |S_k(t)|^2 >$ の時間変化を調べてみよう。保存系（$\alpha = 2$）の場合には

$$\frac{\partial}{\partial t} I_k(t) = 2L_0 k^2 [(\tau - k^2) I_k(t) + \frac{g}{6} J_k(t)] + 2L_0 k^2 \tag{5.1}$$

ここで $J_k(t)$ は $< S(\underset{\sim}{r})^3 \cdot S(\underset{\sim}{r}') >$ の Fourier 成分である。この $J_k(t)$ を含んでいるために(5.1)は方程式として閉じていない。そこで $J_k(t)$ の時間変化を記述する式を立てると，容易に想像がつくようにその式の中にはさらに高次の $< S^5(\underset{\sim}{r}) \cdot S(\underset{\sim}{r}') >$ の Fourier 成分といった項があらわれてくる。このような Hierarchy 構造は非線型現象を扱う際に常にあらわれてくる問題である。これらの方程式を閉じた形にするためには，どこかで truncate しなければならないが，その方法が次に問題となる。

以前からよく行なわれてきたのは，たとえば

$$< S(\underset{\sim}{r})^3 S(\underset{\sim}{r}') > \simeq 3 < S(\underset{\sim}{r})^2 > < S(\underset{\sim}{r}) S(\underset{\sim}{r}') > \tag{5.2}$$

とするような“decoupling 近似”であった。この近似は $S(\underset{\sim}{r})$ がその平均値のまわりにガウス分布をしているような場合には妥当なものである。しかし，Fig. 9 に示すように，今考えている $S(t)$ は時間がたつと共に急速にガウス分布から離れていき，遂には２つのピークを持つに至るような量であるから，(5.2) の近似を使うわけにはいかない。

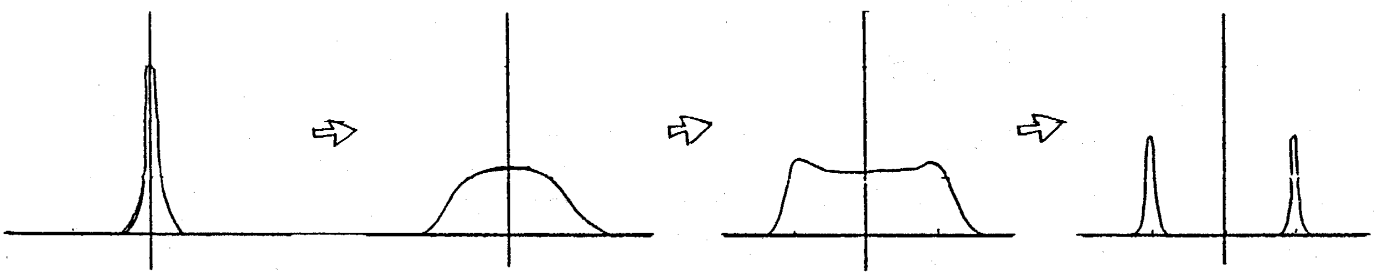

Fig. 9　$S(t)$ の分布の時間変化

Langer は S についてではなく，S の確率分布で decoupling をするという巧妙な方法（LBM 近似）を採用した。[1] まず１点の分布関数を $\rho_1(S(\underset{\sim}{r}))$ と書くことにする。２点の分布関数 $\rho_2(S(\underset{\sim}{r}), S(\underset{\sim}{r}'))$ は，$S(\underset{\sim}{r})$ と $S(\underset{\sim}{r}')$ の相関がなければ

$$\rho_2(S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}),\ S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}')) = \rho_1(S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}))\rho_1(S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}'))$$

と書かれるはずのものであるが，実際には異なる場所の間での相関があるために補正が加わる。条件として

$$\begin{cases} \int \mathrm{d}S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}')\rho_2(S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}),\ S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}')) = \rho_1(S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})) \\ \iint \mathrm{d}S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})\,\mathrm{d}S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}')\rho_2(S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}),\ S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}'))S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})\,S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}') = \langle S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}')\rangle \end{cases} \tag{5.3}$$

を考えると，近似的に

$$\rho_2(S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}),\ S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}')) = \rho_1(S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}))\rho_1(S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}'))\left\{1 + \frac{\langle S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}')\rangle}{\langle S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})^2\rangle^2} S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}')\right\} \tag{5.4}$$

となる。これで２点の分布関数が１点の分布関数であらわせたわけであるから，それぞれの方程式を立てると問題が閉じたことになる。

こういった近似の結果，$I_k(t)$について次の形の方程式を得る。

$$\frac{\partial}{\partial t} I_k(t) = 2L_0 k^2 [A(t) - k^2]\, I(t) + 2L_0 k^2 \tag{5.4}$$

ここで$A(t)$は上の近似の結果得られた方程式をself-consistentに数値積分した時間の関数であり，概形はFig.10に示すように,時間の単調減少関数となっている。§２で述べたように$k_m = \pm\sqrt{A(t)/2}$でピークの成長が最も速いことを考えると，これは，ピークの位置が時間とともに次第に内側（$k=0$）に近づいてくるという実験結果（Fig.５参照）と定性的に一致していることがわかる。

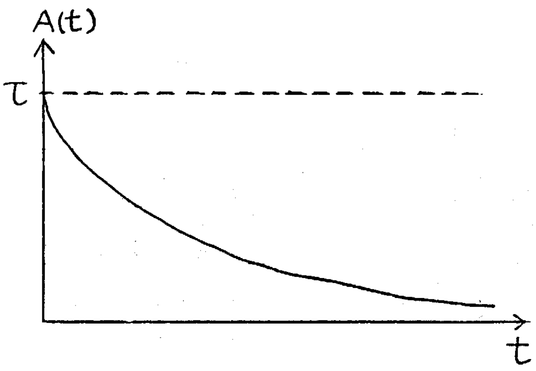

Fig.10

Fig.11は，臨界溶液についての実験例である。（K. Kawasaki and T. Ohta, 1978）[2]適当なscalingにより，異なったquench depthでのピーク位置k_mの対数値が同一直線上にのることが示されている。このうち$k_m(t)/k_m(0) \gtrsim 0.1$の範囲では理論値$k_m(t) \propto t^{-\frac{1}{3}}$にほぼ一致することがわかるが，それ以上の時間がたつとむしろ$k_m(t) \propto t^{-1}$のようなふるまいをする。これについての現象論的取り扱いは1979年Siggiaによってなされた。

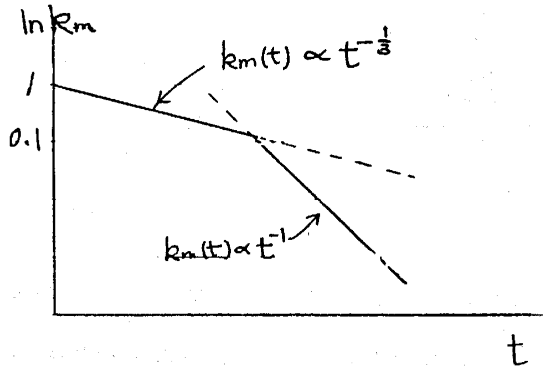

Fig.11

Siggiaは，相転移の過程を次の２つに分けた。

i）　$1 \geq k_{\mathrm{m}}(t)/k_{\mathrm{m}}(0) \gtrsim 0.1$

これは液滴の成長過程（Brownian coagulation）であって，localに２相分離が進行する。このとき，LangerのLBM近似は有効であって

$$k_{\mathrm{m}}(t) \propto \left(\frac{\eta}{k_{\mathrm{B}}T}\right)^{\frac{1}{3}} t^{-\frac{1}{3}} \tag{5.6}$$

ii）　$0.1 \gtrsim k_{\mathrm{m}}(t)/k_{\mathrm{m}}(0)$

液滴が十分に成長した後，表面張力による界面の移動の効果が重要になる。界面の役割については次節以降で詳しく述べるが，このときの $k_{\mathrm{m}}(t)$ の t 依存性については，次元解析だけから議論できる。即ち静水中でのNavier-Stokes方程式

$$0 = \rho\frac{\partial}{\partial t}\underset{\sim}{\boldsymbol{v}} = \underset{\sim}{\nabla}P + \eta\nabla^2\underset{\sim}{\boldsymbol{v}} \qquad (P\text{は圧力}) \tag{5.7}$$

を考えて $k_{\mathrm{m}}^{-1}(t) \equiv l$ をゆらぎの特徴的な長さ，σ を液滴の表面張力とすると $\underset{\sim}{\nabla}P \sim \sigma/l^2$; $\nabla^2\underset{\sim}{\boldsymbol{v}} \sim \boldsymbol{v}/l^2$ を（5.7）の右辺に代入して $\underset{\sim}{\boldsymbol{v}} \sim \sigma/\eta$ を得る。これは $\underset{\sim}{\boldsymbol{v}}$ が時間に依存しないということを示すから，$\underset{\sim}{\boldsymbol{v}} \sim \frac{\partial}{\partial t}l$ より $l \propto t$ 即ち $k_{\mathrm{m}}(t) \propto t^{-1}$ という結果を得るというものである。実験について述べたついでに，Scaling則についても触れておこう。これはスペクトル強度 $I_k(t)$ を適当に規格化すると，次のようなuniversalなふるまいをするというものである。(d は空間の次元)

$$I_k(t)/\int \mathrm{d}k' I_{k'}(t) = l(t)^d \varphi(kl(t)) \tag{5.8}$$

$$l(t) = l_0\, t^{\mu}$$

このようなScaling則は，最初臨界現象の理論からの類推として予想され，計算機実験で見出されたものであるが，今日では通常の実験でも広く認められている。これも線型理論では説明がつかないばかりか，非線型理論でも取り扱いの厄介な問題である。

§6　TDGL方程式における情報の縮約

前節までに見たように，TDGL方程式は連続近似の範囲内ではあるがあらゆる情報をほとんどすべて含んでいるがゆえに，その取り扱いは極めて厄介であり，まして一般解を得ようというのは絶望的である。そこで，気体力学や流体力学で，ミクロな方程式から適当な情報縮約の操作によってBoltzmann方程式やNavier-Stokes方程式を導びき成功をおさめた例にならって，今の場合もTDGL方程式を縮約することで，問題の核心をとらえることを考えてみよう。

情報の縮約に際して問題となるのは，どういう条件下でその縮約操作が許されるか，という

ことである。Boltzmann方程式を導びく際には，気体が十分希薄であるということ，言い換えれば粒子半径に比べて平均自由行程が十分長いということが必要条件であった。TDGL方程式の場合はどうだろうか。

次のTDGL方程式に従う系について，十分に時間がたった後のふるまいを考えてみよう。これは前節で述べたように界面のふるまいを考えることと同じである。

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial t} S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}},\ t) = -L\dfrac{\delta H}{\delta S} + f \\ \dfrac{\delta H}{\delta S} = -\nabla^2 S - \tau S + \dfrac{g}{6} S^3 \end{cases} \tag{6.1}$$

時間が十分にたって界面がゆっくりと運動をするようになったということは界面にはたらく力が小さいということを意味している。その極限として，まず

$$\frac{\delta H}{\delta S} = 0 \tag{6.2}$$

の場合を考える。容易にわかるように，(6.2)は，次の2つの解を持っている。

1) 空間的に一様な解

$$S = \pm M_e,\quad M_e \equiv \sqrt{6\tau/g} \tag{6.3}$$

もちろん$S=0$も解ではあるが，明らかにこれは不安定であるから取り上げない。

2) 一次元的に変化する解

たとえばx方向にのみ変化すると仮定すると任意のx_0に対して

$$S(x) = \pm M_e \tanh\sqrt{\tau/2}\,(x - x_0) \tag{6.4}$$

が解となっている。これはFig.12に示すような平面波解であり，$\xi \simeq \tau^{-\frac{1}{2}}$程度で急激に変化する界面をあらわしている。

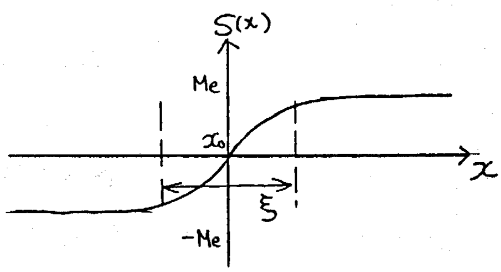

Fig. 12

2)から，一般に界面が形成された場合，その曲率半径Rが(6.4)の界面領域の厚さξに比べて十分に大きければ，その界面はTDGL方程式の近似的な定常解となることが予想される。これが情報縮約の求めていた条件である。今後は，このような近似的な定常解について，そのふるまいを調べていこう。

上で述べた近似解($R \gg \xi$)を$\overline{S}(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}},\ t)$であらわす。このとき$W \equiv H(\overline{S})$は界面の位置の関数であるが，これは表面エネルギーの項と，界面間の相互作用の項から成る。

$$W=\sigma A+W_{\mathrm{int}} \tag{6.5}$$

σ：単位面積あたりの界面エネルギー（表面張力）　A：界面の全面積

W_{int} の一般形は複雑になるが，指数関数型相互作用をする１次元の kink soliton を多次元に拡張したものであって，次のようになる。

$$W_{\mathrm{int}}=-\frac{1}{2}(4M_{\mathrm{e}})^2\iint \mathrm{d}a\,\mathrm{d}a'\,\underset{\sim}{\boldsymbol{n}}(a)\frac{\partial}{\partial\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}(a)}\underset{\sim}{\boldsymbol{n}}(a')\frac{\partial}{\partial\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}(a')}G(|\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}(a)-\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}(a')|) \tag{6.6}$$

ここで，a，a'は界面上の位置をあらわすパラメタで，それで指定される場所を $\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}(a)$，$\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}(a')$，またその点での法線ベクトルを $\underset{\sim}{\boldsymbol{n}}(a)$，$\underset{\sim}{\boldsymbol{n}}(a')$ とした[Fig. 13]。
また $G(|\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}|)$ は，次式を満たす Green 関数である。

$$(\nabla^2-\xi^{-2})G(|\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}|)=-\delta(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}) \tag{6.7}$$

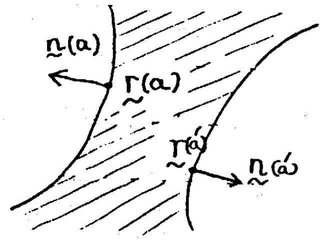

Fig. 13

（6.6）の右辺に負号がついているのは，kink と anti-kink が互いに引力をおよぼすことに対応している。これはあたかも界面が電磁気学でいうところの電気二重層でできているかのような相互作用をしていることを意味している。

以上の考察の結果，急冷後十分に時間を経て界面のふるまいのみが問題となるような時間領域では，系は次の方程式によってよく記述できることになる。

$$\begin{aligned}\frac{\delta W}{\delta(\text{界面の位置})}&=\int \mathrm{d}\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}\,\frac{\delta\bar{S}(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})}{\delta(\text{界面の位置})}\left[\frac{\delta H}{\delta S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})}\right]_{S=\bar{S}}\\&=-\int \mathrm{d}\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}\,\frac{\delta\bar{S}(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})}{\delta(\text{界面の位置})}L^{-1}\left(\frac{\partial S}{\partial t}-f\right)_{S=\bar{S}}\end{aligned} \tag{6.8}$$

方程式をこのような形に書くことの利点は，左辺が static な量のみで表わされ，右辺が dynami な量のみで表わされていることにある。この方程式を使って，実際に界面のふるまいがどう解析されるかについては，以下の §7, §8 で述べる。

§7　界面の運動

空間内の点 $\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}$ に最も近い界面の位置を $a(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})$ とし，$a(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})$ での界面の微小変化 $\delta q(a)\cdot\underset{\sim}{\boldsymbol{n}}(a)$ ［$\underset{\sim}{\boldsymbol{n}}(a)$ は界面の法線ベクトル］について考える[Fig. 14]。この節では表面張力の効果が大きくて界面間の相互作用 W_{int} が無視できる場合を取り扱う。

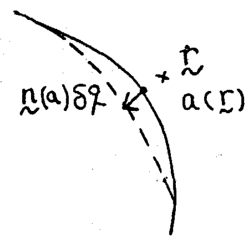

Fig. 14

方程式（6.8）について，static な部分は

$$\frac{\delta W}{\delta q(a)} = \sigma \frac{\delta A}{\delta q(a)} \tag{7.1}$$

法線方向の変化によって面積Aが1次の微小量で変化するためには，界面が平面ではだめであって，必ず曲がっていなければならない。このことは，(7.1)の右辺が，点aでの界面の平均曲率$K(a)$と次の関係にあることを示している。

$$\frac{\delta A}{\delta q(a)} = -K(a) \tag{7.2}$$

一方dynamicな部分については

$$\int \mathrm{d}\underset{\sim}{\boldsymbol{r}} \frac{\delta \bar{S}(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})}{\delta q(a)} L^{-1}\left(f - \frac{\partial S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})}{\partial t}\right)_{S=\bar{S}}$$

において次のように近似的に考える。

$$\left\{ \begin{aligned} &\frac{\delta \bar{S}(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})}{\delta q(a)} \simeq -\underset{\sim}{\boldsymbol{n}}(a)\cdot \underset{\sim}{\nabla} \bar{S}(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})\,\delta(a - a(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})) \\ &f(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}, t) \simeq -\theta(a(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}), t)\,\underset{\sim}{\boldsymbol{n}}(a(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}))\cdot \underset{\sim}{\nabla} S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}) \\ &\frac{\partial S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})}{\partial t} \simeq -v(a(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}))\,\underset{\sim}{\boldsymbol{n}}(a(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}))\cdot \underset{\sim}{\nabla} S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}) \end{aligned} \right. \tag{7.3}$$

ただし，$v(a)$は点aにおける界面の法線方向の速度の大きさを表わし，また$\theta(a(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}), t)$は，random力$f$のうち界面の運動に直接寄与する部分で，射影演算子法などを用いて$f(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}, t)$より求めることができる。その相関関数は，やはり揺動散逸定理により，例えば非保存系では次のようになる：

$$\langle \theta(a, t)\,\theta(a', t') \rangle = \frac{2L}{\sigma}\delta(a - a')\,\delta(t - t') \tag{7.4}$$

非保存系($L = L_0$：定数)の場合は，以上の近似により

$$-L_0 \sigma K(a) = -\int \mathrm{d}\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}\,[\underset{\sim}{\boldsymbol{n}}(a)\cdot \underset{\sim}{\nabla}\bar{S}(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})]^2 [v(a) - \theta(a)]\,\delta(a - a(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})) \tag{7.5}$$

右辺の積分を，界面内での積分と法線方向での積分(積分変数をuとする)に分けると

$$-\left[\int \mathrm{d}u \left(\frac{\partial \bar{S}}{\partial u}\right)^2\right][v(a) - \theta(a)]$$

となるが，uについての積分はよく知られた表面張力σの一般式にほかならない。従って

$$v(a, t) = L_0 K(a) + \theta(a, t) \tag{7.6}$$

これが，求めるべき界面の(法線方向の)運動方程式である。当然のことながら曲面は曲率を

小さく（即ち表面積を小さく）する方向に運動することが，この方程式からも明らかである。これは冶金学では古くから知られていた方程式である。

一方，保存系（$L=-D_0\nabla^2$）ではかなり面倒な取り扱いが必要となる。これは，界面の運動がFig.15のように物質の拡散的移動の形で実現されるからである。結果のみを記すと

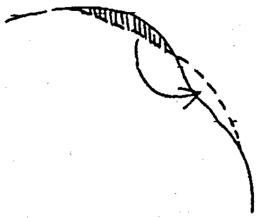

Fig.15

$$\frac{\sigma}{4M_e^2}K(a)=\int da' G_D(\underset{\sim}{r}(a)-\underset{\sim}{r}(a'))[v(a')-\theta(a')] \quad (7.7)$$

ここでGは次式を満たす拡散Green関数である。

$$D_0\nabla^2 G_D(\underset{\sim}{r})=-\delta(\underset{\sim}{r}) \quad (7.8)$$

（7.8）にあらわに時間が含まれていないのは拡散が通常ゆっくりと進むため，準定常的に扱ったからである。（7.7）の方程式も，結晶成長の問題などに関して，昔から知られていたものである。

（7.6），（7.7）に限らず，一般に界面・kink・渦糸・転位といったtopologicalな欠陥の運動は次式の形で記述できる（K. Kawasaki, 1984a）[8)]

$$\sum_\beta D_{\alpha\beta}(v_\beta-\theta_\beta)=-\frac{\delta W}{\delta q_\alpha} \qquad (\theta_\beta\text{はノイズ}) \quad (7.9)$$

情報の縮約によって得られたこのような式を，現象の解明の上で，どのように役立てたらよいだろうか。系の特徴的な長さ$l(t)$（§5で述べた$k_m(t)$の逆数と考えればよい）について成り立つScale則

$$l(t)\propto t^{\mu} \quad (7.10)$$

を例にとって考えてみよう。

まず手始めとして次元解析的に考えてみる。ノイズ項を無視すると，

1）非保存系：$v=LK$

$v\sim l/t$，$K\sim 1/l$ より $l\sim t^{1/2}$。故に $\mu=\dfrac{1}{2}$

2）保存系：$\int da G_D\cdot v=\dfrac{\sigma}{4M_e^2}K$

$\int da\sim l^{d-1}$，$G_D\sim l^{2-d}$，$v\sim l/t$，$K\sim 1/l$　（dは空間の次元）より $l\sim t^{1/3}$。

故に $\mu=\dfrac{1}{3}$

という結果が容易に得られる。これはもとのTDGL方程式からは簡単に議論できない結果で

あって，まさに情報の縮約の結果と言える。上に無視したノイズ項も，揺動散逸定理を使えば考慮することができる。なお，§5 で得られた $\mu=1$ という結果は，上の議論に macroscopic な流れの効果を加えれば導びき出すことができる。

さらに詳しく調べてみよう。簡単のため非保存系の場合について考えてみる。(T.Ohta, D. Jasnow and K. Kawasaki, 1982)[3] 界面上でゼロとなるような適当な関数 $u(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}(t))$ を考える。$S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})$ と $u(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})$ とは次の関係にある。

$$S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})=M_{\mathrm{e}}\ \mathrm{sgn}\ u(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}) \tag{7.11}$$

u は $\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}$ を通して時間依存しているから

$$\frac{\partial u}{\partial t}+v\underset{\sim}{\boldsymbol{n}}\cdot\underset{\sim}{\nabla} u=0 \tag{7.12}$$

$\underset{\sim}{\boldsymbol{n}}$ は界面の法線ベクトル，v は法線方向の速度である。一方，(7.6) でノイズを無視すると

$$v=LK \tag{7.13}$$

最後に微分幾何学でよく知られた次の式を使う。

$$K=-\underset{\sim}{\nabla}\cdot\underset{\sim}{\boldsymbol{n}}=-\underset{\sim}{\nabla}\cdot\frac{\underset{\sim}{\nabla}u}{|\underset{\sim}{\nabla}u|} \tag{7.14}$$

(7.12) ~ (7.14) を使うと

$$\frac{\partial u}{\partial t}=L(\nabla^2-\underset{\sim}{\boldsymbol{n}}\underset{\sim}{\boldsymbol{n}}:\underset{\sim}{\nabla}\underset{\sim}{\nabla})u \tag{7.15}$$

ここで：は2階テンソルのスカラー積である。

界面はランダムに分布していると仮定する。このとき $\underset{\sim}{\boldsymbol{n}}\underset{\sim}{\boldsymbol{n}}$ はランダム変数として扱ってよく，(7.14) の $\underset{\sim}{\boldsymbol{n}}\underset{\sim}{\boldsymbol{n}}$ をその平均値 $\langle\underset{\sim}{\boldsymbol{n}}\underset{\sim}{\boldsymbol{n}}\rangle=\frac{1}{d}\mathbf{1}$ で置き換えることにする ($\mathbf{1}$ は単位テンソル，d は空間の次元数)。これは空間的にある種の coarse graining を行なったことを意味している。こうして，次の簡単な拡散方程式を得る。

$$\frac{\partial u}{\partial t}=L\left(1-\frac{1}{d}\right)\nabla^2 u \tag{7.16}$$

これは，初期条件を与えれば一意的に解けるものである。

初期条件としては，簡単に，$u(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})$ が Gauss 分布をしており，異なる $\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}$ 間に相関はないものとしよう。即ち σ_u をある定数として，$u(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}(0))$ の確率分布は

$$P(u(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}))\ \propto\exp\left[-\int\frac{u^2(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})}{2\sigma_u}\mathrm{d}\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}\right] \tag{7.17}$$

この条件は次の形にも書ける。

$$<u(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}(0))\,u(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}'(0))>=\sigma_u\delta(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}-\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}') \qquad (2.17')$$

ここにデルタ関数があらわれるが，もちろん§6で述べたようなcoarse grainingを行なっているのであるから，界面領域の厚さξ程度以上の話である。

さて(7.17)，(7.17′)の初期条件の下で，$t>0$において(7.16)の解はどうなるだろうか。方程式の線型性によって，$u(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})$が依然としてGauss分布であることに変わりはない。結果は

$$\frac{<u(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}(t))\,u(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}'(t))>}{<u(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}(t))^2>}=\exp\left[-\frac{(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}-\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}')^2}{8L't}\right] \qquad (7.18)$$

ただし$L'=L\left(1-\dfrac{1}{d}\right)$。

一方，(7.11)より

$$\frac{<S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})\,S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}')>}{<S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})^2>}=\frac{2}{\pi}\sin^{-1}\frac{<u(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})\,u(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}')>}{<u(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})^2>} \qquad (7.19)$$

であるから，

$$\frac{<S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})\,S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}')>_t}{<S(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}})^2>_t}=\frac{2}{\pi}\sin^{-1}\exp\left[-\frac{(\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}-\underset{\sim}{\boldsymbol{r}}')^2}{8L't}\right] \qquad (7.20)$$

という結果が得られる。これから特徴的な長さlについて，$l^2\sim L't$，即ち$l\sim t^{1/2}$というScaling則が成り立つことがわかる。(7.20)をFourier変換すればスペクトル強度$I_k(t)$が得られるが，そのScaling関数はIsing modelの計算機実験結果などともよく一致する。

以上の結果は非保存系について得られたものであるが，保存系に関しては理論的取り扱いが困難であって，これまでのところ成功していない。

最近，ここで述べた考え方と流体のパターン形成の議論で出てくるphase dynamicsの考え方との共通性が指摘されている。この考えを推し進める事ができるならばdomain成長の問題についての新しい方法を与えることになるであろう。

§8　1次元kinkのふるまい

前節では急冷直後，界面がランダムに形成されて，それが運動の結果秩序相に近づいていくさまを考察した。この節では，強い異方性のために界面が一方向にのみ形成され，その集合が近似的に1次元kink系としてふるまうようになった時のことを考えよう。

近年$Rb_2Co_{0.7}Mg_{0.3}F_4$という物質で，実際にこのような現象が観察されている(池田，1982年)。これは$T_N=42.8\,K$の層状反強磁性体であって，1つの層内ではスピンが強く相互作用

しているためにT_N以下に急冷するとFig. 16のように層平面に垂直方向に1次元的な秩序が生じるのである。実験で測定されるのは，kink, anti-kink間の平均距離（磁区の厚さ）に比例した中性子散乱のスペクトル強度$I(t)$であるが，それが時間の対数に依存することが見出された。[Fig. 17]

$$I(t) \propto \ln t \qquad (8.1)$$

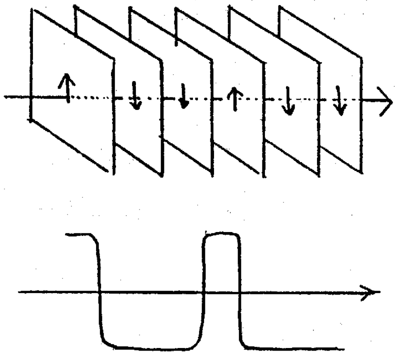

Fig. 16

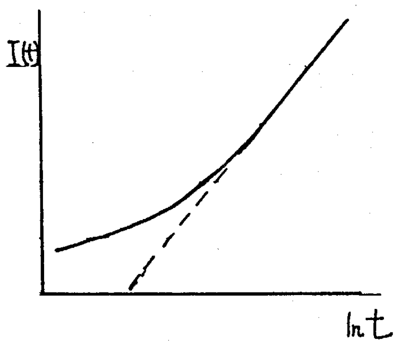

Fig. 17

同じ現象は以下の（8.2）式で表わされる非保存kink系の計算機実験（T. Nagai & K. Kawasaki, 1983）[5]でも再現されている[Fig. 18]。

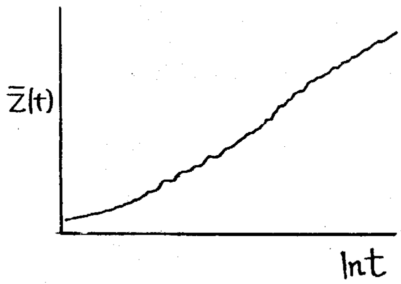

Fig. 18 $\bar{Z}(t)$は磁区の平均の厚さ

これを適当な模型をつくって考察してみよう。i番目のkink（またはanti-kink）の位置をx_iとする。§7で述べた方法に従ってTDGL方程式を縮約すれば適当な単位系のもとで，次のkinkの運動方程式を得る：

$$\text{非保存系：} \dot{x}_i \propto e^{-(x_{i+1}-x_i)/\xi} - e^{-(x_i-x_{i-1})/\xi} \qquad (8.2)$$

$$\text{保存系：} -\sum_j (-1)^{i-j}|x_i - x_j|\dot{x}_j \propto e^{-(x_{i+1}-x_i)/\xi} - e^{-(x_i-x_{i-1})/\xi} \qquad (8.3)$$

ξは界面領域の厚さである。この他にさらに，kink, anti-kink対の消滅ということも考えねばならない。例えばith kinkと$(i+1)$th anti-kinkが距離ξ以内に接近すると，これらは消滅して，新しく$(i-1)$ th anti-kinkと$(i+2)$ th kinkが相互作用を始めるとする。

以下では非保存系に話を限る。まず次元解析的に，（8.2）より$l/t \sim e^{-l/\xi}$，これより$l \simeq \xi \ln t$となってlの時間依存性がうまく説明できる。ところが，実際の計算機実験では

$$l/\xi \simeq 3.5 \ln t \qquad (8.4)$$

であることが見出されている。これは単なる係数の違いではなくて，

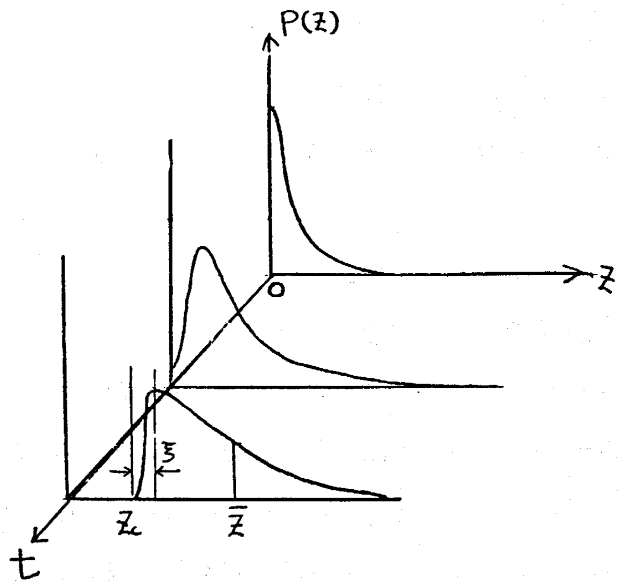

Fig. 19

$$l/\xi \simeq \ln t^{3.5} \tag{8.4'}$$

と書けば明らかなように，時間依存性にかなり大きな違いがあることを意味している。この原因を探るためにドメインサイズZの分布について Fig. 19 に示すような結果を見てみよう。時刻 $t=0$ においては kink, anti-kink をランダムに置いたために確率密度 $P(\mathrm{Z})$ は Poisson 分布をしているが，時刻がたつにつれて接近した kink 対は引力がはたらき消滅するために，ξ 程度の幅をもった鋭いカットができるのである。そして，このカットの位置を Z_c とすると，Z の平均値 $\overline{Z}$ との間には

$$\overline{Z}/Z_c \simeq 3.5 \tag{8.5}$$

が成り立つことが見出された。(8.4)，(8.5) で同じ数値があらわれたのは偶然ではない。このことを2通りの方法で示してみよう。

まず初めに全く現象論的に取り扱う。n を kinkの密度とし，またある点に kink があったときにそこから x だけ離れた時に別の kinkのある確率を $\hat{n}(x)$ とする。もちろん十分 x が大きいところでは $\hat{n}(x)$ は n に一致する。このとき，現象論的に次の式が成り立つことが予想される。

$$\dot{n} = -\alpha\overline{v}\overline{n}n \tag{8.6}$$

ここで α は kink 同士が衝突する割合，$\overline{v}$ は衝突する時の kink の相対速度，また

$$\overline{n} = \hat{n}(\xi) \tag{8.7}$$

である。これは原点にある kink に対して遠くから kink が近づいて相互の距離が ξ になったところで消滅することをあらわしている。一方，遠くから近づいてくる kink に対してはその密度 $\hat{n}(x)$ と速度 $v(x)$ に関して次の“連続の方程式”が成り立つ。

$$\hat{n}(x)\, v(x) = \text{定数} \tag{8.8}$$

(8.8) を使うと (8.7) は

$$\overline{n} = \frac{\hat{n}(x)\, v(x)}{v(\xi)} = \frac{\hat{n}(x)\, v(x)}{\overline{v}} \tag{8.9}$$

$v(x)$ については運動方程式 (8.2) より指数関数型 $v(x) \propto \exp[-x/\xi]$ が予想される。ここで次のような性質をもった定数 ν の存在を現象論的に仮定する。

$$x \geqq \frac{1}{n\nu} \text{ において } \hat{n}(x) = n \tag{8.10}$$

この ν を用いると，(8.9) より

$$\bar{n} = \frac{\hat{n}\left(\frac{1}{n\nu}\right) v\left(\frac{1}{n\nu}\right)}{\bar{v}} = n \mathrm{e}^{-1/\xi n\nu} \tag{8.11}$$

(8.11)を(8.6)に代入すると

$$\dot{n} = -\alpha \bar{v} n^2 \mathrm{e}^{-1/\xi n\nu} \tag{8.12}$$

これは厳密に解けて次の解を得る。

$$n^{-1} = \nu\xi \ln(t + \mathrm{const.}) + \mathrm{const.} \tag{8.13}$$

これは(8.4)の結果をよく説明しており，$\nu = 3.5$ に相当することがわかる。(8.10)から，1つの kink はそこから $1/n\nu$ の範囲内の kink とは相互作用をして吸い込んでしまうが，力の作用する range ξ が短いためにその外側の kink には影響を与えないということで，(8.5)のカットも裏付けられたことになる。

次にもう少し理論的な取り扱いとして，気体の Boltzmann 方程式に相当する考察をしてみよう（K. Kawasaki and T. Nagai, 1983）。[6] このとき，時刻 t における domain 間隔 z の分布 $g(z, t)$ に対して，次の近似式が得られる。

$$\frac{\partial}{\partial t} g(z, t) = -\frac{\partial}{\partial z} j(z, t) + \frac{\dot{n}}{2n}\left[2g(z, t) - \int_0^z \mathrm{d}z' g(z', t) g(z - z', t)\right] \tag{8.14}$$

第1項は drift項，第2項は collision項で，3次以上の高次項は無視した。ここで

$$\begin{aligned} j(z, t) &= -\left[\mathrm{e}^{-z/\xi} - \langle \mathrm{e}^{-z/\xi} \rangle\right] g(z, t) \\ \langle \mathrm{e}^{-z/\xi} \rangle &= \int_0^\infty \mathrm{d}z\, g(z, t)\, \mathrm{e}^{-z/\xi} \Big/ \int_0^\infty g(z, t)\, \mathrm{d}z \end{aligned} \tag{8.5}$$

で，$j(z, t)$ は domainの大きさが平均からずれることによりはたらく効果を意味する。(8.14)，(8.15)は一見かなり複雑であるが，$z < z_c$ では $\mathrm{e}^{-z/\xi} \gg \langle \mathrm{e}^{-z/\xi} \rangle$，$z > z_c$ では $\mathrm{e}^{-z/\xi} \ll \langle \mathrm{e}^{-z/\xi} \rangle$ が成り立つから(8.15)は結局ほとんどの領域でどちらか一方の項しか残らず，従って比較的簡単に解くことができる。この結果を使うと

$$\bar{z} \equiv \frac{\int z g(z, t)\, \mathrm{d}z}{\int g(z, t)\, \mathrm{d}z} \simeq 2.27\, \xi \ln t/t_0 \tag{8.6}$$

となる。これは 3.5 とはかなり異なった値を与えているが，これは(8.14)でさらに高次の項を取り入れることにより改善できるであろう。

最後に，保存系の場合については，方程式はかなり複雑[(8.3)を参照]であるが，計算機実験では，非保存系の場合と定性的に似た結果が得られており，$\nu \sim 2$ を与えている。(川勝)

§9　Incommensurate 相

前節までは，主として安定領域から不安定領域へ急冷した後の系のふるまいを調べてきた。次に準安定領域へ急冷した時のふるまいがどうなるかを考えよう。これは一般に“核生成の問題”として古くから扱われてきたが，ここではその中でもやや特殊な“Incommensurate相転移”を取り上げる。

まずIncommensurate（不整合）相とはどんなものであるかを，簡単な1次元モデルを作って考えてみる。（Fenkel-kontorowaモデル）Fig.20のように質点が同じレベルで1次元的につながれていて，さらに周期的な外力がはたらいているものとする。外力がないときの平衡位置での質点の間隔を $a+b$，外力の周期を b とすると $a=0$ ならば質点は外場ポテンシャルの谷底にいて平衡にあるが，$a\neq 0$ ならば外場のないときの平衡位置と外場ポテンシャルの谷底とがずれることになり，質点の平衡位置としてはFig.21のように2通りの場合が考えられる。即ちバネの力が小さいときにはバネが少し伸縮するだけで外場ポテンシャルの谷底に落ち着くことができる(i)が，バネの力が大きくなると外場ポテンシャルの途中や頂点付近で止まっている質点があらわれる(ii)。(i)がcommensurate（整合）相に，(ii)がincommensurate相に対応している。このどちらが実現されるかは，周期のずれ a の大きさのほかに，バネの強さと外場ポテンシャルの深さの比に依存している。

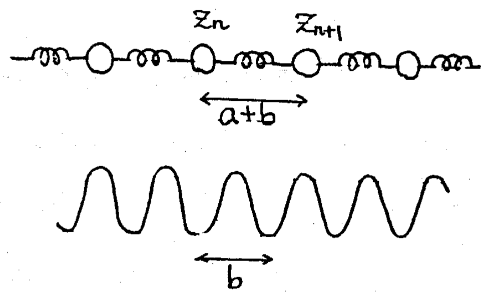

Fig.20

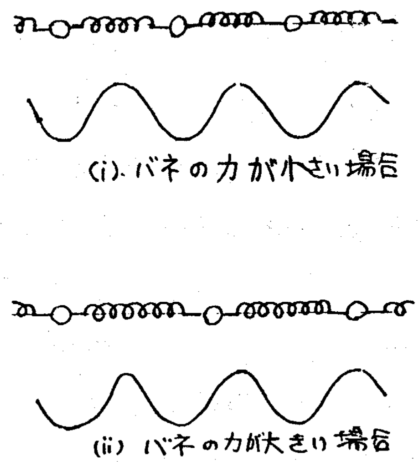

Fig.21

このモデルのHamiltonianはバネ定数を1，外場ポテンシャルの大きさを v とすると，次式で表わされる。

$$H=\sum_n \frac{1}{2}\left(x_{n+1}-x_n-a\right)^2+\sum_n v\left(1-\cos\frac{2\pi}{b}x_n\right) \tag{9.1}$$

ただし，x_n は n 番目の質点の位置 z_n の外場ポテンシャルの位相からのずれである。

$$z_n=x_n+nb \tag{9.2}$$

（9.1）はこのままの形でも解くことは可能であるが，簡単のために連続体近似を用いることに

しよう (Frank, van der Merwe)。即ち x_n が n の関数としてゆっくり変化すると考え，差分を微分で置き換えることにする。

$$H=\frac{1}{2}\int \mathrm{d}n\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}n}-a\right)^2+v\int \mathrm{d}n\left(1-\cos\frac{2\pi}{b}x\right) \tag{9.3}$$

さらに次のような変数変換を施す。

$$x \longrightarrow \frac{p\phi}{2\pi/b} \tag{9.4}$$

ここで p はある整数である。(その意味は後に説明する。) この変換によって ϕ が 2π ずれたとき外場ポテンシャルも元に戻るから，ϕ は角度変数としての意味を持つ。さらに n を改めて x とし，a を $\frac{p}{2\pi/b}\delta$ と書くことにすれば Hamiltonian は次の形になる。

$$H=\frac{1}{2}\int\left(\frac{pb}{2\pi}\right)^2\left(\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}x}-\delta\right)^2\mathrm{d}x+v\int(1-\cos p\phi)\,\mathrm{d}x \tag{9.5}$$

これは sine-Gordon 方程式に帰着させて厳密解を求めることができる。その結果を Fig. 22 に示す。(i) まず v がゼロの場合は，バネだけで平衡位置が決まるので位相のずれ $\phi(x)$ は x に比例する。(ii) 逆に $v\to\infty$ の極限ではバネはないに等しいから，$\phi(x)$ は $1-\cos p\phi=0$ を満たすだけでよく，x に無関係に 0，$\frac{2\pi}{p}$，$2\frac{2\pi}{p},\cdots,(p-1)\frac{2\pi}{p}$ の p 個の値を取り扱える。そして (iii) その中間の場合は，図のように，あるところまでポテンシャルと同位相で並んでいるが，やがてバネの弾性エネルギーが大きくなり，薄い界面をはさんで別の位相へと移るようになる。これが典型的な incommensurate 相であり，この界面のことを discommensuration と呼ぶ。以上の模型では位相 ϕ だけで記述することができたが，よりリアルな系では振幅まで考慮して複素関数 $\Psi(\underset{\sim}{r})$ をオーダパラメタに選ぶ。$\Psi(\underset{\sim}{r})$ を振幅 $F(\underset{\sim}{r})$ と位相 $\phi(\underset{\sim}{r})$ に分けて

$$\Psi(\underset{\sim}{r})=F(\underset{\sim}{r})\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi(\underset{\sim}{r})} \tag{9.6}$$

とするとモデル Hamiltonian は次のようにとること

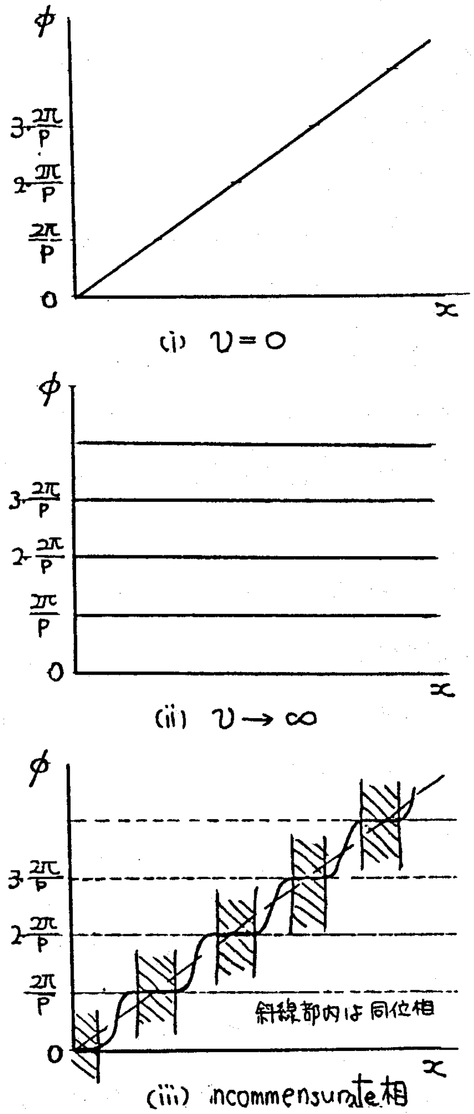

Fig. 22

ができる。

$$H=\int d\underset{\sim}{r}\ \{\ \frac{1}{2}(\underset{\sim}{\nabla}F)^2+\frac{1}{2}F^2(\underset{\sim}{\nabla}\phi-\underset{\sim}{\delta})+V(F)-v\cdot F^p\cos p\phi\ \} \tag{9.7}$$

$V(F)$ は F のある値で極小になるような関数，$\underset{\sim}{\delta}$ は温度に依存するパラメタ，p は整数である。これはGinzburg-Landau型Hamiltonianに周期ポテンシャルと，それからのずれの寄与を加えたものであると言える。重要なことは $\underset{\sim}{\delta}$ が温度に依存することであって，そのために，温度を変えると，(9.7) の平衡状態の解は Fig.23 のように変わる。これは原点付近では小さな変化だが，離れるにつれて大きな位相の変化を伴うようになり，転移に長い時間がかかることになる。これは言い方を換えれば incommensurate相内での転移に際して大きなヒステリシスが見られるということでもある。実際に誘電体の誘電率の温度変化の測定において，このような現象が観測されている [Fig. 24] (浜野他)。このような discommensurationの動きにくさは，また不純物の存在にも極めて敏感であることが知られているが，ここではまず，incommensurate 相本来の性質を調べてみることにしよう。

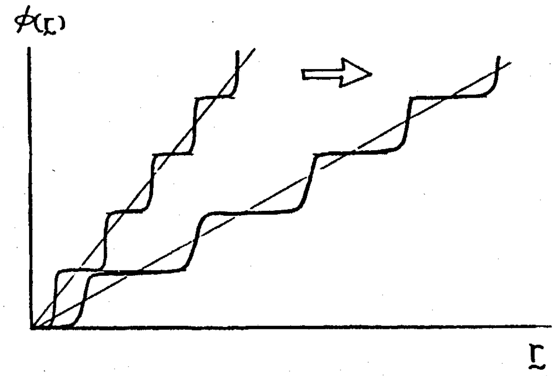

Fig.23　温度変化による (9.7) の解の変化

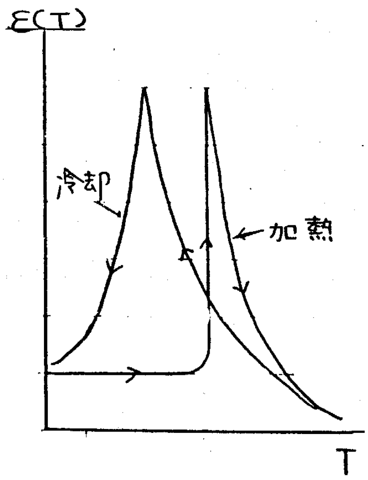

Fig.24 誘電率の温度変化に対するヒステリシス

§10　Incommensurate 相における核生成

Incommensurate 相内での転移を考える。discommensurationの平衡位置からの変位を $u(\underset{\sim}{r})$ と記すことにすると，discommensuration が密に存在していて連続体近似が許される場合には自由エネルギー密度 $f(\underset{\sim}{r})$ は次のように表わすことができる。

$$f(\underset{\sim}{r})=\frac{1}{2}\widetilde{K}_x\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2+\frac{1}{2}\widetilde{K}_\perp(\underset{\sim}{\nabla}_\perp u)^2 \tag{10.1}$$

ただし discommensurationが並んでいる方向を x 軸とし，直交成分を $\perp$ をつけてあらわしている。(10.1) は (9.7) から情報の縮約によって得られた式と見なしてよい。

Incommensurate 相の平均間隔を l としよう。このとき $u\to u+pl$ の変換に対し状態は不

変である。そこでuの代わりに次の角度変数φを導入する。

$$u=\frac{pl}{2\pi}\varphi \tag{10.2}$$

このとき，$f(\underset{\sim}{r})$は次の形になる。

$$f(\underset{\sim}{r})=\frac{1}{2}\left[K_x\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)^2+K_\perp(\nabla_\perp\varphi)^2\right] \tag{10.3}$$

これはスピンのXY模型と等価である。また見方を変えると液体^{4}Heの超流動現象とも類似している。それは，超流動状態の^{4}Heでは波動関数の位相をφとして速度場v_sが$\underset{\sim}{\nabla}\varphi$で，従って運動エネルギーが$v_s^2\sim(\underset{\sim}{\nabla}\varphi)^2$の形で与えられるからである。以後この類推を使って話を進める。

液体^{4}Heにはよく知られたように，超流動状態の巨視的速度に上限がある（Critical velocityの問題）。LangerとFisherはこれを次のように説明した。超流動がある状態ではFig.25(i)のように位相φが空間的な変化をしている。φは2πの周期をもつからたとえば$\varphi=\pi$と$\varphi=3\pi$は実は同じである。速度v_sは$\nabla\varphi$の形で与えられるから，速度が大きくなるとφの空間的変化が大きくなる。このとき，(ii)のような特異点が現れればその中間領域では速度が小さくなるので，特異点が上下に動いてエネルギーが減少するというものである。（3次元では特異点はループになる）

同様の現象がIncommensurate相転移の場合にも考えられる。即ち，Fig. 24 (i)のように同位相の領域がp枚のdiscommensurationをはさんで並んでいたとする。その一部が切れて縮

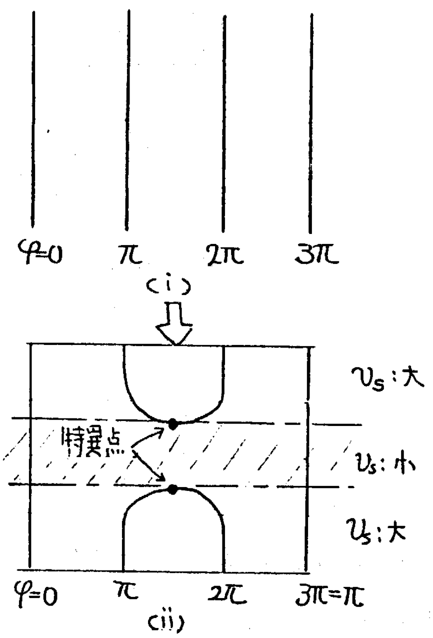

Fig.25

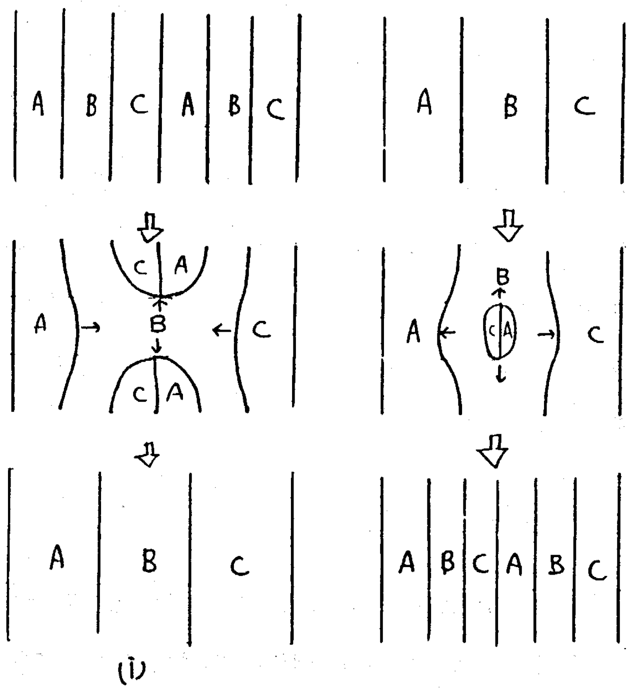

Fig.26 Incommensurate相転移（P＝3）

んでいくと，結果として中間の部分では大きな周期になる。これは^{4}He での Langer-Fisherの説明を離散的な形にしたものであるが，今の場合，大きな周期の中に核が発生して成長していき，小さな周期にうつるという逆過程も考えられる[Fig. 26(ii)]。このどちらが起こるかは，もちろんどちらがエネルギーを減少させるかによって決まる。ここでは(i)の過程について簡単に述べよう。(詳細な計算は Kawasaki (1983)[7] および Prelovsek and Rice (1983)[10] によって行なわれた。)

Fig. 27 のような特異点のできた位相場のエネルギーは特異点のつくるループの半径Rを用いて次のように表わせる。

$$\Delta E = 2\pi^2 (K_x K_\perp)^{\frac{1}{2}} R \left(\ln \frac{8R}{c} - \frac{7}{4}\right) - \lambda\,|\Delta\delta|\,P\pi R^2 \qquad (10.4)$$

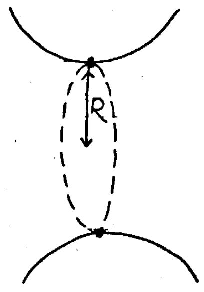

Fig. 27

K_x, $K_\perp$ は(10.3)と同じものであり，c, λ はある正の定数である。また$\Delta\delta$は準安定状態と平衡状態での外場の位相とのずれ(misfit)の差$\delta - \delta_{eq}$をあらわす。(10.4)の第2項はループの面積に比例した bulk なエネルギーでありループが広がるほど安定である。第1項は特異点が周囲に及ぼす歪のエネルギーをあらわしている。(10.4)をRの関数としてあらわすと Fig. 28 のようになる。ここで

$$\Delta E_c = \frac{\pi^3 K_x K_\perp}{\lambda P|\Delta\delta|}\left(\eta - \frac{3}{4}\right)\left(\eta - \frac{11}{4}\right)$$

$$R_c = \frac{\pi (K_x K_\perp)^{\frac{1}{2}}}{\lambda P|\Delta\delta|}\left(\eta - \frac{3}{4}\right) \qquad (10.5)$$

$$\text{ただし } \eta = \ln \frac{8R_c}{c}$$

このグラフから熱的ゆらぎによって臨界半径R_cよりも大きな半径の“穴”ができると，それは自発的に広がってゆくが，R_cよりも小さいとつぶれてしまうという通常の核生成の理論と同様の結果が得られたことがわかる。しかし通常の核生成の場合とは異なり，IC相転移の場合はこういった過程が何度も繰り返されて$\Delta\delta \to 0$にらなければいけない。しかし(10.5)からわかるようにこの時ΔE_c, R_c ともに無限大に発散するので，平衡に近づくにつれて転移の速度がきわめて遅くなってしまうのである。これが先に述べたヒステリシスの原因となる。この事情をもう少し詳しく見るために，discommensuration の密度の平衡値からのずれ$\Delta n(t) = n(t) - n_{eq}$について考える。平衡に近づ

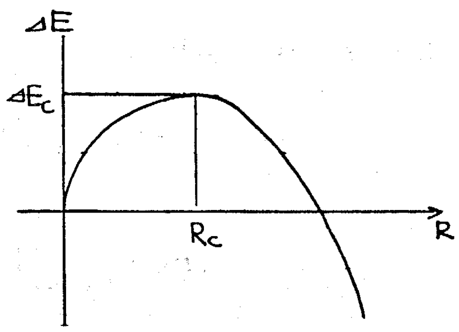

Fig. 28

いて $\Delta\delta$, Δn がともに小さい時には Δn と $\Delta\delta$ は比例すると考えられるので (10.5) より

$$\Delta E_c = g/|\Delta n(t)|, \quad g \text{ は定数} \tag{10.6}$$

とあらわされる。一方，E_c を転移のポテンシャル障壁と考えると次の式が成り立つであろう。

$$\frac{d}{dt}|\Delta n(t)| \simeq -C \exp[-\frac{\Delta E_c}{k_B T}], \quad C \text{ は定数} \tag{10.7}$$

ただし $k_B T$ はボルツマン定数，T は系の温度である。(10.6) を (10.7) に代入すると，$\Delta n(t)$ が次のように求まる。

$$|\Delta n(t)| \simeq \frac{g}{\ln t/t_0} \tag{10.8}$$

これから平衡への接近が時間の対数に逆比例する形で遅くなっていくことが予想される。

以上が IC 転移の本質であるが，実際には前節の終わりでも触れたように，不純物による discommensuration の pinning 効果が重要な役割を果たしている。誘電体の IC転移での直接観測の例はこれまでのところないが，類似の現象として 2 次元層状物質 2H-T_aSe_2 の CDW (Charge Density Wave) の電子顕微鏡での観測例が報告されている。

§ 11 Discommensuration の運動

前節では discommensuration の生成・消滅の現象を扱ったが，最後にひとたびできた discommensuration がその後どのように変化していくかを議論する (K. Kawasaki, 1984b)[9]。これは § 7 で論じた界面の運動の応用でもある。

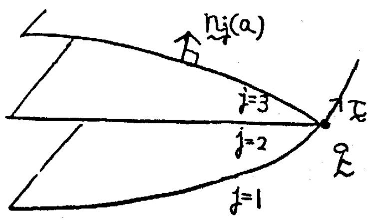

Fig. 29

Fig. 29 のような discommensuration の特異点がある状態を考えよう [図は $p = 3$ の場合]。まず 1 つの discommensuration を考えると，その法線方向の速度 $v(a, t)$ はやはり (9.7) からの情報の縮約の結果 § 7 と類似の式で記述される (a は dislocation上の位置をあらわすパラメタ)。ただし noise の項は無視した。

$$\kappa v(a, t) = K(a) + \sigma^{-1}(\frac{8F}{p})^2$$

$$\times \{\underset{\sim}{n}(a)\frac{\partial}{\partial \underset{\sim}{r}(a)}\}^2 \int da' \underset{\sim}{n}(a') \frac{\partial}{\partial \underset{\sim}{r}(a')} G(|\underset{\sim}{r}(a) - \underset{\sim}{r}(a')|) \tag{11.1}$$

ここで κ は摩擦定数，σ は表面張力，F はオーダパラメタ Ψ の振幅である。また $K(a)$ は平均曲

率，$\boldsymbol{n}(a)$ は法線ベクトルをあらわし，$G(|\boldsymbol{r}|)$ は次式を満たす拡散Green関数である。

$$(\boldsymbol{\nabla}^2-\xi^{-2})G(|\boldsymbol{r}|)=-\delta(\boldsymbol{r}) \tag{11.2}$$

ここで ξ は discommensuration の厚さである。(11.1)の第1項は §7の場合と同じく表面張力の効果を，また第2項は §7では無視した discommensuration同士の相互作用をあらわす。この相互作用は discommensuration を互いに遠ざけるような反発力としてはたらくため，discommensuration は適当な間隔を置いて並ぼうとする。ここが §7, §8とは異なる点で，いわば anti-kinkがなくて kinkばかりが並んでいることに相当する。

一方特異点 $\boldsymbol{q}$ の運動は次式で記述できる。

$$\varepsilon\kappa\dot{\boldsymbol{q}}=2\pi F^2\boldsymbol{\tau}\times\left[\boldsymbol{\delta}-\frac{\delta_c}{p}\cdot\sum_{j=1}^{p}\boldsymbol{n}_j\right] \tag{11.3}$$

$$\text{ただし}\ \delta_c\equiv\frac{p}{2\pi}\cdot\frac{\sigma}{F^2}$$

$\varepsilon\kappa$ は摩擦定数，$\boldsymbol{\delta}$ は mis-fit ベクトル，$\boldsymbol{\tau}$ は特異点のつくる曲線の接線ベクトルであり，×はベクトル積を意味する。右辺括弧内の第1項は mis-fit の寄与を，第2項は $\boldsymbol{q}$ が動くことによって面積が変化し，表面エネルギーが変わる効果をあらわす。

最初に commensurate 相中にただ1組の discommensurations が存在する場合を考えよう［Fig. 30］。このときは対称性のために方程式が次のように簡単になる。

$$\begin{cases}\kappa v(t)=\cos^3\theta\dfrac{\partial^2 y}{\partial x^2}+\dfrac{r^2}{2\xi}\cos^2\theta\cdot e^{-y/\xi} & (11.4)\\[2ex] \varepsilon\kappa\dot{q}(t)=3\sigma\left[\varDelta-\dfrac{1}{3}(1+2\cos\alpha(t))\right] & (11.5)\end{cases}$$

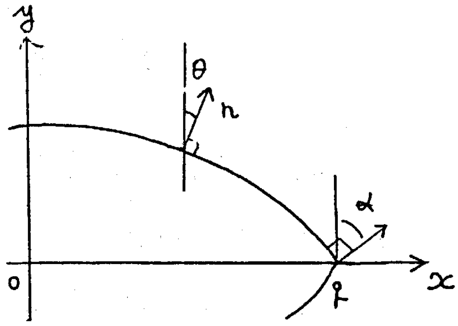

Fig. 30

ただし

$$v(t)=\{\dot{x}(t)^2+\dot{y}(t)^2\}^{\frac{1}{2}},\quad r=\frac{8F}{3}(\sigma\xi)^{\frac{1}{2}},\quad \varDelta=\frac{\delta}{\delta_c}$$

(11.5)からわかるようにこの“核”が成長するかどうかは misfit の寄与 $\varDelta$ と表面張力の寄与 $\frac{1}{3}(1+2\cos\alpha(t))$ のかね合いで決まる。(11.4)，(11.5)の解は $x\gg y\gg\xi$ の領域で近似的に次のように求められている。

$$y(x)\simeq\begin{cases}2\xi\ln\left(\dfrac{q-x}{\xi}\right) & (\ q\ \text{でpinningされている場合})\\[2ex] \xi\ln\left(\dfrac{q-x}{\xi}\right) & (\ \text{自由に動ける場合})\end{cases} \tag{11.6}$$

一般に，既に incommensurate 相にあってさらにその中に新たに discommensuration ができる場合を考えよう。“核”が十分に小さくて，周囲の discommensuration との相互作用が無視できる時は上の commensurate 相と同じである。時間がたって“核”が成長し，周囲との相互作用が始まると，次の式で記述できる。[Fig. 31]

$$
\left\{
\begin{array}{ll}
\kappa \dot{y}_j(x,\ t) = \dfrac{\partial^2 y_j}{\partial x^2} + \dfrac{r^2}{2\xi}\left\{ -\mathrm{e}^{-(y_{j+1}-y_j)/\xi} + \mathrm{e}^{-(y_j-y_{j-1})/\xi} \right\} & (11.7) \\
\quad (|x| > q \text{ においては Fig. 31 を考慮して適当に変えねばならない}) & \\
\varepsilon\kappa \dot{q}(t) = p\sigma(\Delta - 1) & (11.8)
\end{array}
\right.
$$

(11.7), (11.8) は (11.4), (11.5) において $\theta \sim 0$，$\alpha \sim 0$ とおいたものである。また (11.8) は，本来周囲の discommensuration を押し広げる効果をあらわす項を加えるべきであるが，ここでは省略した。

(11.7), (11.8) はこれでもまだかなり複雑であって数値計算に頼るしかないのが現状であるが，discommensuration が非常に密に存在しているという極限状態では，連続体近似が使えてもう少し簡単になる。即ち歪みの場 $u(x,\ y,\ t)$ を導入して

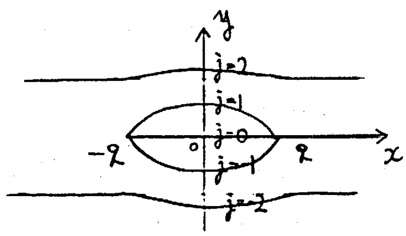

Fig. 31

$$y_{j+1} - y_j \simeq l\left\{ 1 + \frac{\partial}{\partial y} u \right\}, \qquad l \text{ は discommensuration の平均間隔}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} y_j \simeq \frac{\partial}{\partial x} u, \quad \frac{\partial}{\partial t} y_j \simeq \frac{\partial}{\partial t} u$$

とすると (11.7), (11.8) は次のようになる。

$$\kappa \frac{\partial}{\partial t} u = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \nu \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) u + pl\nu\{ \theta(x-q) - \theta(x+q) \} \delta'(y) \qquad (11.9)$$

$$\varepsilon\kappa \dot{q} = p\sigma(\Delta - \Delta_{\mathrm{eq}}) + p\sigma\nu \frac{\partial}{\partial y} u'|_{y=0} \qquad (11.10)$$

ただし $\theta(x)$ は階段関数，$\delta'(x)$ はデルタ関数の 1 階導関数，$\Delta - \Delta_{\mathrm{eq}}$ は外場との misfit の平衡状態からのずれをあらわし，また $\nu = 4(l/\xi)^2 \exp(-l/\xi)$ である。u は $\underset{\sim}{\boldsymbol{q}}$ のところに特異点をもつ多価関数であるので，そのうちの正則な部分を取り出して u' と記している。このような式は Bénard 対流の問題でロール生成の際の dislocation にもはたらき，また結晶中の転位に働く Peach-Koehler 力にも類似のものである。(11.9), (11.10) のような式は Bénard 対流における phase dynamics と組み合わせて，一般に defect-phase dynamics とでも呼ぶべきもので

ある。

dislocation q の運動に着目しよう。一般におそい運動では dislocationに比べて変位場 u の変化は早く起こるので，断熱近似を用いることができて（11.9）の左辺をゼロとおくことにより

$$\frac{\partial}{\partial y}u'(q,\ y)\,|_{y=0} = -\frac{pl}{4\pi\nu^{1/2}}\frac{1}{q(t)}+I \tag{11.11}$$

の形になる。I の内容はここでは省略するが，この項はパラメタ Δ, κ を少しシフトさせる効果をもつ。シフトした値を Δ^*, κ^* と書くことにすると（11.10）より

$$\varepsilon\kappa^*\dot{q} = p\sigma(\Delta^*-\Delta_{\rm eq})-\frac{\rho_s\bar{\kappa}^2}{4\pi}\cdot\frac{1}{q} \tag{11.12}$$

ただし $\rho_s=\sigma\nu^{1/2}/\rho$, $\bar{\kappa}=pl$。

ここでdislocationの“エネルギー”$E(q)$ を次のように定義することができる。

$$E(q) = \frac{\rho_s\kappa^2}{2\pi}\ln\frac{2q}{r_0}-2p\sigma(\Delta^*-\Delta_{\rm eq})\,q \tag{11.13}$$

この $E(q)$ を使うと（11.12）は

$$\varepsilon\kappa^*\dot{q} = -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial q}E(q) \tag{11.14}$$

と書ける。右辺の$\frac{1}{2}$は2つの dislocationのうちの片方のみを考えているからである。$E(q)$のグラフをFig. 32に示した。やはり臨界半径

$$q_c = \frac{\rho_s\kappa^2}{4\pi p\sigma(\Delta^*-\Delta_{\rm eq})} \tag{11.15}$$

とポテンシャル障壁

$$E_c = \frac{\rho_s\kappa^2}{2\pi}\left[\ln\frac{\rho_s\kappa^2}{2\pi p\sigma(\Delta^*-\Delta_{\rm eq})r_0}-1\right] \tag{11.16}$$

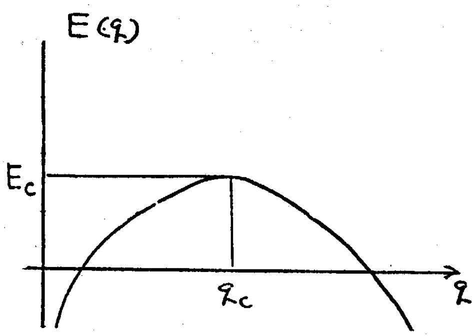

Fig. 32

をもっていることがわかる。さらに臨界核の生成を dynamicalに取り扱うためには，ここでは省略したnoise の効果をきちんと採り入れなければならない。

§12 おわりに

ここで問題にしたランダムパターンの時間発展は相転移に限らずより広いスコープをもつものと考えられ，相転移や Bénard対流への適用は単にその例題に過ぎない。従来の統計物理は

点(粒子，スピンなど)の統計物理から始まり，場の統計物理(臨界現象など)へと進んできたが，次の世代の大きな発展はパターンまたはtopological defectの統計物理にあると思われる。これは単に広い応用範囲をもつ(例えば材料工学等で言うところのmicrostructureの問題を含む)のみならず，純粋に知的な研究課題としても魅力ある問題を含んでいる。例えば数学における確率過程の分野では既に“点”ではなくて“extended objects”の確率過程を問題にし始めている。ソリトンあるいはカオス等といったスマートなレッテルがついているわけではないが，むしろ名前もついていない発展の初期の段階に飛び込んできて大きな寄与をしてくれる若い人が現れることを期待してこの講義を閉じることにする。

文　献

1) J. S. Langer, M. Bar-on and H. D. Miller, Phys. Rev. **A11** (1975) 1417
2) K. Kawasaki and T. Ohta, Prog. Theor. Phys. **59** (1978) 362
3) T. Ohta, D. Jasnow and K. Kawasaki, Phys. Rev. Lett. **49** (1982) 1223
4) K. Kawasaki and T. Ohta, Physica **118A** (1983) 175
5) T. Nagai and K. Kawasaki, Physica **120A** (1983) 587
6) K. Kawasaki and T. Nagai, Physica **121A** (1983) 175
7) K. Kawasaki, J. Phys. **C 16** (1983) 6911
8) K. Kawasaki, Ann. Phys. (N. Y.) **154** (1984a) 319
9) K. Kawasaki, Physica **124B** (1984b) 156
10) P. Prelovšek and T. M. Rice, J. Phys. **C 16** (1983) 6513