

場の理論における緩和過程

計算流体力学研究所 十河 清

1. はじめに

不安定ないしは準安定な状態にある系は、より安定な状態にむかって緩和する。その際の緩和率は、ポテンシャルの形・まさつ係数・温度などによって決まる。クラマース [1] は、この問題を、与えられたポテンシャル中でブラウン運動する粒子の統計力学として定式化して、その緩和率の公式を導いた。のちにランガー [2] は、これを場の理論に一般化して、緩和率が系の「自由エネルギー」 F を用いて

$$\text{rate} = \frac{\kappa}{\pi k_B T} \text{Im } F \quad (1)$$

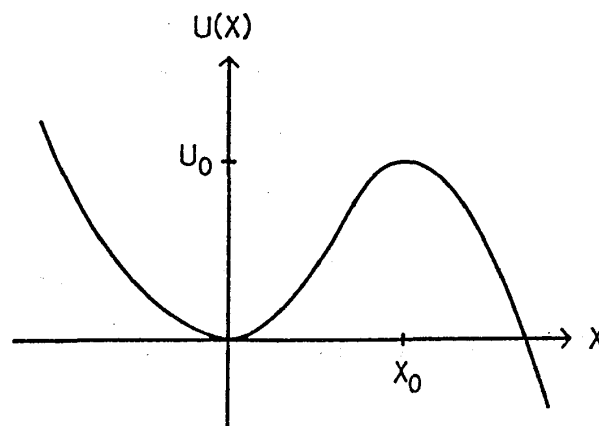
と表わせることを見出した (κ の定義は後出)。

式 (1) は、非平衡な系の性質である緩和率が、平衡系の自由エネルギー、それも虚数部分によって表わされるという、不思議なそれゆえ魅力的な表式をしている。物理学のあちこちに登場するこうしたトリックの例にもれず、この種の公式はその計算法を指定して始めて意味をもつものである。その手品の種は「解析接続と鞍点法」である。われわれ (著者と東大核研・藤本泰) は、鞍点解が厳密に求まる 2 つの例 (ϕ^3 モデルと非線形シグマモデル) について点式 (1) を用いてその緩和率を計算した。

2. ϕ^3 モデル [3]

(1) クラマースの場合 (0 + 1 次元)

図のようなポテンシャル $U(x)$ 中を運動するブラウン粒子を考える。



$$U(x) \approx \begin{cases} \frac{1}{2} \omega_0^2 x^2 & (x \approx 0) \\ U_0 - \frac{1}{2} \omega^2 (x-x_0)^2 & (x \approx x_0) \end{cases} \quad (2)$$

このとき、分配関数は以下のように計算される ($\beta = 1/k_B T$)。

$$\begin{aligned} Z &= \iint dp dx \exp \left[-\beta \left(\frac{1}{2} p^2 + \frac{1}{2} \omega_0^2 x^2 + U(x) \right) \right] \\ &= Z_0 + Z_1 + \dots \end{aligned} \quad (3)$$

ここに

$$\begin{aligned} Z_0 &= \iint dp dx \exp \left[-\beta \left(\frac{1}{2} p^2 + \frac{1}{2} \omega_0^2 x^2 \right) \right] \\ &= \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}} \cdot \sqrt{\frac{2\pi}{\beta \omega_0^2}} \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} Z_1 &= \iint dp dx \exp \left[-\beta \left(\frac{1}{2} p^2 + U_0 - \frac{1}{2} \omega^2 (x-x_0)^2 \right) \right] \\ &= \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}} \cdot \left(\frac{i}{2} \right) \cdot \sqrt{\frac{2\pi}{\beta \omega^2}} e^{-\beta U_0} \end{aligned} \quad (5)$$

ゆえ(式(5))の計算に解析接続を用いた)

$$\begin{aligned} Z &= Z_0 + Z_1 + \dots \\ &\approx Z_0 \exp \left(\frac{Z_1}{Z_0} \right) \end{aligned} \quad (6)$$

として、自由エネルギー $F = -\frac{1}{\beta} \ln Z$ を式(1)に代入して

$$\text{rate} = \frac{\kappa \omega_0}{2 \pi \omega} e^{-\beta U_0} \quad (7)$$

を得る。ここに

$$\begin{aligned} \kappa &= \sqrt{\omega^2 + \frac{\gamma^2}{4}} - \frac{\gamma}{2} \\ &= \begin{cases} \frac{\omega^2}{\gamma} & \text{overdamped} \\ \omega & \text{underdamped} \end{cases} \end{aligned} \quad (8)$$

で、 γ はまさつ係数である。式(7)がクラマースの結果である。ちなみにクラマースじしんは、ランジュバン方程式

$$\begin{cases} \dot{x} = p \\ \dot{p} = -\gamma p - U'(x) + f(t) \\ \langle f(t) f(t') \rangle = 2\gamma k_B T \delta(t-t') \end{cases} \quad (9)$$

から出発して、フォッカー・プランク方程式を経由して、式(7)を導いている。

(2) ϕ^3 場の場合(1+1次元)

次のハミルトニアン密度で記述される場の理論を考える。

$$H = \frac{1}{2} \pi^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 - \frac{1}{2} \omega_0^2 \phi^2 + \frac{1}{6} \lambda \phi^3 \quad (10)$$

式(10)は静的な鞍点解

$$\begin{aligned} \phi_{cl} &= \frac{3\omega_0^2}{\lambda} \operatorname{sech}^2\left(\frac{\omega_0}{2}x\right) \\ E_{cl} &= \frac{24\omega_0^5}{5\lambda^2} \end{aligned} \quad (11)$$

もつ。これは一種のソリトン解と見ることができる。

この鞍点解のまわりのゆらぎ $\phi = \phi_{cl} + \delta\phi$ を考えると、 $\delta\phi$ について線形化された固有値問題

$$\left\{ -\frac{d^2}{dx^2} + \omega_0^2 \left(1 - 3\operatorname{sech}^2\left(\frac{\omega_0}{2}x\right) \right) \right\} \delta\phi = \epsilon^2 \delta\phi \quad (12)$$

を得る。式(12)のスペクトルは、3つの離散モード(負・ゼロ・正を1つずつ)および連続モードから成っている。これらを用いて、緩和率が計算できる。ゼロ・モードの寄与は、ソリトンの位置(式(11)の原点)の任意性すなわち並進対称性を考慮すれば、空間サイズに比例した因子を与えることがわかる。連続モードの寄与についての長い計算のうちに、結局単位長さあたりの緩和率として、

$$\text{rate}/L = \frac{\kappa}{\pi} \frac{15}{2} \cdot \frac{\omega_0^3}{2|\epsilon_-|\epsilon_+} \sqrt{\frac{E_{cl}}{2\pi\beta}} e^{-\epsilon_+ E_{cl}} \quad (13)$$

を得る(詳細は[3]を参照されたい)。

3. 非線形シグマモデル [4]

同様に、次のハミルトニアン密度で記述される1+1次元場の理論を考える。

$$H = \frac{1}{2} \left\{ \pi_\theta^2 + \frac{\pi_\phi^2}{\sin^2 \theta} + \left(\frac{d\theta}{dx} \right)^2 + \sin^2 \theta \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 - \sin^2 \theta \right\} \quad (14)$$

これは、 $\vec{n} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$ とおけばいわゆる非線形シグマモデルに異方性（対称性を $O(2)$ におとす）を入れたものになっている。

式(14)の静的な鞍点解は、積分のパラメータ $0 < \gamma < 1$ を導入して、

$$\begin{cases} \theta_{cl}(x) = \cos^{-1} \left(\frac{\gamma}{\cosh(\gamma x)} \right) \\ \frac{d\phi_{cl}}{dx}(x) = \sqrt{1 - \gamma^2} \left(1 + \frac{\gamma^2}{\cosh^2(\gamma x) - \gamma^2} \right) \end{cases} \quad (15)$$

で与えられる。この解は、大きさ $\frac{1}{2}$ のトポロジカル荷電をもち、整数荷電をもつ真空たちとの間の遷移を媒介する「スファラロン」の例になっている。

この場合の遷移率は、やはり式(1)を用いて計算される。ゆらぎ $\theta = \theta_{cl} + \delta\theta$, $\phi = \phi_{cl} + \delta\phi$ について線形化した固有値を問題 (2×2 行列微分方程式) のスペクトルは、2つの離散モード（負とゼロ）および連続モードから成っている。これらから遷移率は

$$\text{rate} = (NV) \cdot \sqrt{\frac{k_B T}{2\pi\gamma^2}} e^{-\Delta F/k_B T} \quad (16)$$

と計算される（詳細は [4] を参照されたい）。

4. おわりに

以上の計算においては、緩和な熱的ゆらぎによってポテンシャルの山を超える過程を経て起きる、と考えている。しかるに温度が低くなると、山を越えるのではなくて、「トンネル」する過程が効いてくると思われる。この両極端をともに記述するには、経路積分法が有効であると、われわれは考えている ([5] を参照されたい)。しかしながら、両者のクロスオーバーの解明に成功した理論は未だない。これは非平衡統計力学に残された重要な問題の一つである。

参考文献

- [1] H. A. Kramers, *Physica* **7** (1940) 284.
- [2] J. S. Langer, *Ann. Phys.* **41** (1967) 108; **54** (1969) 258.

研究会報告

[3] Y. Fujimoto and K. Sogo, Phys. Rev. **D42** (1990)

[4] K. Sogo and Y. Fujimoto, J. Phys. Soc. Japan **59** (1990) 9.

[5] K. Sogo and Y. Fujimoto, Physica **A168** (1990) 820.