

オーダーパラメータの時系列分布からの Free Energy ～およびその Free Energy からのオーダーパラメータの運動論

名古屋大学理学部、山口義幸¹

2 次相転移を起こす系を、ハミルトン方程式に従って時間発展させた結果、臨界点では強いカオスになっているにも関わらず、オーダーパラメータのベキ的な緩和を生成する軌道が存在する事が分かっている [1]。もし系が弱いカオスならば摂動論を用いてこの現象を理解する事も可能であるが、強いカオス系に対しては摂動論を適用できず、この現象は他の方法で理解しなければならない。そこでここでは、臨界点におけるベキ的な緩和を予言している、統計力学の現象論で理解できるか、またその現象論に力学的な基礎付けを与える事ができるか、という事を検証する。

ここでは、オーダーパラメータ $M(t)$ の時間発展を記述する現象論として次の理論を考える [2]。

$$F(M) = a'(T - T_c)M^2 + b(T)M^4, \quad a', b(T) > 0 \quad (1)$$

$$\frac{dM}{dt} = -\Gamma \frac{\partial F(M)}{\partial M}, \quad \Gamma > 0. \quad (2)$$

ここに、 $M, F(M)$ はそれぞれオーダーパラメータ、Landau のフリーエネルギーである。この現象論の仮定は次の二つである。

(A) Free energy が式 (1) の形に書ける。特に、臨界点で 2 次の項が消える。

(B) オーダーパラメータの緩和の運動方程式 (2) は、Free energy の gradient に従う。特に、臨界点で式 (2) の解は、ベキ型になる。

よって、力学的にこの二つの仮定が満たされるかどうかを検証すれば良い。Free energy は、力学的には次の様に定義する [3]。

$$\beta F(M) = -\ln P(M), \quad \beta = 1/k_B T. \quad (3)$$

ここに、 $P(M)dM$ は $M(t)$ の時系列が M から $M + dM$ の間の値を持つ確率である。

2 次相転移を起こす系として、われわれは次のモデルを考える事にする。

$$H(q, p) = \sum_{i=1}^{N^{tot}} \frac{1}{2} p_i^2 + \frac{1}{N^{tot}} \sum_{i>j}^{N^{tot}} (1 - \cos(q_i - q_j)). \quad (4)$$

N^{tot} は全系の自由度である。フリーエネルギーを考えるのであるから、この中から選んだ N の自由度を持つ部分系について考える。

図 1 は、32 本の軌道から作られた $M_i(t)$ ($i = 1, 2, \dots, 32$) を各時刻で平均して作った $\langle M(t) \rangle = \sum_{i=1}^{32} M_i(t)/32$ の時間変化である。計算するステップ数の不足から、確かな事は分からないが、トランジェントな時間の後ベキ的な傾向は示すことが分かる (time > 10000)。図 2 は、Free energy の全エネルギー依存性である。臨界エネルギーでも 2 次の項は依然残っているものの、臨界エネルギー以外の場合に比べて 2 次の係数は最も小さくなってい

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

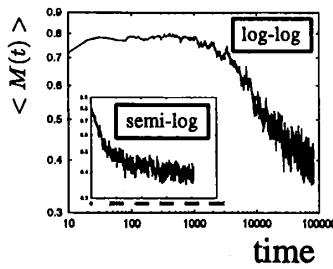


図 1: $M_i(t)$ の初期値平均 $\langle M(t) \rangle$ の時間発展。 $E_c/N^{tot} = 0.75$. $N = 40, N^{tot} = 200$.

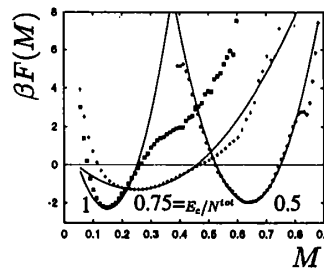


図 2: Free energy の全エネルギー依存性。図中の数値は E/N^{tot} の値で、0.75 が臨界エネルギー。実線は 2 次関数での近似。

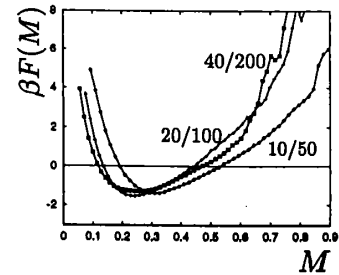


図 3: Free energy の自由度依存性。図中の数値は N/N^{tot} の値。

る。図 3 は、Free energy の自由度依存性である。計算している自由度が小さくはあるが、自由度が大きくなると共に、2 次の係数が小さくなっている傾向が見られる。

結果としては、計算するステップ数、自由度などが不足しているものの、

(A) 臨界点における Free energy の 2 次の項は、自由度を上げれば小さくなる傾向がある、

(B) $\langle M(t) \rangle$ の運動は、長時間領域でべき的な傾向を示す、

ことにより、力学的な結果が現象論の仮定を満たす傾向があることが分かった。

今後の課題は、さらに詳しい計算による確認や結果のモデル依存性の調査などである。

References

- [1] Y.Y.Yamaguchi, Prog. Theor. Phys. 投稿中
- [2] L.D.Landau and I.M.Khalatnikov, Dokl. Akad. Nauk SSSR **96**,469 (1954).
- [3] Y.Y.Yamaguchi, In preparation