ハミルトン力学と２次相転移の緩和のダイナミクス

名古屋大学理学部、山口義幸[1]

♣はじめに

２次相転移系の動的性質を調べる際、さまざまな手法が用いられるが、それらは何らかの仮定を必要とし、その仮定が正当かどうかは自明でない。そこでわれわれは統計力学の基礎であるハミルトン力学に立ち戻って動的性質を調べる [1]。この報告では、臨界点付近での動的性質として、平衡のまわりで揺らいでいる系が (実効的な) エルゴードに向かう速さを調べ、臨界点付近で最もエルゴードに向かう速さが遅くなる事を示す [2]。

♣モデルとオーダーパラメータ

２次相転移を起こすモデル系として、３次元正方格子上に並んだ古典スピンが最近接相互作用している次の系 (ＸＹモデル) を考える事にする。

$$H(q,p)=\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2}p_i^2+\sum_{<ij>}(1-\cos(q_i-q_j)),\quad (<ij> \text{は最近接格子間でのみの和}). \tag{1}$$

ここで、Nは全系の自由度であり、以下では $N=14^3$ とする。この系の臨界エネルギーは $E/N\sim 3.0$ 程度であり、以下では $E/N=2.8, 3.0, 3.3$ に対する結果を示す。

この系のオーダーパラメータを次のように定義する。

$$M(t)=|\vec{M}(t)|,\quad \vec{M}(t)=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(\cos q_i,\ \sin q_i). \tag{2}$$

平衡のまわりを見るため、$M(t)$ の時系列の最初の 10,000 ステップは捨てた。

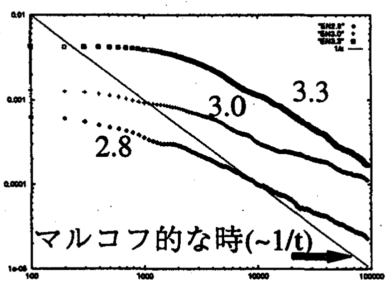

図 1: 式 (3) の時間変化。両対数表示。図中の数値は E/Nの値。

♣オーダーパラメータの動的性質

系がエルゴードに向かう速度の指標として、以下のような量を考える [3]。

$$\left\langle(\Delta\overline{M}(t))^2\right\rangle=\left\langle\left(\overline{M^i}(t)-\left\langle\overline{M}(t)\right\rangle\right)^2\right\rangle,\qquad \text{ただし、}\overline{M^i}(t)=\frac{1}{t}\int_0^t dt' M^i(t'). \tag{3}$$

ここで、上付の添字 i は初期条件を区別し、$<\cdot>$ はいろいろな初期条件に対する平均を表す。式 (3) が 0 に向かう速さで、エルゴードに達する速さを知ることができる。数値計算の結果を図１に示す。比較のため、$M(t)$ の時系列がマルコフ的なときに中心極限定理から予想される直線 ($\sim 1/t$) も示した。この図から、(１) 臨界点付近で最もエルゴードに達しにくいこと、(２) $M(t)$ の時系列はマルコフ的とはみなせないこと、がわかる。

♣参考文献

[1] Y. Y. Yamaguchi, Prog. Theor. Phys. 95 (1996) 717-31.
[2] 山口義幸, 研究会報告「福井シンポジウム・複雑性と多様性」Springer Verlag Tokyo より Proceedings として刊行予定。
[3] R. D. Mountain and D. Thirumalai, J. Phys. Chem. 93 (1989) 6975-9.

[1] e-mail: yamaguchi@allegro.phys.nagoya-u.ac.jp