# 物性理論特論 II 第7回 Ginzburg 基準・動的臨界現象

#### 川﨑猛史

大阪大学 D3 センター/ 大学院理学研究科物理学専攻

Last update: June 3, 2025

### 第7回講義資料目次

- 1 講義のスケジュール
- 2 今回の内容
- 3 前回の続き:Ginzburg 基準
  - Ginzburg 基準
  - Ginzburg 基準の一般化
- 4 動的臨界現象
  - 動的臨界現象
  - Langevin 方程式
  - 時間発展する Ginzburg-Landau 方程式
  - Gauss 模型における動的臨界現象
- 5 まとめ
- 6 補遺 1:Langevin 方程式と揺動散逸定理の導出
- 7 補遺 2:保存系(Model B)の運動方程式の導出

## 第7回講義資料目次

- 1 講義のスケジュール
- 2 今回の内容
- 3 前回の続き:Ginzburg 基準
  - Ginzburg 基準
  - Ginzburg 基準の一般化
- 4 動的臨界現象
  - 動的臨界現象
  - Langevin 方程式
  - 時間発展する Ginzburg-Landau 方程式
  - Gauss 模型における動的臨界現象
- 5 まとめ
- 6 補遺 1:Langevin 方程式と揺動散逸定理の導出
- 7 補遺 2:保存系(Model B)の運動方程式の導出

### 1. 講義のスケジュール

- 1 4/15:第1回
- 2 4/22:第2回
- 3 5/07:第3回
- 4 5/13:第4回
- 5 5/20:第5回
- 6 5/27:第6回
- 7 6/03:第7回
- 8 6/10:第8回
- 9 6/17:第9回
- 10 6/24:第 10 回
- 11 7/01:第 11 回
- 12 7/08:第 12 回
- 13 7/15:第13回7/22は休講
- 14 7/29:第14回
- 15 8/5 予備 第 15 回



## 第7回講義資料目次

- 1 講義のスケジュー/
- 2 今回の内容
- 3 前回の続き:Ginzburg 基準
  - Ginzburg 基準
  - Ginzburg 基準の一般化
- 4 動的臨界現象
  - 動的臨界現象
  - Langevin 方程式
  - 時間発展する Ginzburg-Landau 方程式
  - Gauss 模型における動的臨界現象
- 5 まとめ
- 6 補遺 1:Langevin 方程式と揺動散逸定理の導出
- 7 補遺 2:保存系(Model B)の運動方程式の導出



### 2. 今回の内容

今回は Ginzburg-Landau 理論を扱う。

- 前回は Landau 自由エネルギーを拡張し、空間的臨界揺らぎが臨界点で 発散することを示した。
- 今回は,空間揺らぎの大きさに注目することで,次元を下げていった際に,平均場理論が破綻しはじめる空間次元(上部臨界次元)を具体的に求める (Ginzburg 基準)。
- 今回はさらに、空間揺らぎの時間緩和(動的臨界現象)を考察する。そのために、秩序変数場の現象論的時間発展方程式を導入する。

## 第7回講義資料目次

- 1 講義のスケジュール
- 2 今回の内容
- 3 前回の続き:Ginzburg 基準
  - Ginzburg 基準
  - Ginzburg 基準の一般化
- 4 動的臨界現象
  - 動的臨界現象
  - Langevin 方程式
  - 時間発展する Ginzburg-Landau 方程式
  - Gauss 模型における動的臨界現象
- 5 まとめ
- 6 補遺 1:Langevin 方程式と揺動散逸定理の導出
- 7 補遺 2:保存系(Model B)の運動方程式の導出

## 3. Ginzburg 基準:平均場理論はどこまで正しいか?

- ♣ 平均場理論はどこまで正しいか?
  - Landau 理論は平均場近似に基づき臨界指数を予言する。
  - 一方,実際の臨界現象においては臨界点近傍では「臨界ゆらぎ」が支配 的になる。
  - このゆらぎのエネルギーが平均場自由エネルギーの障壁を越える場合、 平均場理論は破綻する。
  - このように「平均場の Landau 理論が破綻する領域」を定量評価するの が Ginzburg 基準 (Ginzburg criterion) である。

## 3.1. Ginzburg 基準

- ♣ 空間揺らぎのエネルギーと平均場自由エネルギー障壁の比較空間次元dが低下すると空間揺らぎが増大し、平均場自由エネルギーにおける秩序の安定性が崩れる。この安定性維持の観点から、相関長程度の大きさをもつ空間揺らぎが熱でm=0の自由エネルギーの極大地点に到達しない条件(秩序が安定化する条件)を議論する。
  - まず単位粒子あたりの平均場自由エネルギー

$$f_{\rm L}(m) = f_0 + \frac{1}{2}am^2 + \frac{1}{4}bm^4 \tag{1}$$

を考える。

■ そこでの自由エネルギー障壁の高さ(原点と極小値の差)は

$$\Delta f_{\rm B} = f_{\rm L}(m_0) - f_{\rm L}(0) \sim -\frac{a^2}{4b} \quad \Rightarrow \quad |\Delta f_{\rm B}| \sim \frac{a^2}{b} \tag{2}$$

である。



## 3.1. Ginzburg 基準 (2)

■ 特に臨界点近傍における障壁の高さは

$$a \sim a_0 (T - T_c) \quad \Rightarrow \quad \Delta f_{\rm B} \sim (T - T_c)^2$$
 (3)

である。

- 次に,相関長  $\xi$  の一様な相関領域における自由エネルギー障壁の大きさは  $\xi^d \Delta f_{\mathrm{B}}$  程度である。

## 3.1. Ginzburg 基準 (3)

■ よって,相関長程度の空間揺らぎが安定である条件( = 平均場理論が 成立する条件)は,モードあたりの揺らぎのエネルギーに対して,十分 自由エネルギー障壁が高い場合であるので

$$\xi^d \Delta f_{\rm B} \ge k_{\rm B} T \tag{4}$$

である。(なお,ここでは,相関長より短波長の揺らぎは散逸し不安定 化してもよい。相関長より長波長の揺らぎが安定であれば平均場の議 論が成立する。)

■ ここで  $t=\frac{T_c-T}{T_c}$  のもと, $\Delta f_{\rm B} \propto |t|^2$ , $\xi^d \propto |t|^{-dv}$  より,適宜物理次元をスケールアウトさせれば必要条件

$$|t|^{2-d\nu} \ge 1 \tag{5}$$

を得る。

◆□▶ ◆□▶ ◆■▶ ◆■▶ ● 釣९@

## 3.1. Ginzburg 基準 (4)

■ 上の関係が臨界点 ( $|t| \ll 1$ ) まで安定である必要条件は平均場理論での値  $v = \frac{1}{2}$  を用いて,

$$2 - dv \le 0 \tag{6}$$

である。したがって

$$d \ge 4 \tag{7}$$

を得る。これより、4次元未満では平均場理論が破れることがわかる。

揺らぎが支配的となり平均場理論が破れる次元の上限(ここでは4次元)を上部臨界次元(upper critical dimension)という。

## 3.2. Ginzburg 基準の一般化

#### ♣ Ginzburg 基準の一般化

Ginzburg 基準は、平均場臨界指数  $\beta$ , $\gamma$ , $\nu$  を用いて、次のように表されることが知られている:

$$d \ge \frac{\gamma + 2\beta}{\nu} \tag{8}$$

以下、この関係式の 導出方法を 2 通り 紹介する。

まず 1 つ目 は、前節と同様に相関長程度の揺らぎのエネルギーと自由エネルギー障壁の高さを比較する方法を基にするが、ここでは新たに Landau 理論における係数 a および b を m や  $\chi$  のスケーリング則と結びつける。

■ 外場 h を加えた Landau の自由エネルギー密度を

$$f(m) = \frac{1}{2}am^2 + \frac{1}{4}bm^4 - hm \tag{9}$$

とする。



## 3.2. Ginzburg 基準の一般化 (2)

■ 平衡状態では  $\partial f/\partial m|_{m=m_0}=0$  より、自発磁化  $m_0$  は

$$0 = am_0 + bm_0^3 - h (10)$$

を満たす。

■ 自発磁化の感受率は、この関係式を h で微分することで

$$(a + 3bm_0^2)\frac{dm_0}{dh} = 1 \implies \chi = \frac{1}{a + 3bm_0^2}$$
 (11)

を得る。

■ 臨界点より低温  $T < T_c$ (すなわち  $t \to 0$ )では、自発磁化の関係式  $m_0^2 \sim -a/b$  を代入して:

$$\chi \sim \frac{1}{a + 3b \cdot \frac{-a}{b}} = \frac{1}{a - 3a} = \frac{1}{-2a} \tag{12}$$

■ よって、臨界指数の定義 χ ~ |t|<sup>-γ</sup> から

 $a \propto |t|^{\gamma}$ 



# 3.2. Ginzburg 基準の一般化 ⑶

**■** また、 $m_0^2 = -a/b \sim |t|^{2\beta}$  より

$$b \sim \frac{-a}{|t|^{2\beta}} \sim \frac{|t|^{\gamma}}{|t|^{2\beta}} = |t|^{\gamma - 2\beta}$$
(14)

以上より、係数のスケーリング則は:

$$a \propto |t|^{\gamma}, \quad b \propto |t|^{\gamma - 2\beta}$$
 (15)

■ 自由エネルギー障壁のスケーリングは:

$$\Delta f_B \sim f(0) - f(m_0) = \frac{a^2}{4b} \sim |t|^{\gamma + 2\beta}$$
 (16)

■ 相関領域における自由エネルギー障壁は:

$$\xi^d \Delta f_B \sim |t|^{-d\nu} \cdot |t|^{\gamma + 2\beta} = |t|^{\gamma + 2\beta - d\nu} \tag{17}$$

## 3.2. Ginzburg 基準の一般化 (4)

**Ginzburg** 基準は、熱ゆらぎ  $k_BT$  に対して障壁が十分大きいことを要求する:

$$\xi^d \Delta f_B \ge k_B T \quad \Rightarrow \quad |t|^{\gamma + 2\beta - d\nu} \ge 1$$
 (18)

 $|t| \ll 1$  の領域でこの不等式が成り立つためには、次が必要:

$$d \ge \frac{\gamma + 2\beta}{\nu} \tag{19}$$

■ 等号が成立する場合の次元が 上部臨界次元 であり、平均場理論の臨界 指数を代入すれば  $d_c=4$  が得られる。



## 3.2. Ginzburg 基準の一般化 (5)

- ♣ Ginzburg 基準導出方法 2 つ目
  - ここでは平均場近似の有効性が、秩序変数の揺らぎが平均場の寄与に比べて十分に小さいことに注目する。
  - たとえば Ising 模型では、自由エネルギーの支配項は磁化の平均値の 2 乗  $m^2$  である。これに対して揺らぎの 2 次の寄与が小さいという条件が 平均場理論が成立する条件であり

$$\delta S_i \delta S_j \ll m^2 \tag{20}$$

で表される。ただし、 $\delta S_i = S_i - \langle S_i \rangle$  である。

• これを連続体の場の理論に拡張し、両辺を熱平均をとる。そして,磁化場  $m(\mathbf{r})$  に対して、空間相関の積分が平均磁化の 2 乗に比べて小さいことを要求する。積分領域として相関長  $\xi$  程度までを取ると、

$$\int_{|\mathbf{r}|<\xi} d\mathbf{r} \langle \delta m(\mathbf{r}) \delta m(\mathbf{0}) \rangle \ll \underbrace{\int_{|\mathbf{r}|<\xi} d\mathbf{r} \langle m \rangle^2}_{\mathcal{E}^d m^2}$$
(21)

で記述される条件が得られる。



## 3.2. Ginzburg 基準の一般化 (6)

■ ここで、左辺は空間相関関数の積分であり、 $r \gtrsim \xi$  で急激に減衰することから、積分領域を  $[0,\infty)$  に拡張しても本質は変わらない。したがって、

$$\int d\mathbf{r} \langle \delta m(\mathbf{r}) \delta m(\mathbf{0}) \rangle \ll \xi^d \langle m \rangle^2$$
 (22)

となる。

■ この左辺は、相関関数のフーリエ変換における q = 0 成分、すなわち

$$\int d\mathbf{r} \langle \delta m(\mathbf{r}) \delta m(\mathbf{0}) \rangle = \tilde{G}(\mathbf{q} = 0)$$
 (23)

に対応する(Sum ルール)。

■ (補足) 相関関数の変数の定義は,前回  $T>T_c$  では  $\langle m(\mathbf{r})m(\mathbf{0})\rangle$  としたが, $m(\mathbf{r})$  の平均が 0 であるので, $\langle \delta m(\mathbf{r})\delta m(\mathbf{0})\rangle$  と同等である。 $T< T_c$  では前回補遺で示した通り,秩序変数  $\delta m(\mathbf{r})$  に関するガウス模型の自由エネルギーを構成できたので,相関関数も  $\delta m(\mathbf{r})$  に関して構成する。

# 3.2. Ginzburg 基準の一般化 (7)

■ 一方、 $\tilde{G}(\mathbf{q})$  は,Ornstein-Zernike 型の相関関数

$$\tilde{G}(\mathbf{q}) = \frac{k_B T}{a + cq^2} \qquad (T > T_c)$$

$$\tilde{G}(\mathbf{q}) = \frac{k_B T}{-2a + cq^2} \qquad (T \le T_c)$$
(24)

である。q=0 のとき,一般的に

$$\tilde{G}(\mathbf{0}) \propto \frac{k_B T}{|a|} \propto \chi \propto |t|^{-\gamma}$$
 (25)

となる。

■ よって、平均場が成立する条件は

$$\chi \ll \xi^d \langle m \rangle^2 \tag{26}$$

であり、これが Ginzburg 基準の別の定式化となる。

- 4 ロ ト 4 団 ト 4 巨 ト 4 巨 - か Q (~)

## 3.2. Ginzburg 基準の一般化 (8)

■ これにより,

$$|t|^{-\gamma} \ll |t|^{-\nu d} |t|^{2\beta} \tag{27}$$

である。よって,これが成立する必要条件は $|t| \ll 1$ より,

$$-\gamma \ge -d\nu + \beta \tag{28}$$

となるので,平均場指数が  $\beta = 1/2$ , $\gamma = 1$ ,  $\nu = 1/2$  であるので

$$d \ge \frac{2\beta + \gamma}{\nu} = 4 \tag{29}$$

となる。



## 第7回講義資料目次

- 1 講義のスケジュー/
- 2 今回の内容
- 3 前回の続き:Ginzburg 基準
  - Ginzburg 基準
  - Ginzburg 基準の一般化
- 4 動的臨界現象
  - 動的臨界現象
  - Langevin 方程式
  - 時間発展する Ginzburg-Landau 方程式
  - Gauss 模型における動的臨界現象
- 5 まとめ
- 6 補遺 1:Langevin 方程式と揺動散逸定理の導出
- 7 補遺 2:保存系(Model B)の運動方程式の導出



## 4.1. 動的臨界現象

#### ♣ 動的臨界現象

- 臨界点近傍では、熱平衡における静的な物理量だけでなく、時間依存する非平衡過程においても異常な振る舞いが現れる。
- このような時間的振る舞いの臨界現象は、動的臨界現象 (dynamical critical phenomena)と呼ばれる。
- 今回は、Gauss 模型に基づく平均場近似の枠組みで、動的臨界 現象を取り扱う。
- この種の現象は、Brown 運動を記述する Langevin 方程式と類似の構造をもつことが経験的に知られており、秩序変数場  $m(\mathbf{r})$  を粒子の位置に対応する量とみなすことで、現象論的に Langevin 方程式を導入し、熱揺らぎおよび平衡状態への緩和過程を記述することができる。

## 4.2. Langevin 方程式

#### ♣ Langevin 方程式

- ここでは類推として、粘性流体中にあるコロイド粒子の Brown 運動を考える。
- 流体は温度 T の熱浴としての役割を担い、コロイド粒子は熱浴 ヘエネルギーを散逸する一方で、熱浴からは無数の分子からの 撃力を受けてエネルギーの供給を受ける。これらがバランスし て平衡状態が保たれる。
- このような振る舞いを表すコロイド粒子の運動方程式は、 Langevin 方程式として

$$m\frac{\mathrm{d}\mathbf{v}(t)}{\mathrm{d}t} = -\zeta\mathbf{v}(t) - \frac{\partial U}{\partial\mathbf{r}(t)} + \eta(t)$$
 (30)

と表される。ここで  $\mathbf{r}$  と  $\mathbf{v}$  はコロイド粒子の位置と速度、U は ポテンシャルエネルギーである。 $\eta(t)$  は溶媒分子から受けるラ ンダムな力であり、白色ノイズとして扱われる。

## 4.2. Langevin 方程式 (2)

■ この白色ノイズは以下の性質を満たす:

$$\langle \boldsymbol{\eta}(t) \rangle = \mathbf{0} \tag{31}$$

$$\langle \boldsymbol{\eta}(t) \cdot \boldsymbol{\eta}(t') \rangle = 2d\zeta k_B T \delta(t - t') \tag{32}$$

特に式 (32) を揺動散逸定理(Fluctuation-Dissipation Theorem)という。

■ 揺動散逸定理は、コロイド粒子の平均運動エネルギーが等分配 則により

$$\frac{1}{2}m\langle \mathbf{v}(t)^2\rangle = \frac{d}{2}k_B T \tag{33}$$

となることから導かれる(証明は補遺参照)。

■ 次に、このコロイドの運動方程式においてゆっくりとした運動の みに注目する。(雨粒の落下運動における終端速度を思い出せ)



川崎 (阪大 D3C/理物)

## 4.2. Langevin 方程式 (3)

lacktriangleright このような時間スケールでは過減衰極限(overdamped limit)を考えることで、慣性項  $m rac{dv}{dt}$  が無視でき、運動方程式は

$$\mathbf{0} = -\zeta \mathbf{v}(t) - \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}(t)} + \eta(t)$$
 (34)

となる。

■ 抵抗係数 $\zeta$ の逆数として移動度 $\Gamma = \frac{1}{\zeta}$ を定義すると、上式は

$$\frac{d\mathbf{r}(t)}{dt} = \mathbf{v}(t) = -\frac{1}{\zeta} \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}(t)} + \frac{1}{\zeta} \boldsymbol{\eta}(t)$$

$$= -\Gamma \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}(t)} + \Gamma \boldsymbol{\eta}(t) \tag{35}$$

と整理される。



## 4.2. Langevin 方程式 (4)

■ 両辺の熱平均(ランダムノイズに関する統計平均)をとると、 ノイズ項が消えて位置の時間発展方程式

$$\frac{\partial \langle \mathbf{r}(t) \rangle}{\partial t} = -\Gamma \left\langle \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}(t)} \right\rangle \sim \underbrace{-\frac{\partial U}{\partial \langle \mathbf{r}(t) \rangle}}$$
(36)

平均位置から力を算出

となる。

- この方程式は緩和ダイナミクスを表し、摂動により生じた変位がポテンシャルの最小値(安定点)に向けて緩和するダイナミクスを記述する。
- 以下では、この運動方程式を一般化し、臨界現象における秩序 変数のダイナミクスへ応用する。

(ロ) (回) (目) (目) (目) りく()

## 4.3. 時間発展する Ginzburg-Landau 方程式

- ♣ 時間発展する Ginzburg-Landau 方程式
  - ここでは、粒子運動の Langevin 方程式を秩序変数の時間発展方程式に一般化する。
  - 秩序変数のダイナミクスは、自由エネルギーを最小化する方向に 時間発展すると仮定する(overdamped な緩和ダイナミクス)。
  - 粒子の位置座標  $\mathbf{r}(t)$  に対応する量として、熱平均された秩序変数場  $m(\mathbf{r},t)$  を考える。 粒子系では、ポテンシャルを最小化する力  $-\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}(t)}$  が作用するが、 秩序変数に対しては、自由エネルギーを最小化する「外場: 一般化された力」  $-\frac{\partial F}{\partial \mathbf{r}(\mathbf{r},t)}$  が作用すると考える。
  - $\blacksquare$  ここで  $\frac{\delta F}{\delta m}$  は Gizbrug-Landau 自由エネルギー汎関数 F[m] の $m(\mathbf{r},t)$  に関する 汎関数微分である。

## 4.3. 時間発展する Ginzburg-Landau 方程式 (2)

■ この類推に基づけば、秩序変数の時間発展方程式は次のように 表される:

$$\frac{\partial m(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\Gamma \frac{\delta F}{\delta m(\mathbf{r},t)} \tag{37}$$

このような方程式を 時間発展する Ginzburg-Landau 方程式 (Time-Dependent Ginzburg-Landau equation, TDGL 方程式) とよぶ。この場の方程式により記述される系は,秩序変数がマクロに保存しないことから非保存ダイナミクスと分類され,Allen – Cahn 方程式ともよばれる。

■ この非保存ダイナミクスは Model A と Hohenberg と Halperin により分類されている [P. C. Hohenberg and B. I. Halperin, Rev. Mod. Phys. 49, 435 (1977)]。後述の Model B は保存ダイナミクス。

↓□▶ ↓□▶ ↓ □▶ ↓ □ ▼ ) Q (~)

## 4.3. 時間発展する Ginzburg-Landau 方程式 ⑶

■ 一方,より一般的には、連続場の場合、移動度 Γ は他の点 r' の 影響を受け、Green 関数として記述される:

$$\frac{\partial m(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\int d\mathbf{r}' \, \Gamma(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{\delta F}{\delta m(\mathbf{r}',t)}$$
(38)

これは TDGL 方程式の一般形である。

■ この形式は、非局所的な緩和や保存則を含む,より広いクラスの動力学を記述する。 特に、 $\Gamma(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \Gamma_0 \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$  とすれば、局所応答となり当初の関係式に戻る。

< ロ > < @ > < 重 > < 重 > へ 回 > < 回 > へ 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < 回 る の ○ □ < □ る の ○ □ < □ る の ○ □ < □ る の ○ □ < □ る の ○ □ < □ る の ○ □ < □ る の ○ □ < 回

## 4.4. Gauss 模型における動的臨界現象

- ♣ Gauss 模型における動的臨界現象
  - 具体例として、TDGL (time-dependent Ginzburg Landau) 方程式を Gauss 模型 (調和振動子模型) に適用する。自由エネルギー汎関数は以下のように与えられる:

$$F[m] = \int d\mathbf{r} \left[ \frac{a}{2} m(\mathbf{r})^2 + \frac{c}{2} (\nabla m(\mathbf{r}))^2 \right]$$
 (39)

ここで  $a=a_0(T-T_c)$  は温度依存のパラメータ、c>0 は勾配項の係数である。

■ 勾配項(Ginzburg 項)に対して部分積分を行うと、

$$\int d\mathbf{r} \, \frac{c}{2} (\nabla m)^2 = -\int d\mathbf{r} \, \frac{c}{2} \, m(\mathbf{r}) \nabla^2 m(\mathbf{r}) + \, \text{\$ ang}$$
 (40)

適切な境界条件(例:周期境界条件)のもとで表面項は無視できる。

(ロ) (回) (目) (目) (目) りく()

## 4.4. Gauss 模型における動的臨界現象 (2)

■ この結果から、汎関数微分は

$$\frac{\delta F}{\delta m(\mathbf{r})} = am(\mathbf{r}) - \frac{c}{2} \nabla^2 m(\mathbf{r})$$
 (41)

と求まる。

■ 一般的な TDGL 方程式は、

$$\frac{\partial m(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\int d\mathbf{r}' \, \Gamma(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{\delta F}{\delta m(\mathbf{r}',t)}$$

$$= -\int d\mathbf{r}' \, \Gamma(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \left[ am(\mathbf{r}',t) - \frac{c}{2} \nabla'^2 m(\mathbf{r}',t) \right] \tag{42}$$

となる。これを解くために Fourier 変換すると、

$$\frac{\partial \tilde{m}(\mathbf{q},t)}{\partial t} = -\tilde{\Gamma}(\mathbf{q}) \left( a + \frac{cq^2}{2} \right) \tilde{m}(\mathbf{q},t) \tag{43}$$

となる。ただし、 $\tilde{m}(\mathbf{q},t) = \int d\mathbf{r} \, m(\mathbf{r},t) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$  である。

◆□ > ◆□ > ◆重 > ◆重 > ■ の Q @

## 4.4. Gauss 模型における動的臨界現象 (3)

この方程式の解は

$$\tilde{m}(\mathbf{q},t) = \tilde{m}(\mathbf{q},0) e^{-t/\tau_q} \tag{44}$$

$$\tau_q = \frac{1}{\tilde{\Gamma}(\mathbf{q})\left(a + \frac{cq^2}{2}\right)} \tag{45}$$

ここで  $au_q$  は波数  ${f q}$  モードの緩和時間である。

■ 特に 非保存系では  $q \rightarrow 0$  において  $\tilde{\Gamma}(0)$  が有限値に収束する。(保存系とは異なりマクロな系でも緩和できる。)ゆえに,

$$\tau_0 = \frac{1}{\tilde{\Gamma}(\mathbf{0})a} \propto \frac{1}{a} \propto |t|^{-1} \tag{46}$$

となり,臨界点近傍で $|t|^{-1}$ で緩和時間が発散する。

(ロ) (部) (注) (注) 注 り(())

### 4.4. Gauss 模型における動的臨界現象 (4)

■ 相関長  $\xi \propto |a|^{-1/2} \propto |t|^{-1/2}$  を用いると、

$$\tau_0 \propto \xi^z, \quad z = 2 \tag{47}$$

ここでz=2 は **Model A**(非保存ダイナミクス)の動的臨界指数である。

補足:保存則がある場合

■ 一方、合金の相分離のように秩序変数の総量が保存される場合、 $q \rightarrow 0$  モード(系全体)は時間発展しない。すなわち、

$$\frac{\partial \tilde{m}(\mathbf{0}, t)}{\partial t} = 0 \tag{48}$$

保存則により、

$$-\tilde{\Gamma}(\mathbf{0})\left(a - \underbrace{\frac{c}{2}q^2}_{0}\right) = 0 \tag{49}$$

## 4.4. Gauss 模型における動的臨界現象 (5)

となるので,  $a \neq 0$  であるため  $\tilde{\Gamma}(\mathbf{0}) = 0$  となる。

■ 次に,グリーン関数  $\Gamma(\mathbf{r})$  は,等方的であることから距離 r の関数であり,偶関数となる。このことから  $\Gamma(\mathbf{r})=\Gamma(-\mathbf{r})$  を Fourier 変換することで

$$\tilde{\Gamma}(\mathbf{q}) = \tilde{\Gamma}(-\mathbf{q}) \tag{50}$$

を得る。つまり Fourier 空間でも  $\tilde{\Gamma}(\mathbf{q})$  は  $\mathbf{q}$  の偶関数である。

■ よって、 $q \to 0$  では、q に対して展開することで、 $\tilde{\Gamma}(\mathbf{0}) = 0$  と合わせて 最低次は  $q^2$  の項であることがわかる。したがって、

$$\tilde{\Gamma}(\mathbf{q}) \propto q^2$$
 (51)

となる。



### 4.4. Gauss 模型における動的臨界現象 (6)

このとき緩和時間は、

$$\tau_{q} \sim \frac{1}{q^{2} \left( a - \frac{c}{2} q^{2} \right)} \\
= \frac{\frac{a}{2}}{q^{2} \left( 2 - \frac{c}{a} q^{2} \right)} \\
= \frac{\frac{a}{2}}{q^{2} \left( 2 - \xi^{2} q^{2} \right)} \tag{52}$$

ここで  $\xi^2 = \frac{c}{a}$  を用いた。

■ 特に 臨界ゆらぎの緩和: $q = 1/\xi$  のモードに着目すると、

$$\tau_{1/\xi} \sim \frac{a\xi^2}{4}$$

$$\sim \xi^z, \quad z = 4 \tag{53}$$

すなわち保存則のある系では、動的臨界指数がz=4 に変化する (Model B)。

### 第7回講義資料目次

- 2 今回の内容
- 3 前回の続き:Ginzburg 基準
  - Ginzburg 基準
  - Ginzburg 基準の一般化
- 4 動的臨界現象
  - 動的臨界現象
  - Langevin 方程式
  - 時間発展する Ginzburg-Landau 方程式
  - Gauss 模型における動的臨界現象
- 5 まとめ
- 6 補遺 1:Langevin 方程式と揺動散逸定理の導出

### 5. まとめ

- Ginzburg 基準を多角的に検討し、平均場近似の有効性の範囲を 明らかにした。
- 時間発展型 Ginzburg Landau 方程式(TDGL)を導入し、動 的臨界現象を定式化した。
- 臨界点近傍における緩和時間の発散は以下のように分類される:

非保存系(Model A):  $\tau \sim \xi^2$ 

保存系(Model B):  $\tau \sim \xi^4$ 

(Hohenberg & Halperin の分類)



## 第7回講義資料目次

- 1 講義のスケジュール
- 2 今回の内容
- 3 前回の続き:Ginzburg 基準
  - Ginzburg 基準
  - Ginzburg 基準の一般化
- 4 動的臨界現象
  - 動的臨界現象
  - Langevin 方程式
  - 時間発展する Ginzburg-Landau 方程式
  - Gauss 模型における動的臨界現象
- 5 まとめ
- 6 補遺 1:Langevin 方程式と揺動散逸定理の導出
- 7 補遺 2:保存系(Model B)の運動方程式の導出

## 補遺1:Langevin 方程式と揺動散逸定理の導出

ここでは、Langevin 方程式から(第2種)揺動散逸定理を導出する.

■ 抵抗係数  $\zeta$  をもつ温度 T の溶媒(熱浴)中を運動する質量 m の球のブラウン運動は,以下の Langevin 方程式

$$m\frac{\mathrm{d}\mathbf{v}(t)}{\mathrm{d}t} = -\zeta\mathbf{v}(t) + \mathbf{F}_{\mathrm{B}}(t)$$
 (54)

によりモデル化される.

lacksquare ここで熱揺動力  $\mathbf{F}_{\mathbf{B}}(t)$  は白色ノイズ(2 時刻相関関数が時間に関するデルタ関数)であり,

$$\langle \mathbf{F}_{\mathrm{B}}(t)\mathbf{F}_{\mathrm{B}}(t')\rangle = B\,\delta(t-t')\,\mathbf{1}$$
 (55)

を満たすとする.ここで 1 は単位行列であり, $F_B(t)$  は中心極限定理により,分散が  $\sqrt{B\delta(t-t')}$  の正規分布(Gaussian)に従うと考えられる.

■ 以下では,この系が熱平衡状態にあるという前提のもと,B の値をエネルギー等分配則から求める.

## 補遺1:Langevin方程式と揺動散逸定理の導出 (2)

■ 古典平衡統計力学によれば,エネルギー等分配則により,空間次元を d とすれば

$$\left| \langle \mathbf{v}(t)^2 \rangle = \frac{dk_{\rm B}T}{m} \right| \tag{56}$$

が成り立つ(Maxwell – Boltzmann 分布による).ここで  $k_B$  はボルツマン定数である.気体定数 R とボルツマン定数の関係は,モル数 n と粒子数 N により  $nR = Nk_B$  で与えられる.

■ 式 (54) を定数変化法により解くと、速度ベクトルは

$$\mathbf{v}(t) = \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t' \ \mathbf{F}_{\mathrm{B}}(t') \, e^{-\gamma(t-t')} \tag{57}$$

と表される. ここでは簡単のために  $\zeta = m\gamma$  とおいた.

### 補遺1:Langevin方程式と揺動散逸定理の導出(3)

■ このとき速度の2乗平均は、以下のように計算できる:

$$\langle \mathbf{v}(t)^{2} \rangle = \frac{1}{m^{2}} \int_{-\infty}^{t} dt_{1} \int_{-\infty}^{t} dt_{2} \langle \mathbf{F}_{B}(t_{1}) \cdot \mathbf{F}_{B}(t_{2}) \rangle e^{-\gamma(t-t_{1})} e^{-\gamma(t-t_{2})}$$

$$= \frac{1}{m^{2}} \int_{-\infty}^{t} dt_{1} \int_{-\infty}^{t} dt_{2} dB \, \delta(t_{1} - t_{2}) e^{-\gamma(2t-t_{1}-t_{2})}$$

$$= \frac{1}{m^{2}} \int_{-\infty}^{t} dt_{1} dB \, e^{-2\gamma(t-t_{1})}$$

$$= \frac{1}{m^{2}} \int_{0}^{\infty} dt' dB \, e^{-2\gamma t'}$$

$$= \frac{Bd}{2m^{2} \gamma}$$
(58)

■ これを  $\langle \mathbf{v}(t)^2 \rangle = \frac{dk_BT}{m}$  と等置すると, $m\gamma = \zeta$  より,

$$B = 2\zeta k_{\rm B}T \tag{59}$$

が得られる.



## 補遺1:Langevin方程式と揺動散逸定理の導出(4)

■ よって、熱揺動力の時間相関関数は、

$$\langle \mathbf{F}_{\mathrm{B}}(t)\mathbf{F}_{\mathrm{B}}(t')\rangle = 2\zeta k_{\mathrm{B}}T\,\delta(t-t')\,\mathbf{1}$$
(60)

を満たすことがわかる.このように,熱 平衡系において,揺動項(ノイズ)と散逸項(粘性)の間に成り立つ関係を (第2種)揺動散逸定理(fluctuation – dissipation theorem; FDT) と呼ぶ.

## 第7回講義資料目次

- **1** 講義のスケジュール
- 2 今回の内容
- 3 前回の続き:Ginzburg 基準
  - Ginzburg 基準
  - Ginzburg 基準の一般化
- 4 動的臨界現象
  - 動的臨界現象
  - Langevin 方程式
  - 時間発展する Ginzburg-Landau 方程式
  - Gauss 模型における動的臨界現象
- 5 まとめ
- 6 補遺 1:Langevin 方程式と揺動散逸定理の導出
- 7 補遺 2:保存系(Model B)の運動方程式の導出

### 補遺2:保存系(Model B)の運動方程式の導出

- $\clubsuit$  保存系( $Model\ B$ )における  $\tau_q$  の q 依存性から実空間の運動方程式を導く
  - 保存系 (Model B) における緩和時間は、以下のような q 依存性をもつ:

$$\tau_q^{-1} \sim Mq^2(a + cq^2)$$
 (61)

ここで *M* は輸送係数である。

■ これは Fourier 空間における緩和方程式として,

$$\frac{\partial \tilde{m}(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = -Mq^2 \left( a + \frac{c}{2} q^2 \right) \tilde{m}(\mathbf{q}, t)$$
 (62)

と書ける.

■  $q^2 \leftrightarrow -\nabla^2$ ,  $q^4 \leftrightarrow \nabla^4$  に対応することを用いれば,実空間における運動方程式は

$$\frac{\partial m(\mathbf{r},t)}{\partial t} = M\nabla^2 \left( am(\mathbf{r},t) - \frac{c}{2} \nabla^2 m(\mathbf{r},t) \right) = M\nabla^2 \frac{\delta F}{\delta m(\mathbf{r},t)}$$
(63)

と書ける.

<□ > < □ > < □ > < ē > < ē > Ē 9 < ℃

## 補遺2:保存系(Model B)の運動方程式の導出(2)

■ よって, $au_q \sim q^{-2}(a+cq^2)^{-1}$  という緩和時間の q 依存性は,保存形式の TDGL(Model B)に対応している。また Model B の方程式は Cahn – Hilliard 方程式ともよばれる。

$$\tau_q^{-1} \sim q^2 (a + cq^2) \quad \Rightarrow \quad \text{Model B: } \frac{\partial m}{\partial t} = M \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta m(\mathbf{r}, t)}$$

■ さらに,上式はカレント  $\mathbf{J} := -M\nabla \frac{\delta F}{\delta m(\mathbf{r},t)}$  を定義することで,保存則の形式,

$$\frac{\partial m(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}$$
 (64)

を満たすと解釈できる.