一様せん断流下での二次元O(2)モデルの有限サイズスケーリング

20200825 熱場の量子論

発表者 : 中野 裕義 (京大理)

共同研究者：南 佑樹 (浙江大学), 佐々 真一 (京大理)

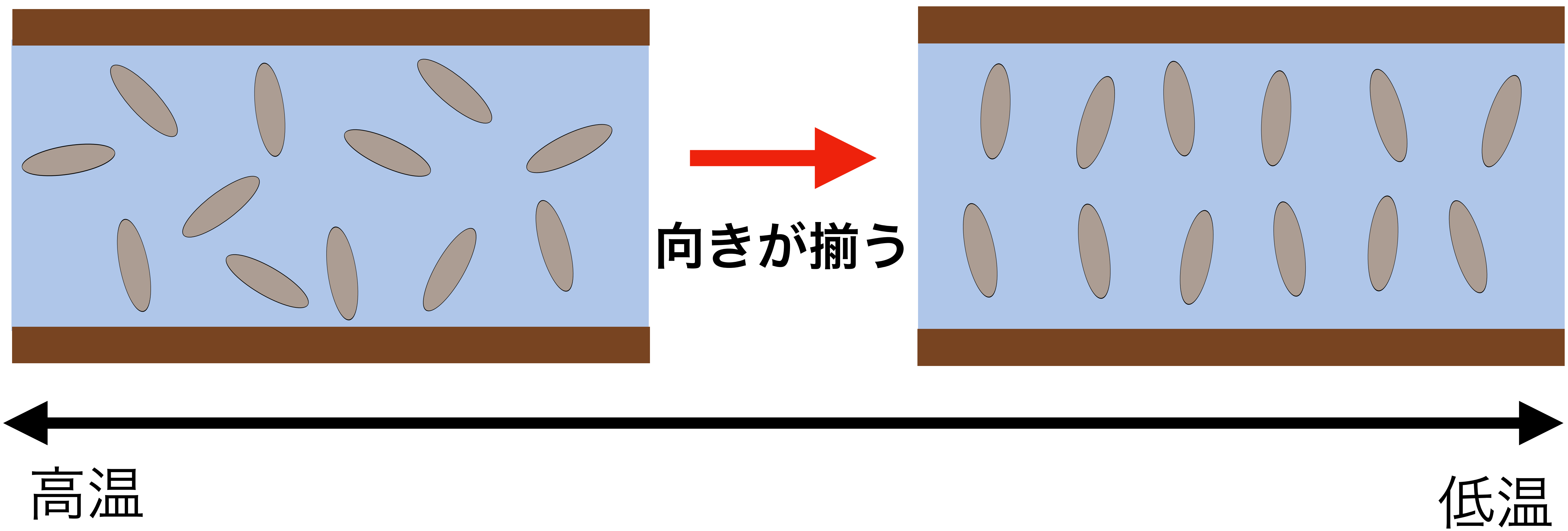
論文：in preparation

問題の説明：一様せん断流下における相転移現象

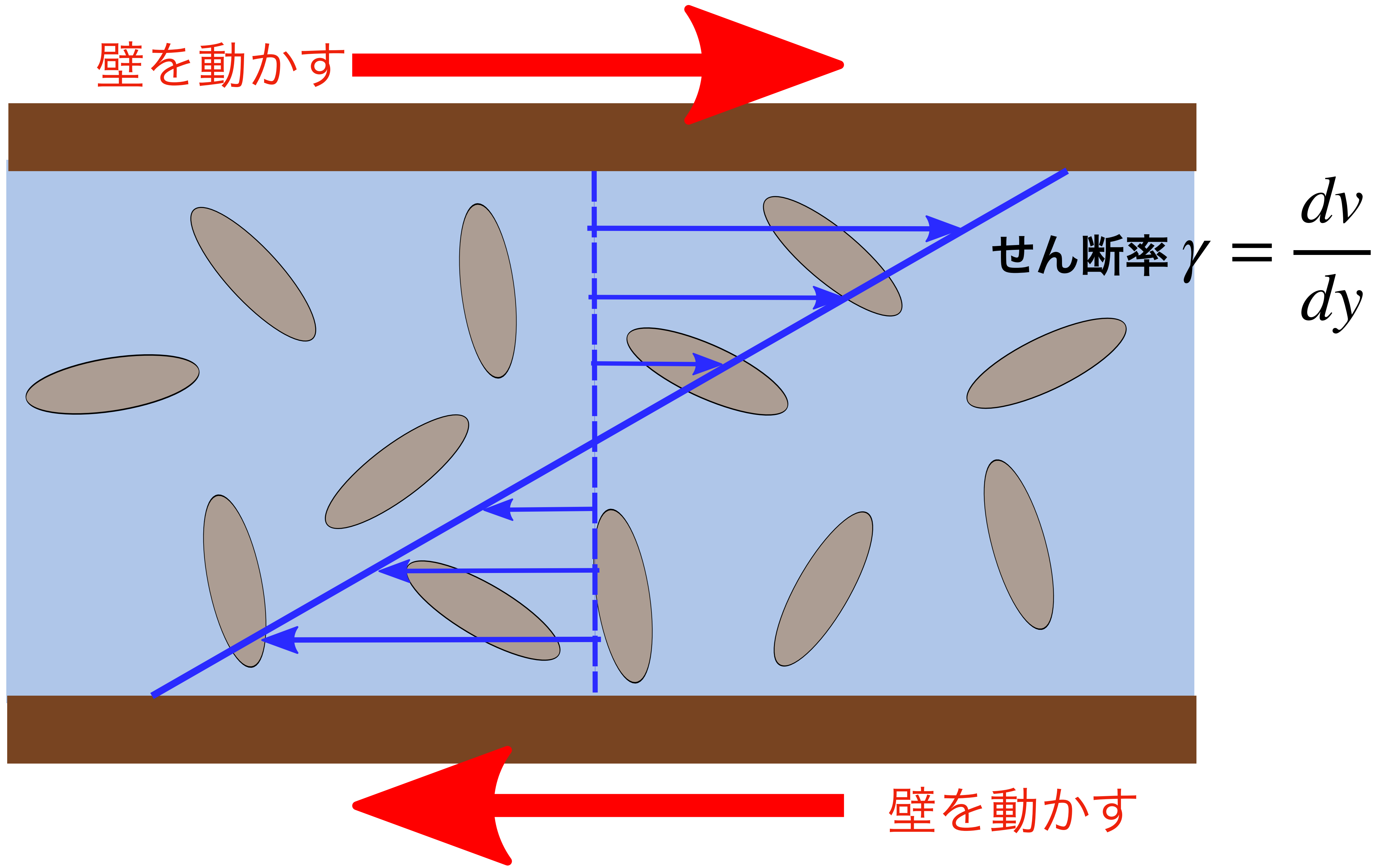
平衡状態の多くの問題では温度をコントロールする

例：棒状分子が流体中に拡散している

棒状分子



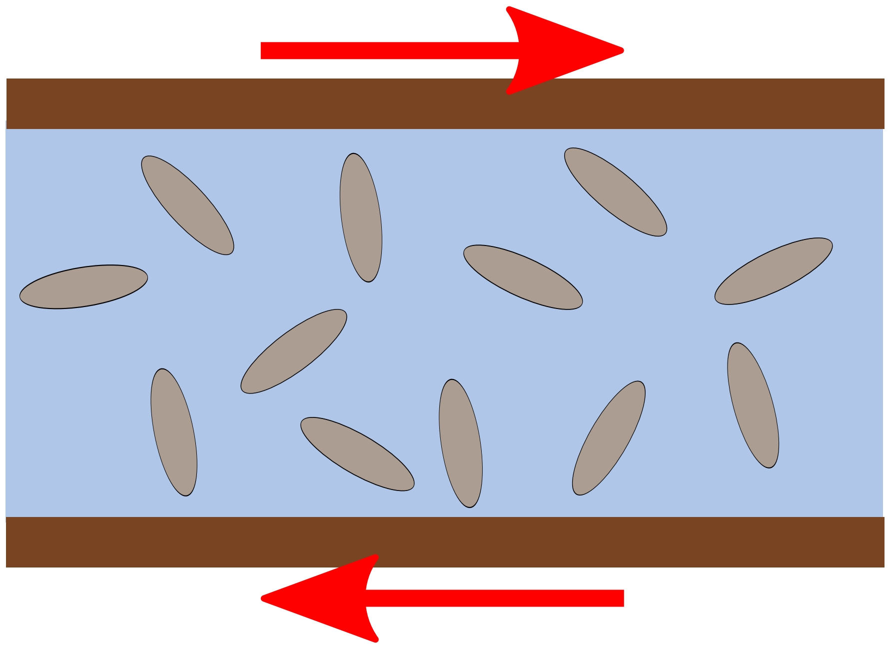
問題の説明：一様せん断流下における相転移現象



温度を一定に保って、流体に流れを加える

一様せん断流下における相転移現象

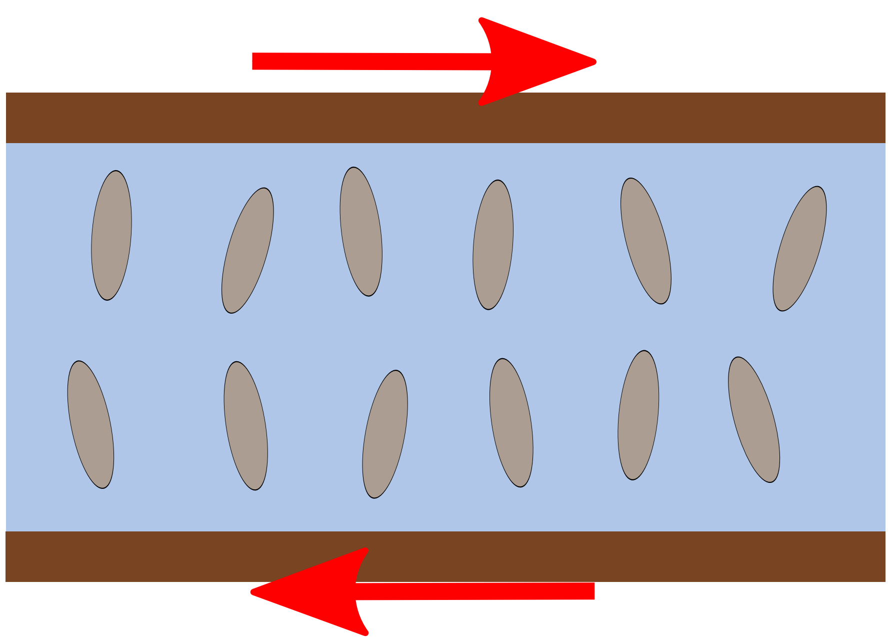
無秩序状態に流れを加える



棒状分子の向きは揃うか？

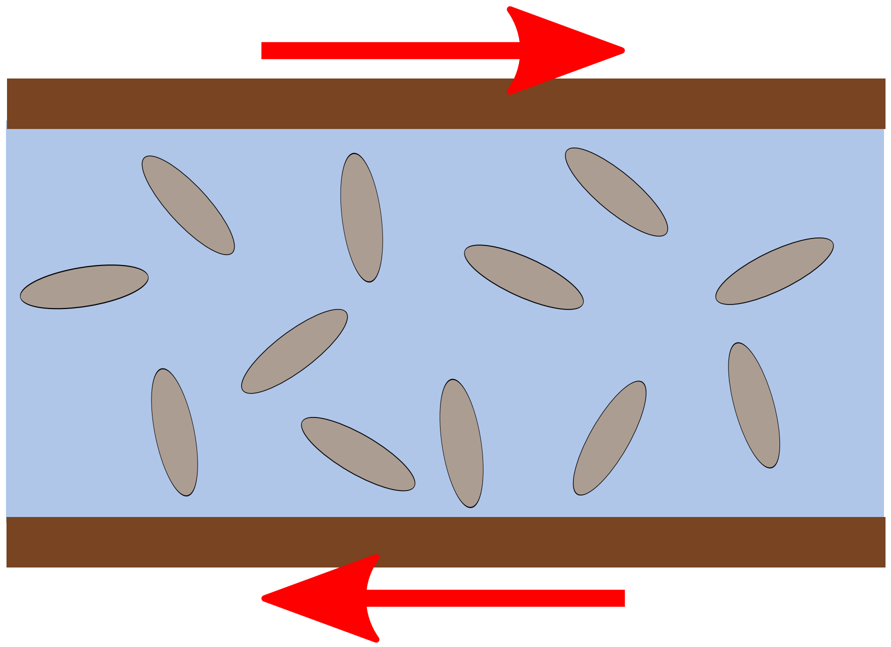
秩序状態に流れを加える

流速は秩序を破壊するか？安定化するか？



一様せん断流下における相転移現象

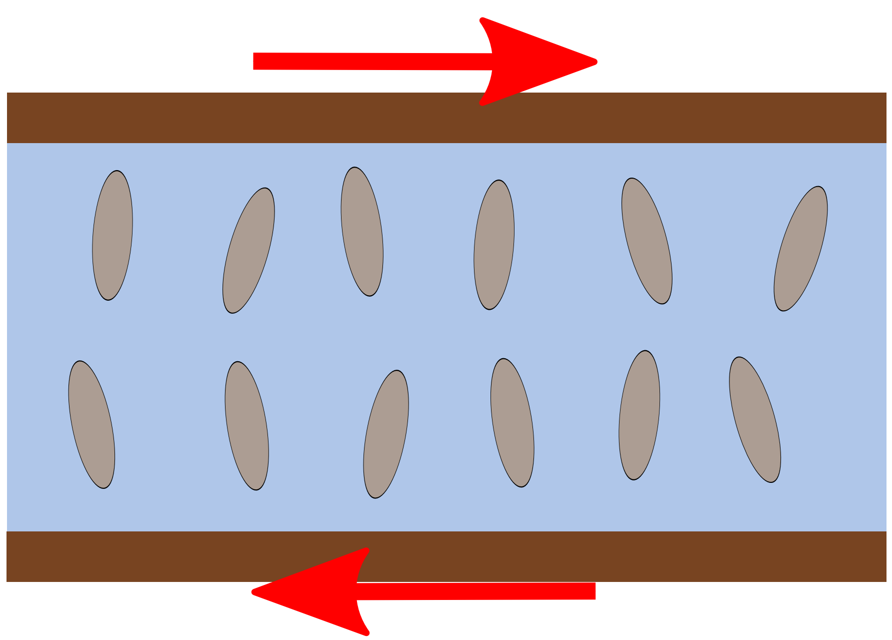
無秩序状態に流れを加える



棒状分子の向きは揃うか？

秩序状態に流れを加える

流速は秩序を破壊するか？安定化するか？



1970年代から調べられてきた

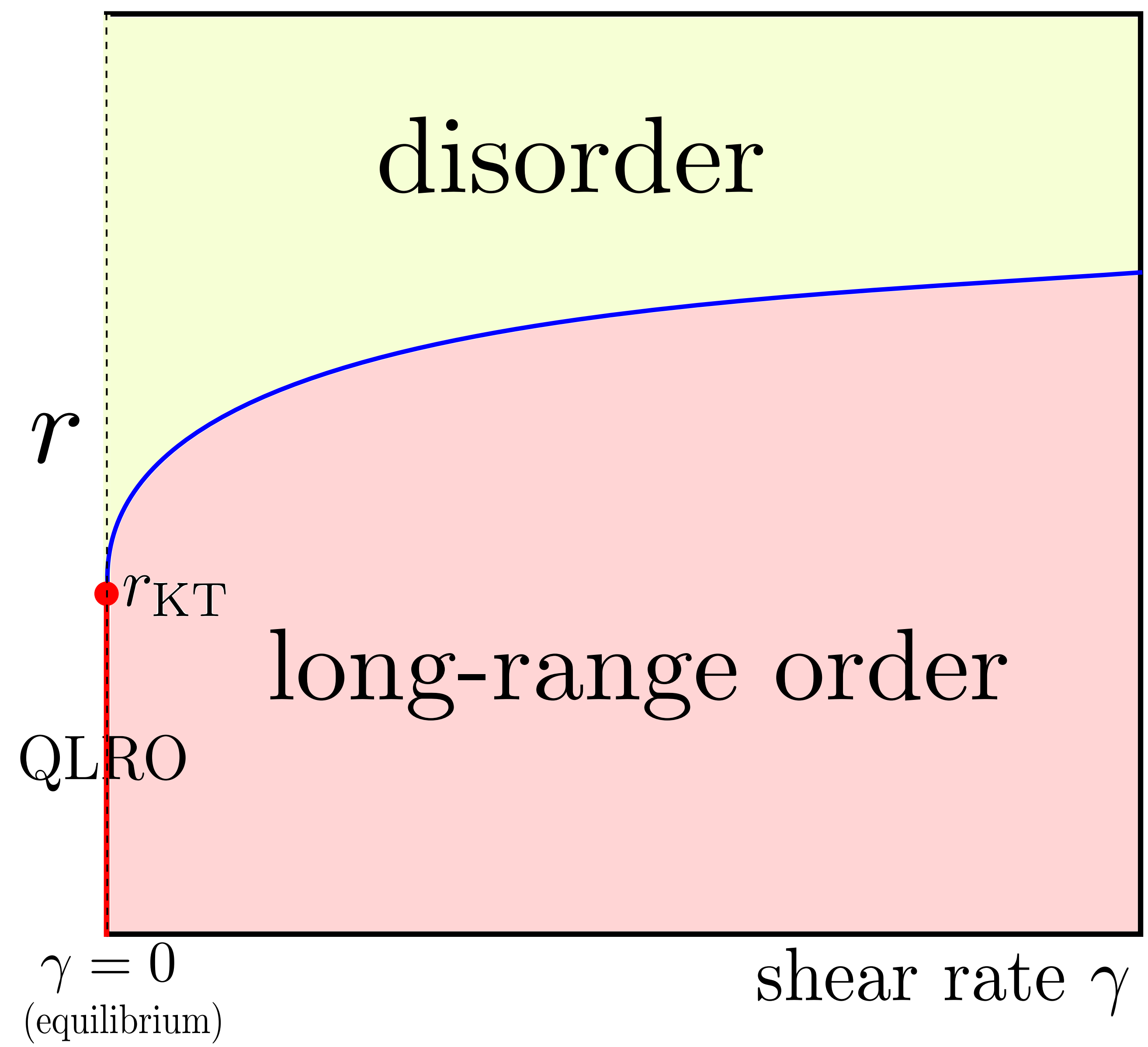
(cf. Onuki and Kawasaki 1979,
臨界流体, Ising model)

本発表では二次元O(2)モデル (XYモデル)に注目し、
流速が著しく秩序を安定化することを数値的に示す

二次元O(2)モデル

Mermin-Wagnerの定理

平衡状態では
有限温度で長距離秩序は不安定
（代わりに、準長距離秩序）



無限小の流速が長距離秩序を安定化させる

モデル

パラメータ：$u = 1$, $\Gamma = 1$, $k_B T = 1$

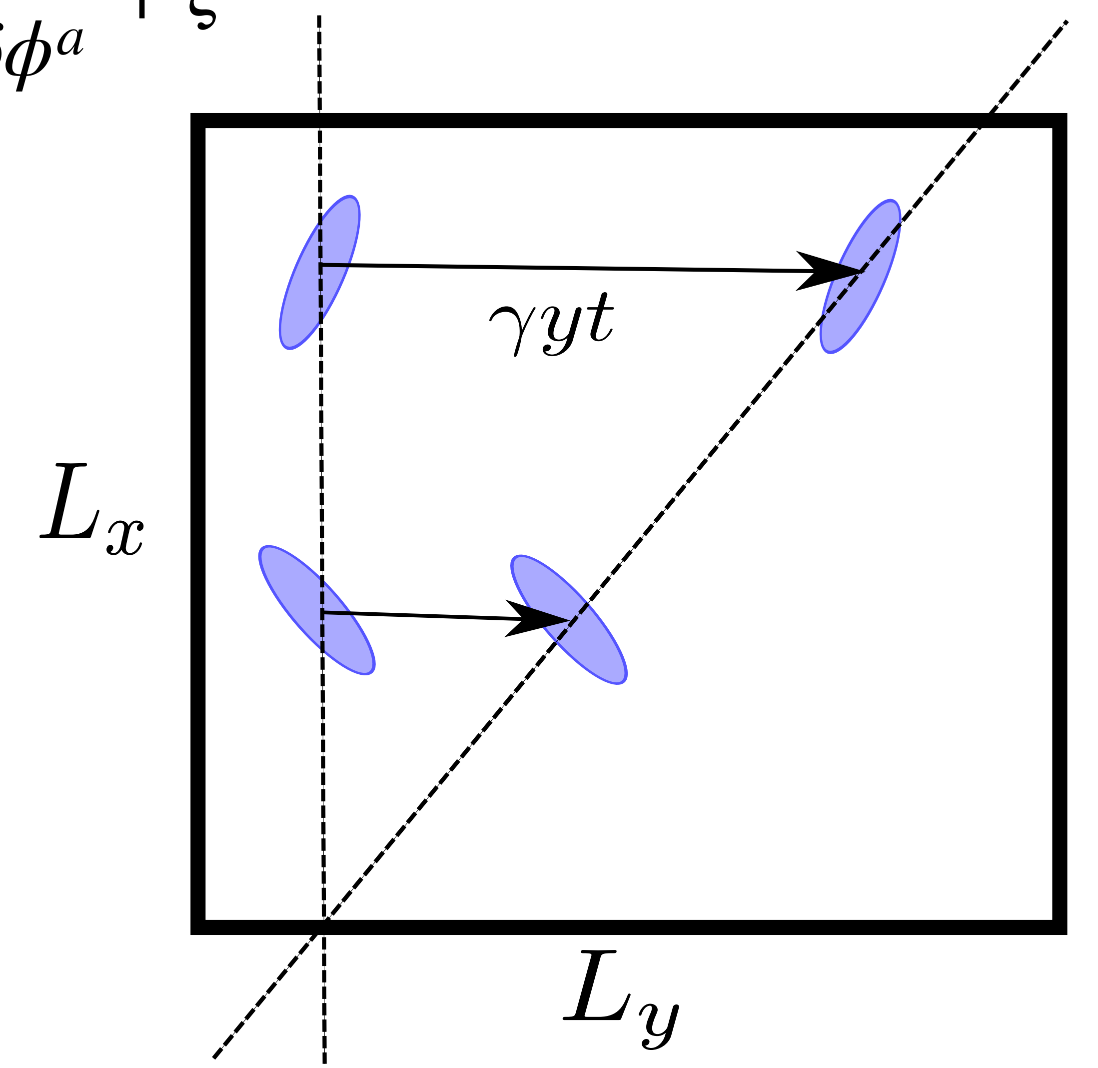
オーダーパラメータ　$\boldsymbol{\phi} = (\phi^1, \phi^2)$

自由エネルギー　$F = \int d^2\boldsymbol{r}\left[\frac{1}{2}(\nabla\phi^a)^2 + \frac{r}{2}(\phi^a)^2 + \frac{u}{4}\left((\phi^a)^2\right)^2\right]$　(標準的なϕ^4モデル)

$$\langle \xi^a(\boldsymbol{r}, t)\xi^b(\boldsymbol{r}', t)\rangle = 2k_B T\Gamma\delta^{ab}\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')\delta(t - t')$$

ダイナミクス　$$\frac{\partial\phi^a}{\partial t} + \underline{(\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\phi^a} = -\Gamma\frac{\delta F}{\delta\phi^a} + \xi^a$$

速度$\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x})$で$\boldsymbol{\phi}$が流される



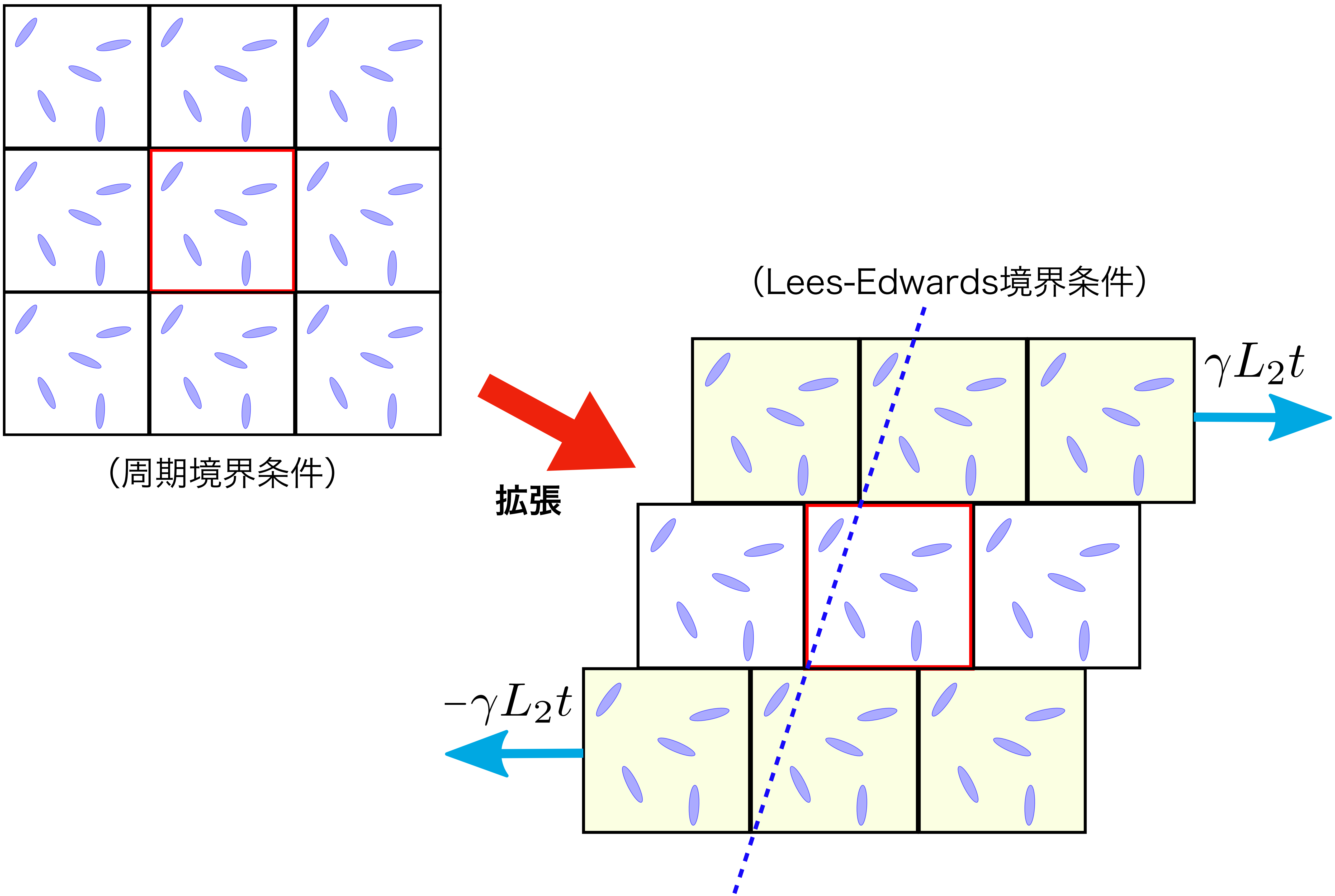
$\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{0}$ (平衡状態) ⟶ model A

(cf. Halperin and Hohenberg)

一様せん断流 ⟶ $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}) = (\gamma y, 0)$

Lees-Edwards境界条件

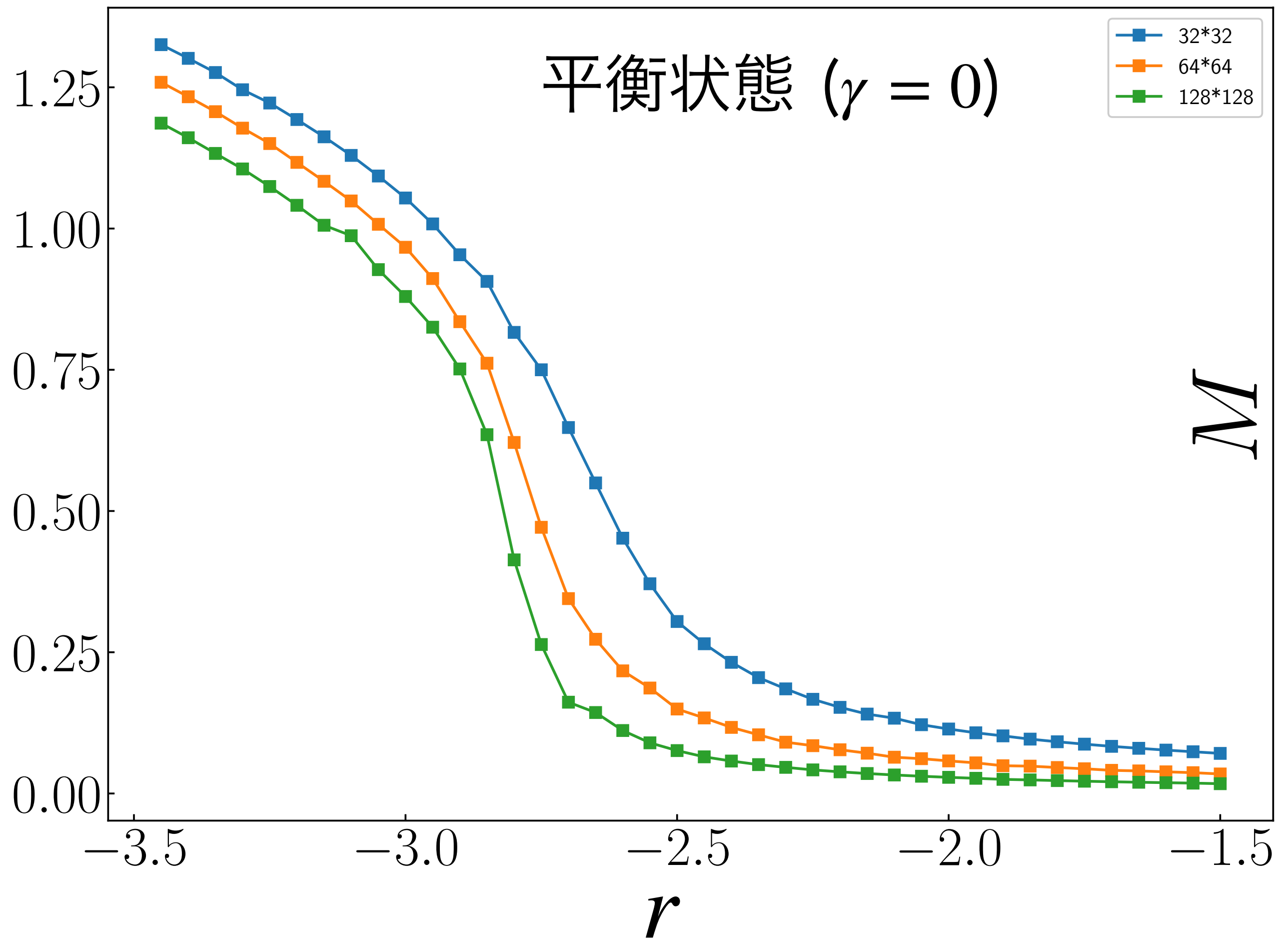
$$\phi^a(x, y, t) = \phi^a(x + \gamma L_y t, y + L_y, t)$$



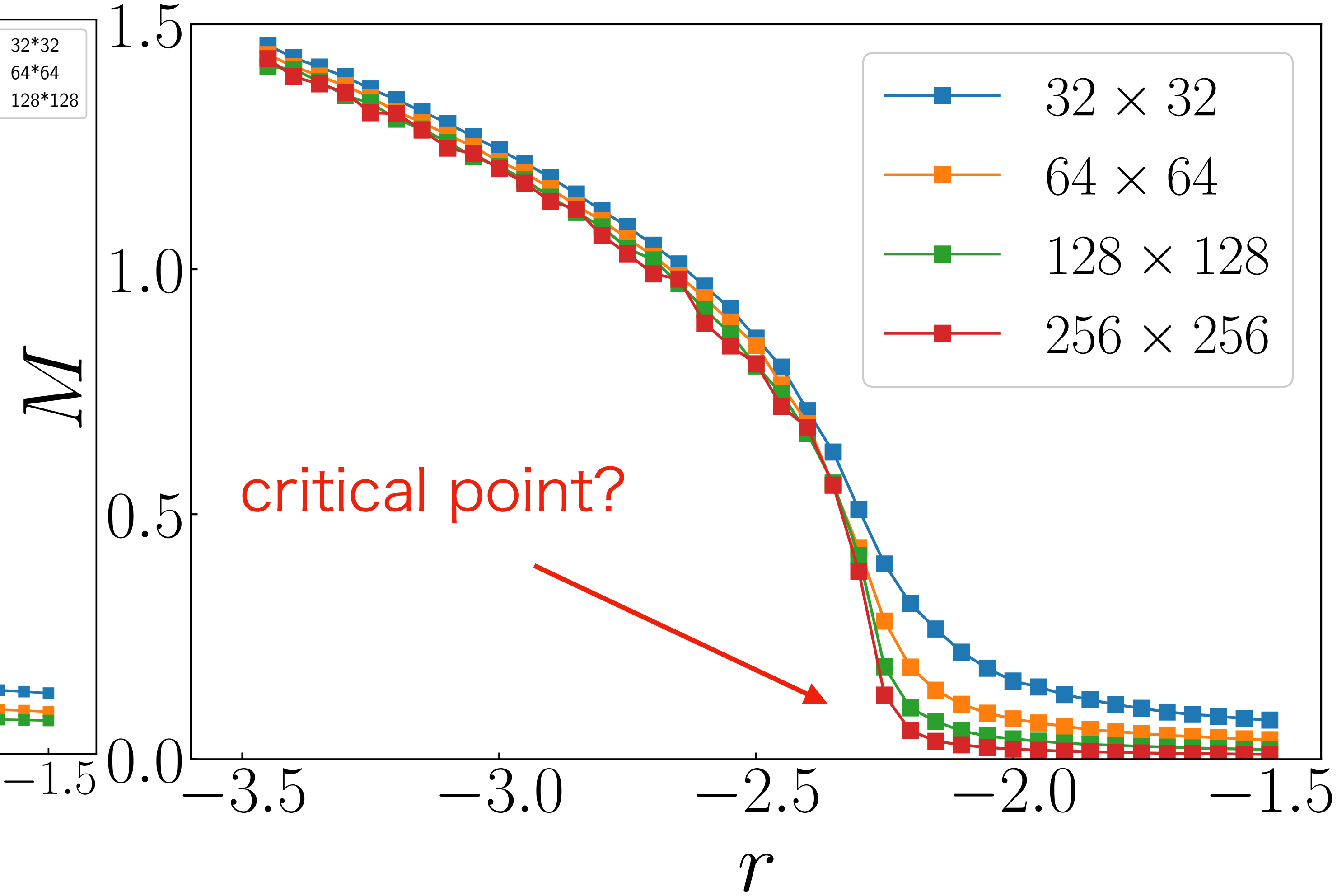
磁化の観測

$$\langle \hat{m} \rangle = \frac{1}{L_x L_y} \left\langle \left| \int d^2\boldsymbol{x} \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}) \right| \right\rangle$$

パラメータ：$u = 1$, $\Gamma = 1$, $k_B T = 1$



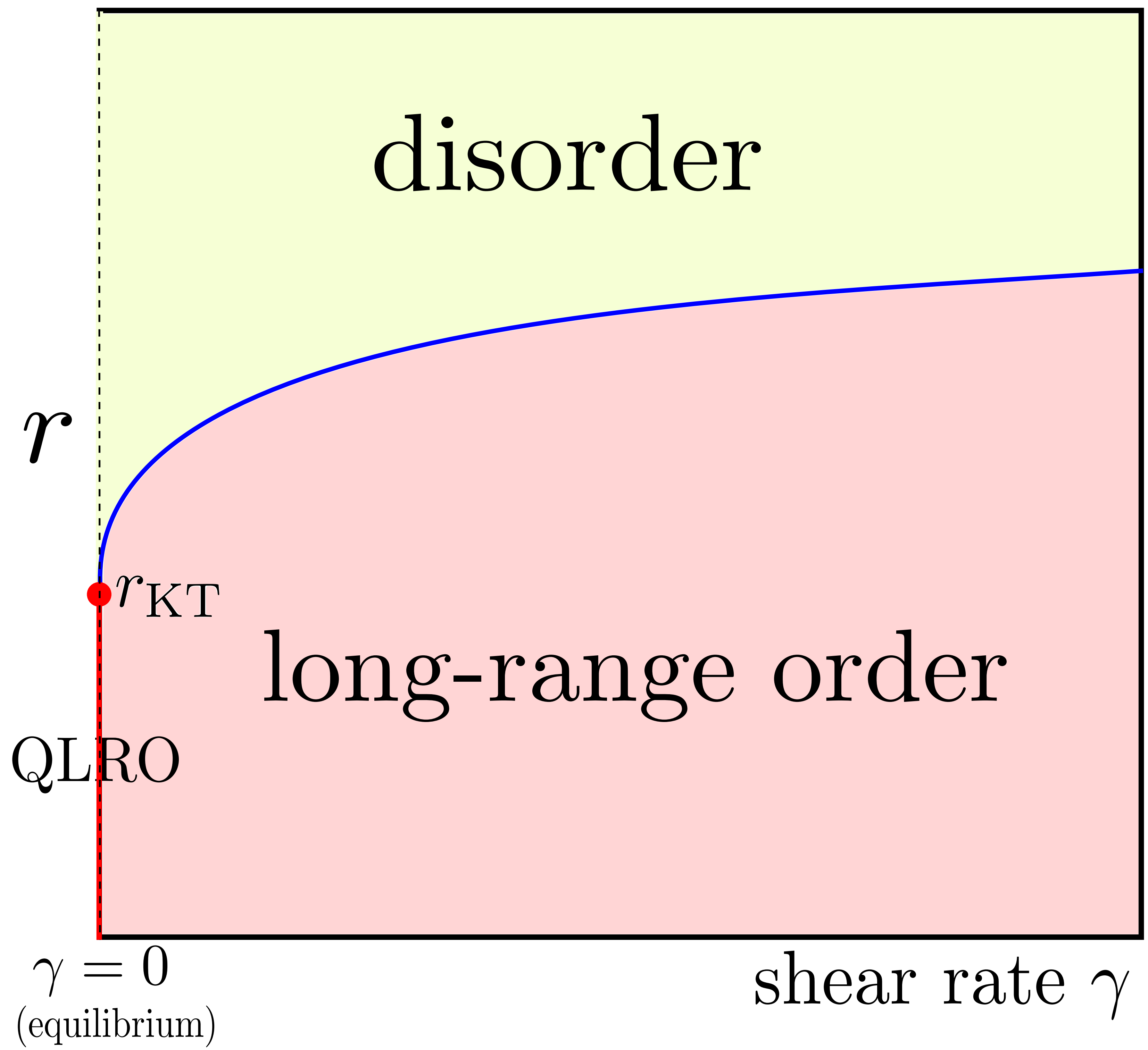
一様せん断流下 ($\gamma = 1$)



1. 有限サイズスケーリングを行い、長距離秩序が安定化することを実証する
2. (γ, r)空間での相図を完成させて、臨界指数を計算する

結果1(概要)：相図

平衡状態の準長距離秩序は微小な流れに対して不安定



結果2 (概要)：臨界指数 $\nu_x = 0.68,\ \nu_y = 2.00,\ \beta = 0.50$

相関長に関する臨界指数 (ν_x, ν_y)：$\xi_x \sim |t|^{-\nu_x}$, $\xi_y \sim |t|^{-\nu_y}$

磁化に関する臨界指数 (β, γ)：$\langle \hat{m} \rangle \simeq |t|^{\beta}, \chi \simeq |t|^{-\gamma}$

独立な臨界指数は３つ ➡ ハイパースケーリングが存在 $(2\beta + \gamma = \nu_x + \nu_y)$

ノート1：$\dfrac{\partial \phi^a}{\partial t} + (\boldsymbol{v} \cdot \nabla)\phi^a = -\Gamma(-\Delta + r + u|\boldsymbol{\phi}|^2)\phi^a + \xi^a$

線形化されたモデルは$r \to +0$で相関長が発散する → $\nu_x^0 = \dfrac{2}{3},\ \nu_y^0 = 2$

ノート2：$F = \displaystyle\int d^2\boldsymbol{r}\left[\frac{1}{2}(\nabla\phi^a)^2 + \frac{r}{2}(\phi^a)^2 + \frac{u}{4}\left((\phi^a)^2\right)^2\right]$

平均場理論($\dfrac{\delta F}{\delta \phi^a} = 0$)による磁化の立ち上がり方 → $\beta^0 = \dfrac{1}{2}$

臨界指数は非線形ゆらぎの影響を受けない (c.f. Onuki and Kawasaki 1979)

有限サイズスケーリング (D. Winter, P. Virnau, J. Horbach, and K. Binder, 2010)

- $f(t, h, L_x^{-1}, L_y^{-1})$：システムサイズ$(L_x, L_y)$に対する自由エネルギー密度

$$t = \frac{r - r_c}{r_c}$$

h：外場

$$\langle \hat{m} \rangle = \frac{1}{L_x L_y} \int d^2\boldsymbol{x} \langle |\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x})| \rangle = - \left. \frac{\partial f}{\partial h} \right|_{h=0}$$

$$\chi = \frac{1}{L_x L_y} \int d^2\boldsymbol{x} \langle |\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x})|^2 \rangle - \frac{1}{L_x L_y} \int d^2\boldsymbol{x} \langle |\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x})| \rangle^2 = - \left. \frac{\partial^2 f}{\partial^2 h} \right|_{h=0}$$

- 仮定1：自由エネルギー密度に対する非等方スケーリング関係式

任意の$b > 0$に対して　$f(t, h, L_x^{-1}, L_y^{-1}; \gamma) = f(b^{z_t} t, b^{z_h} h, b^{z_{Lx}} L_x^{-1}, b L_y^{-1}; \gamma)$

一様せん断流から生じる非等方性：$z_{Lx} \neq 1$

- 仮定2：任意の物理量$\langle \hat{A} \rangle^{h=0}$の相関長を使った表現

x軸方向：流れに平行

y軸方向：流れに垂直

$$\langle \hat{A} \rangle_{h=0} = L_x^{w_A} \mathscr{A}\left(\frac{L_x}{\xi_x}, \frac{L_y}{\xi_y}; \gamma \right) \text{ or } L_y^{w_A} \mathscr{A}\left(\frac{L_x}{\xi_x}, \frac{L_y}{\xi_y}; \gamma \right)$$

- 仮定1：自由エネルギー密度に対する非等方スケーリング関係式

$$\text{任意の}b>0\text{に対して} \quad f(t,h,L_x^{-1},L_y^{-1};\gamma)=f(b^{z_t}t,b^{z_h}h,b^{z_{Lx}}L_x^{-1},bL_y^{-1};\gamma)$$

一様せん断流から生じる非等方性：$z_{Lx}\neq 1$

- 仮定2：任意の物理量$\langle\hat{A}\rangle^{h=0}$の相関長を使った表現

x軸方向：流れに平行

y軸方向：流れに垂直

$$\langle\hat{A}\rangle_{h=0}=L_x^{w_A}\mathscr{A}\left(\frac{L_x}{\xi_x},\frac{L_y}{\xi_y};\gamma\right)\ \text{or}\ L_y^{w_A}\mathscr{A}\left(\frac{L_x}{\xi_x},\frac{L_y}{\xi_y};\gamma\right)$$

Binder parameter 定義：$U=\dfrac{\langle\hat{m}^4\rangle_{h=0}}{\langle\hat{m}^2\rangle_{h=0}^2}$ （$\langle\hat{m}^k\rangle$: 磁化のk次モーメント）

$$U=\tilde{U}(L_y^{z_t}t,L_y^{z_{Lx}}L_x^{-1})$$

Binder parameterは $L_y^{z_{Lx}}L_x^{-1}$ を一定に保つと、臨界点($t=0$)で定数

(参考：等方系では$z_{Lx}=1 \longrightarrow$ $L_x=L_y$を一定に保ちながらL_xを大きくするときに一定)

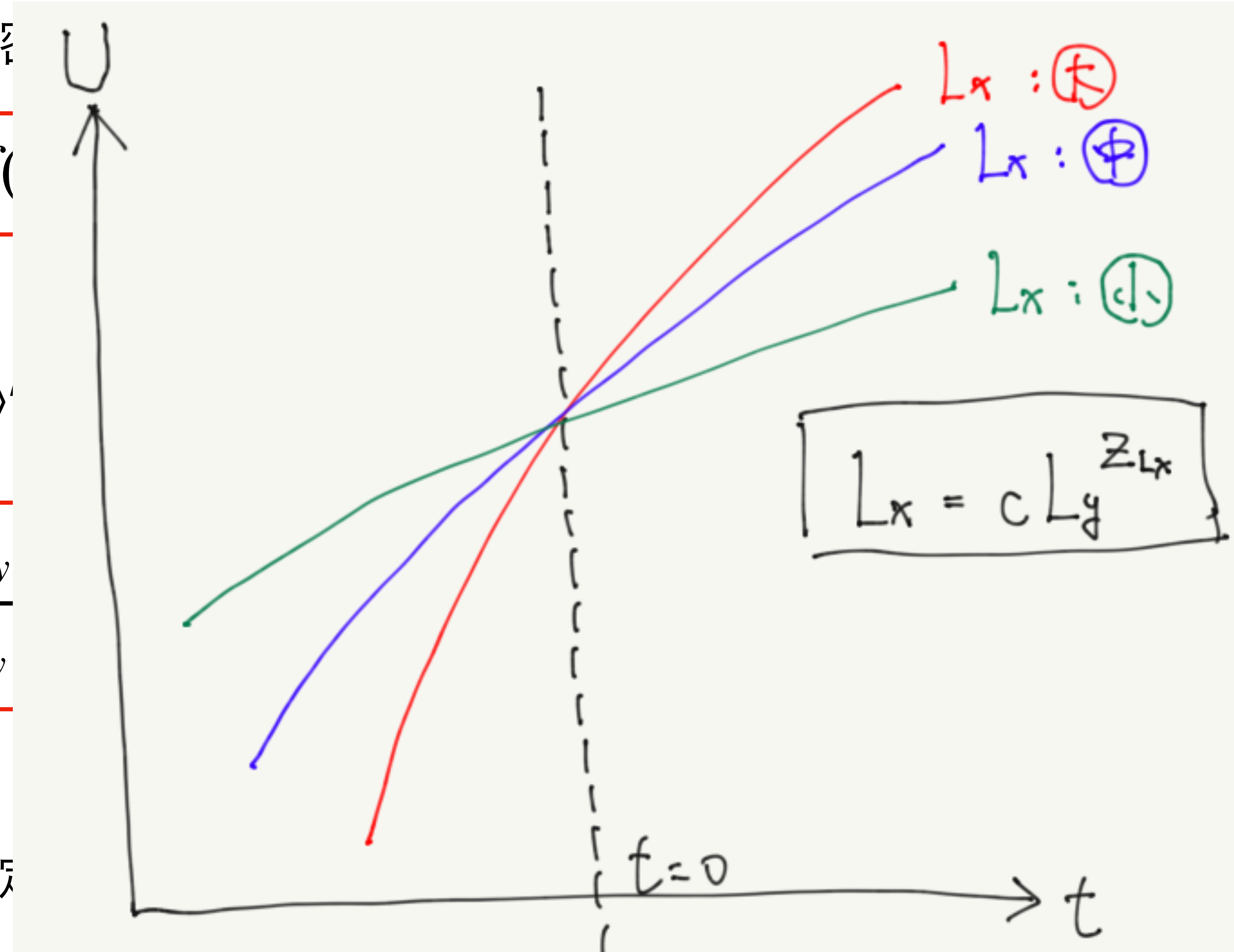
▸ 仮定1：自由エネルギー密

任意の$b>0$に対して　$f($

1

▸ 仮定2：任意の物理量$\langle \hat{A} \rangle$

$$\langle \hat{A} \rangle_{h=0} = L_x^{w_A} \mathscr{A}\left(\frac{L_x}{\xi_x}, \frac{L_y}{\xi_y}\right.$$



Binder parameter

$$\boxed{U = \tilde{U}(L_y^{z_t} t, L_y^{z_{Lx}} L_x^{-1})}$$

Binder parameterは $L_y^{z_{Lx}} L_x^{-1}$ を一定に保つと、臨界点$(t=0)$で定数

(参考：等方系では$z_{Lx}=1$ ⟶ $L_x = L_y$を一定に保ちながらL_xを大きくするときに一定)

- 仮定1：自由エネルギー密

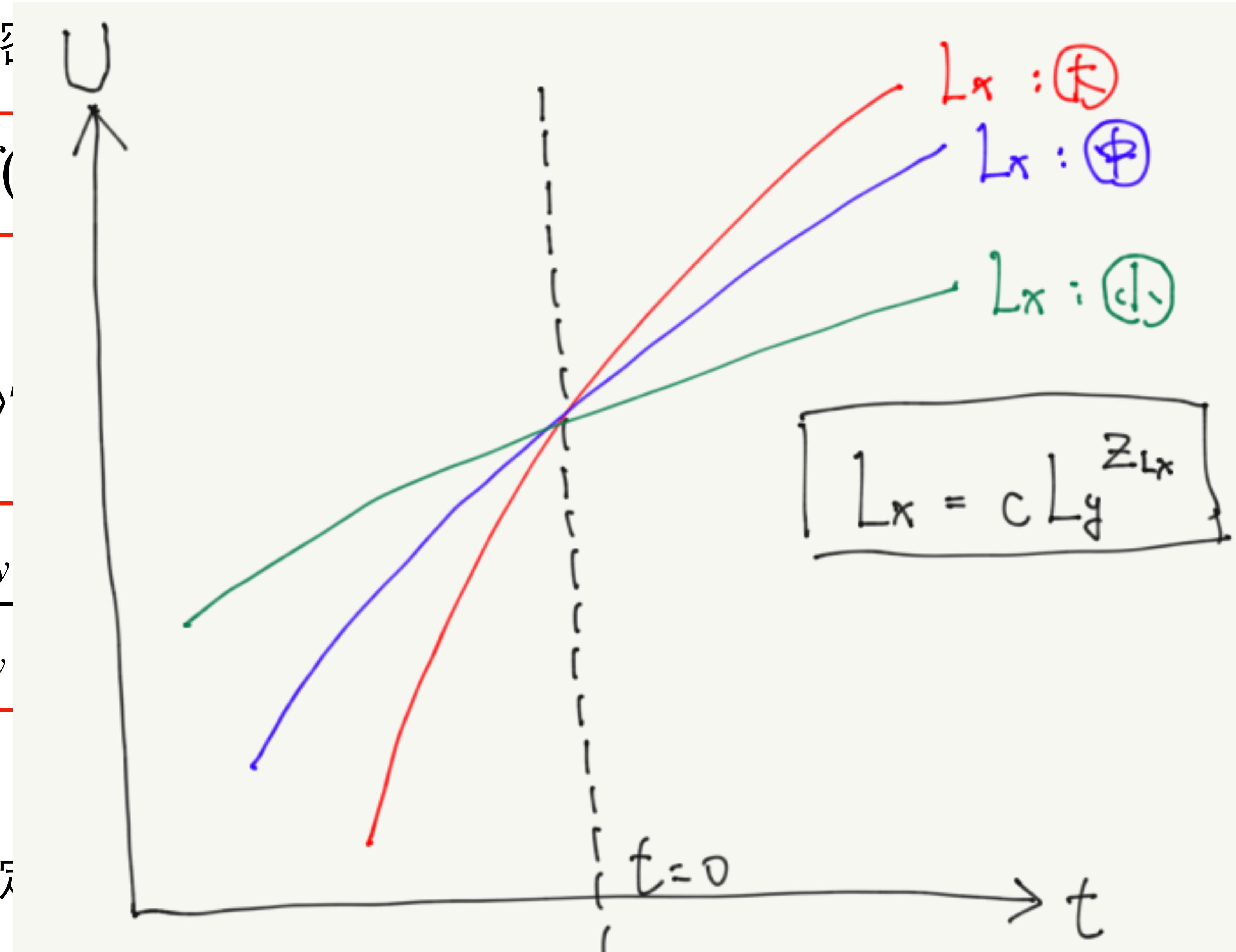
任意の$b>0$に対して　$f($　　　　$)$

1

- 仮定2：任意の物理量$\langle \hat{A} \rangle$

$$\langle \hat{A} \rangle_{h=0} = L_x^{w_A} \mathscr{A}\left(\frac{L_x}{\xi_x}, \frac{L_y}{\xi_y} \right.$$

Binder parameter　定



$$U = \tilde{U}(L_y^{z_t} t, L_y^{z_{Lx}} L_x^{-1})$$

臨界点での相関長の発散

$$\xi_x \sim t^{-z_{Lx}/z_t} \;,\; \xi_y \sim t^{-1/z_t}$$

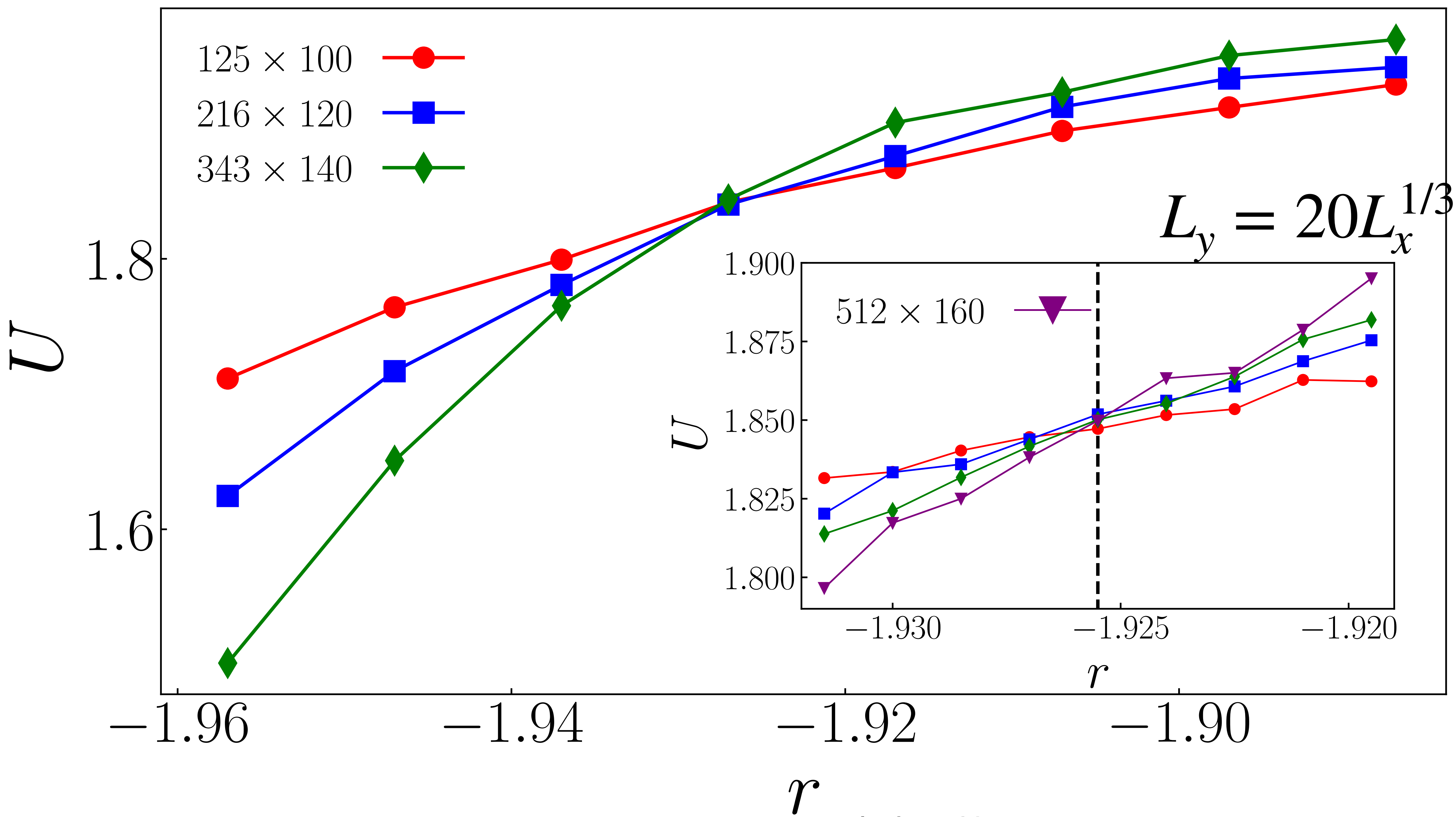
$$S(\boldsymbol{k}) \sim \frac{1}{t^\gamma + c_1 k_x^{\gamma/\nu_x} + c_2 k_y^{\gamma/\nu_y}}$$

構造因子から計算される

Binder parameter

パラメータ：$u = 1$, $\Gamma = 1$, $k_B T = 1$

せん断率：$\gamma = 5$



→ Binder parameterは$r = -1.9255$で交点を持つ

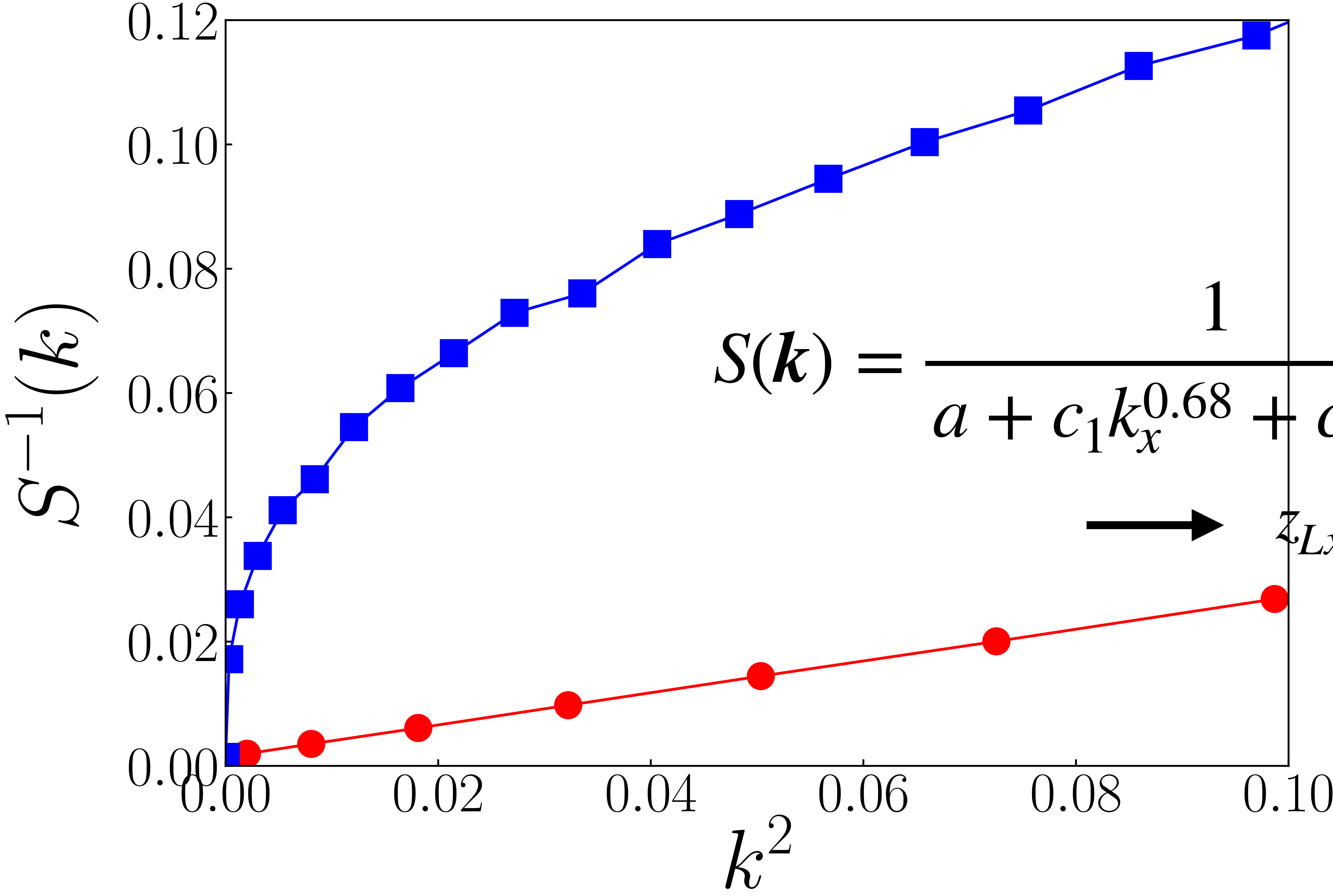
$\gamma = 5$に対して、転移点は$r_c \simeq -1.9255$と見積もられる

$z_{Lx} = 3$はz_{Lx}の良い近似値になっていると予想される

構造因子$(r=-1.922)$

青：$S^{-1}(k_x,k_y=0)$をk_x^2の関数としてプロット

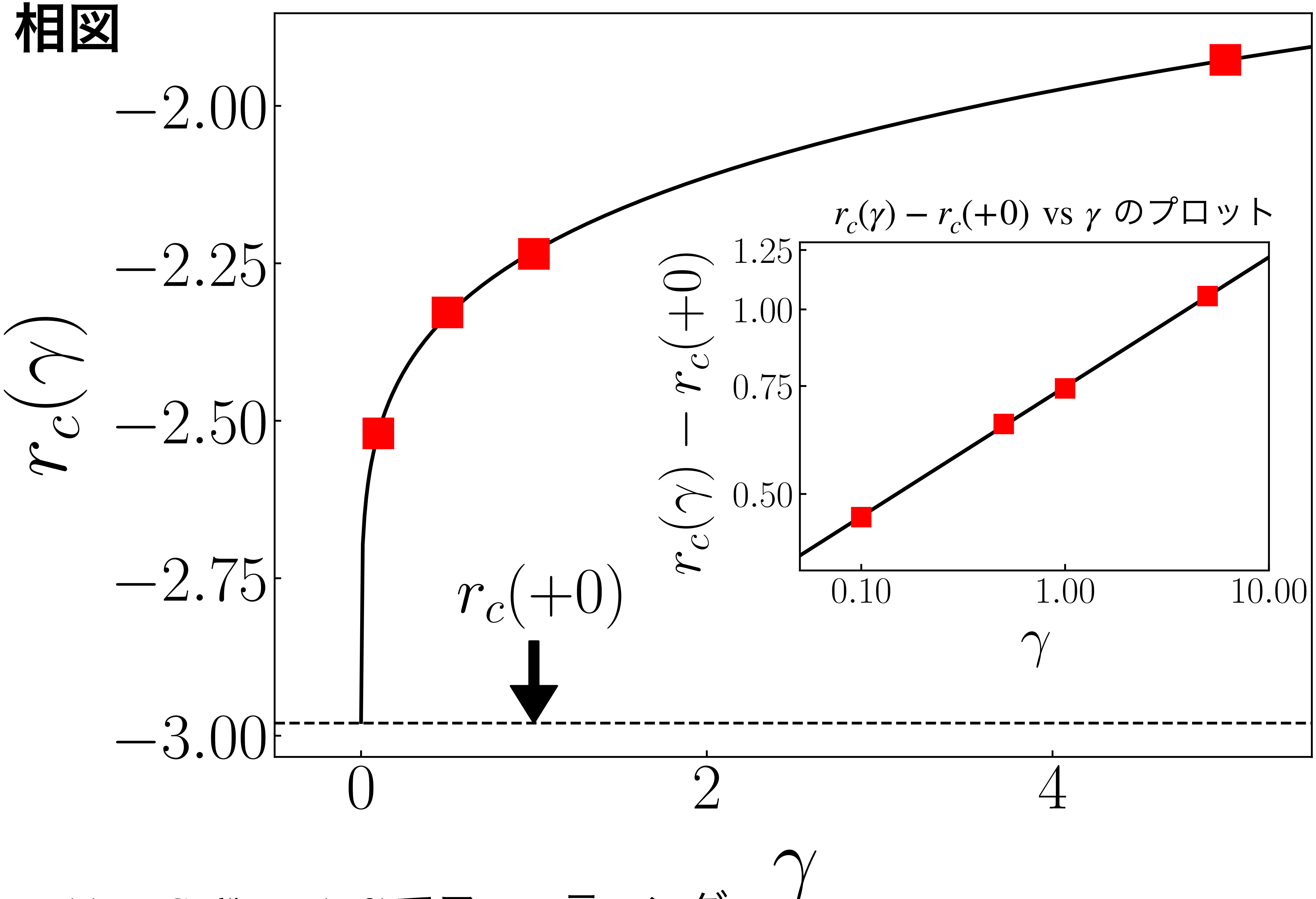
赤：$S^{-1}(k_x=0,k_y)$をk_y^2の関数としてプロット



$$S(\boldsymbol{k})=\frac{1}{a+c_1k_x^{0.68}+c_2k_y^{2.00}}$$

$\longrightarrow\ z_{Lx}=2.94$

相図

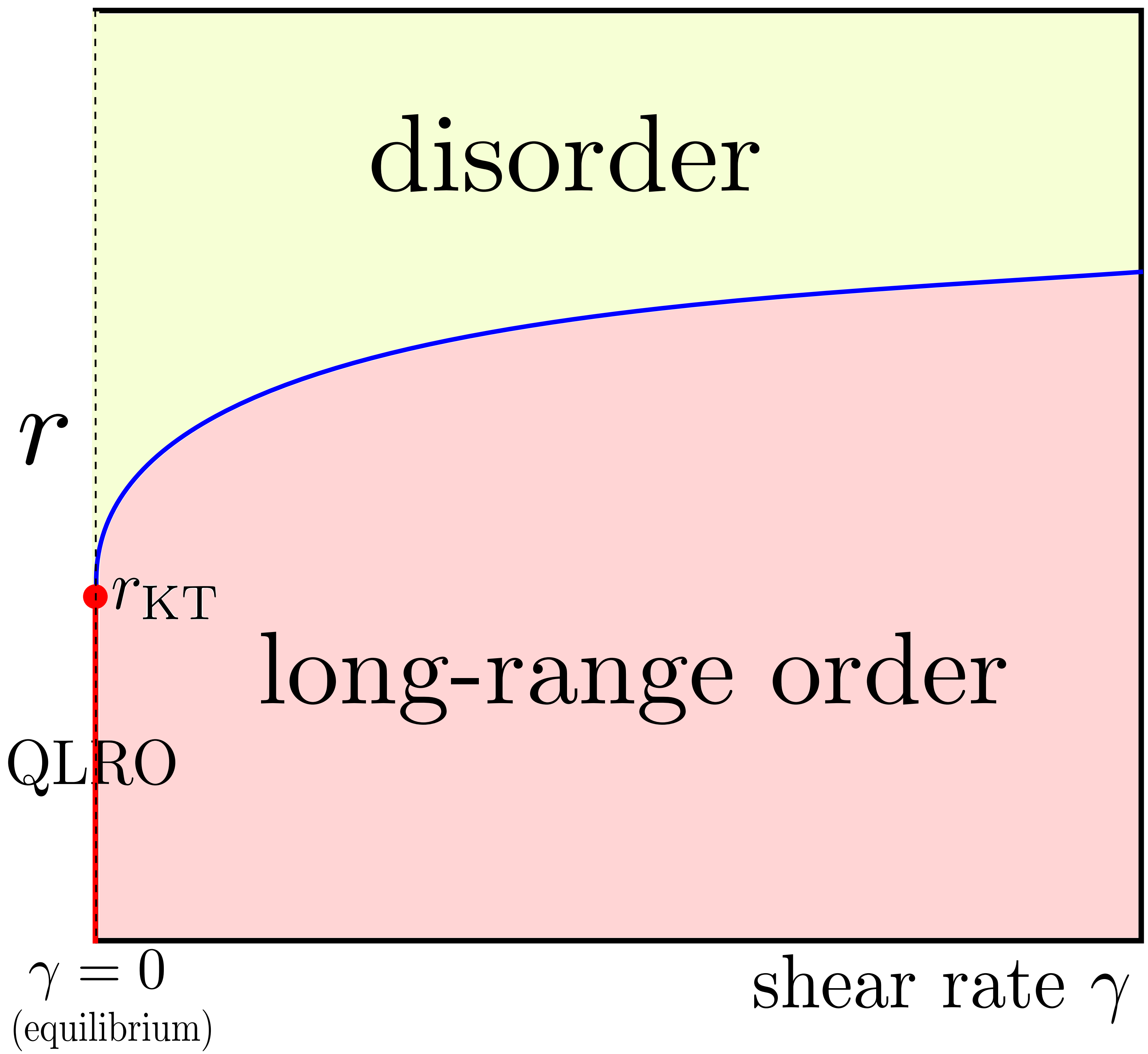


黒：$r_c(\gamma) = C_0\gamma^w + r_c(+0)$でフィッティング

$r_c(+0) = -2.98$, $w = 0.21$ (平衡状態のKT転移点は$r_{KT} = -3.09$)

結果1(概要)：相図

平衡状態の準長距離秩序は微小な流れに対して不安定



おまけ：線形化モデルのNambu-Goldstoneモード

ダイナミクス $$\frac{\partial \phi^a}{\partial t} + \gamma y \frac{\partial \phi^a}{\partial x} = -\Gamma\left(-\Delta\phi^a + \underline{r\phi^a + u|\boldsymbol{\phi}|^2\phi^a}\right) + \xi^a$$

<u>(線形化) NGモードを使った議論</u>

NGモードはオーダー相で最も特異的な揺らぎ

$$\frac{\partial \phi^a}{\partial t} + \gamma y \frac{\partial \phi^a}{\partial x} = \Gamma\Delta\phi^a + \xi^a \quad \longleftrightarrow \quad \frac{\partial \tilde{\phi}^a}{\partial t} - \gamma k_x \frac{\partial \tilde{\phi}^a}{\partial k_y} = -\Gamma|\boldsymbol{k}|^2\tilde{\phi}^a + \xi^a$$

(実空間) (波数空間)

平衡状態 ($\gamma = 0$) $$\langle \tilde{\phi}^a(\boldsymbol{k})\tilde{\phi}^a(-\boldsymbol{k})\rangle = \frac{T}{|\boldsymbol{k}|^2}$$

$$\langle \phi^a(\mathbf{0})\phi^a(\boldsymbol{r})\rangle = \int d^2\boldsymbol{k}\frac{T}{|\boldsymbol{k}|^2}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = \underbrace{\int_{1/L}^{1/\Lambda} d^2\boldsymbol{k}\frac{T}{|\boldsymbol{k}|^2}}_{\sim \log L} + \int_{1/\Lambda}^{\infty} d^2\boldsymbol{k}\frac{T}{|\boldsymbol{k}|^2}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

$\sim \log L$ (赤外発散)

平衡状態ではNGモードがオーダー相を不安定化する

おまけ：線形化モデルのNambu-Goldstoneモード

ダイナミクス $$\frac{\partial \phi^a}{\partial t} + \gamma y \frac{\partial \phi^a}{\partial x} = -\Gamma\left(-\Delta\phi^a + \underline{r\phi^a + u|\boldsymbol{\phi}|^2\phi^a} \right) + \xi^a$$

(線形化) NGモードを使った議論

NGモードはオーダー相で最も特異的な揺らぎ

$$\frac{\partial \phi^a}{\partial t} + \gamma y \frac{\partial \phi^a}{\partial x} = \Gamma\Delta\phi^a + \xi^a \quad \longleftrightarrow \quad \frac{\partial \tilde{\phi}^a}{\partial t} - \gamma k_x \frac{\partial \tilde{\phi}^a}{\partial k_y} = -\Gamma|\boldsymbol{k}|^2\tilde{\phi}^a + \xi^a$$

(実空間)　　　　(波数空間)

平衡状態 ($\gamma = 0$) $$\langle \tilde{\phi}^a(\boldsymbol{k})\tilde{\phi}^a(-\boldsymbol{k})\rangle = \frac{T}{|\boldsymbol{k}|^2}$$

2より少しでも小さければ赤外発散は抑えられる

$$\langle \phi^a(\mathbf{0})\phi^a(\boldsymbol{r})\rangle = \int d^2\boldsymbol{k}\frac{T}{|\boldsymbol{k}|^2}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = \underbrace{\int_{1/L}^{1/\Lambda} d^2\boldsymbol{k}\frac{T}{|\boldsymbol{k}|^2}}_{\sim \log L} + \int_{1/\Lambda}^{\infty} d^2\boldsymbol{k}\frac{T}{|\boldsymbol{k}|^2}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

$\sim \log L$ (赤外発散)

平衡状態ではNGモードがオーダー相を不安定化する

おまけ：線形化モデルのNambu-Goldstoneモード

ダイナミクス $$\frac{\partial \phi^a}{\partial t} + \gamma y \frac{\partial \phi^a}{\partial x} = -\Gamma\left(-\Delta\phi^a + \underline{r\phi^a + u|\boldsymbol{\phi}|^2\phi^a}\right) + \xi^a$$

(線形化) NGモードを使った議論

NGモードはオーダー相で最も特異的な揺らぎ

$$\frac{\partial \phi^a}{\partial t} + \gamma y \frac{\partial \phi^a}{\partial x} = \Gamma\Delta\phi^a + \xi^a \quad \longleftrightarrow \quad \frac{\partial \tilde{\phi}^a}{\partial t} - \gamma k_x \frac{\partial \tilde{\phi}^a}{\partial k_y} = -\Gamma|\boldsymbol{k}|^2\tilde{\phi}^a + \xi^a$$

(実空間) (波数空間)

一様せん断流下 $$\langle \tilde{\phi}^a(\boldsymbol{k})\tilde{\phi}^a(-\boldsymbol{k})\rangle = \frac{\Gamma T}{-\gamma k_x \frac{\partial}{\partial k_y} + \Gamma|\boldsymbol{k}|^2} = \Gamma T \int_0^\infty ds e^{-s\left(-\gamma k_x \frac{\partial}{\partial k_y} + \Gamma|\boldsymbol{k}|^2\right)}$$

$$= \Gamma T \int_0^\infty ds e^{-\left(s\Gamma|\boldsymbol{k}|^2 + \frac{1}{2}\gamma s^2 k_x k_y + \frac{1}{12}\gamma^2 s^3 k_x^2\right)}$$

新しく付け加わった項によって
赤外発散が抑えられる

$$\sim \frac{T}{c_0(\gamma k_x)^{\frac{2}{3}} + |\boldsymbol{k}|^2}$$

補足：数値計算の方法　(S. Toh, K. Ohkitani, and M. Yamada, 1991)

ダイナミクス　$$\frac{\partial \phi^a}{\partial t} + \gamma y \frac{\partial \phi^a}{\partial x} = -\Gamma\left(-\Delta \phi^a + r\phi^a + u|\boldsymbol{\phi}|^2 \phi^a\right) + \xi^a$$

$\boxed{\text{数値的に不安定}}$　$y = L_y \longrightarrow \gamma L_y \frac{\partial \phi^a}{\partial x} \propto L_y$

解決法：変形座標系(x', y', t')の上を導入する

$$x' = x - \gamma t y \ ,\ y' = y \ ,\ t' = t$$

$\hat{\phi}^a(\mathbf{r}', t')\left(= \phi^a(\mathbf{r}, t)\right)$のダイナミクス

$$\frac{\partial \hat{\phi}^a}{\partial t'} = -\Gamma\left(-\Delta' \hat{\phi}^a + r\hat{\phi}^a + u|\hat{\boldsymbol{\phi}}|^2 \hat{\phi}^a\right) + \hat{\xi}^a$$

$$\Delta' = \left(\frac{\partial}{\partial x'}\right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial y'} - \gamma t \frac{\partial}{\partial x'}\right)^2$$

$\boxed{0 < t < 1/\gamma \text{であれば安定}}$

補足：数値計算の方法 (S. Toh, K. Ohkitani, and M. Yamada, 1991)

ダイナミクス $$\frac{\partial \phi^a}{\partial t} + \gamma y \frac{\partial \phi^a}{\partial x} = -\Gamma\left(-\Delta\phi^a + r\phi^a + u|\boldsymbol{\phi}|^2\phi^a \right) + \xi^a$$

数値的に不安定　$y = L_y \longrightarrow \gamma L_y \frac{\partial \phi^a}{\partial x} \propto L_y$

解決法：変形座標系(x', y', t')の上を導入する

$$x' = x - \gamma t y \ , \ y' = y \ , \ t' = t$$

$\hat{\phi}^a(\boldsymbol{r}', t')\left(= \phi^a(\boldsymbol{r}, t)\right)$のダイナミクス

$$\frac{\partial \hat{\phi}^a}{\partial t'} = -\Gamma\left(-\Delta'\hat{\phi}^a + r\hat{\phi}^a + u|\phi\right.$$

$$\Delta' = \left(\frac{\partial}{\partial x'}\right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial y'} - \gamma t \frac{\partial}{\partial x'}\right)^2$$

$0 < t < 1/\gamma$であれば安定

ダイナミクスの解き方

(step 0)　時刻$t = 0$で$\phi^a(\boldsymbol{r}, 0)$を知っている

(step 1)　変形座標系に移る　$\hat{\phi}^a(\boldsymbol{r}', 0) = \phi^a(\boldsymbol{r}, 0)$

(step 2)　変形座標系でダイナミクスを解き、$\hat{\phi}^a(\boldsymbol{r}', 1/\gamma)$を得る

(step 3)　元の座標系に戻る　$\phi^a(\boldsymbol{r}, 1/\gamma) = \hat{\phi}^a(\boldsymbol{r}', 1/\gamma)$

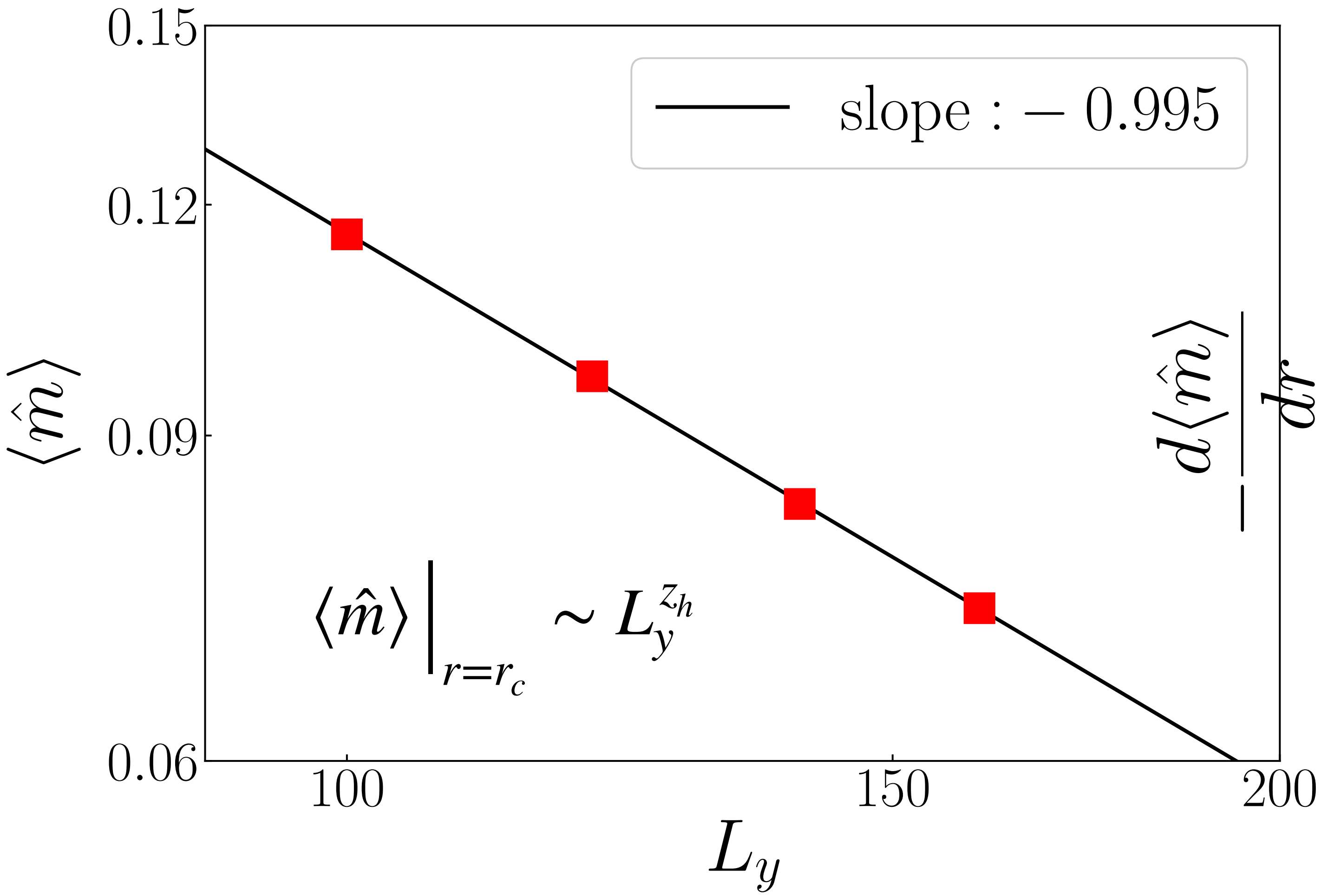
(step 4)　時刻を0に戻して、(step 0)に戻る

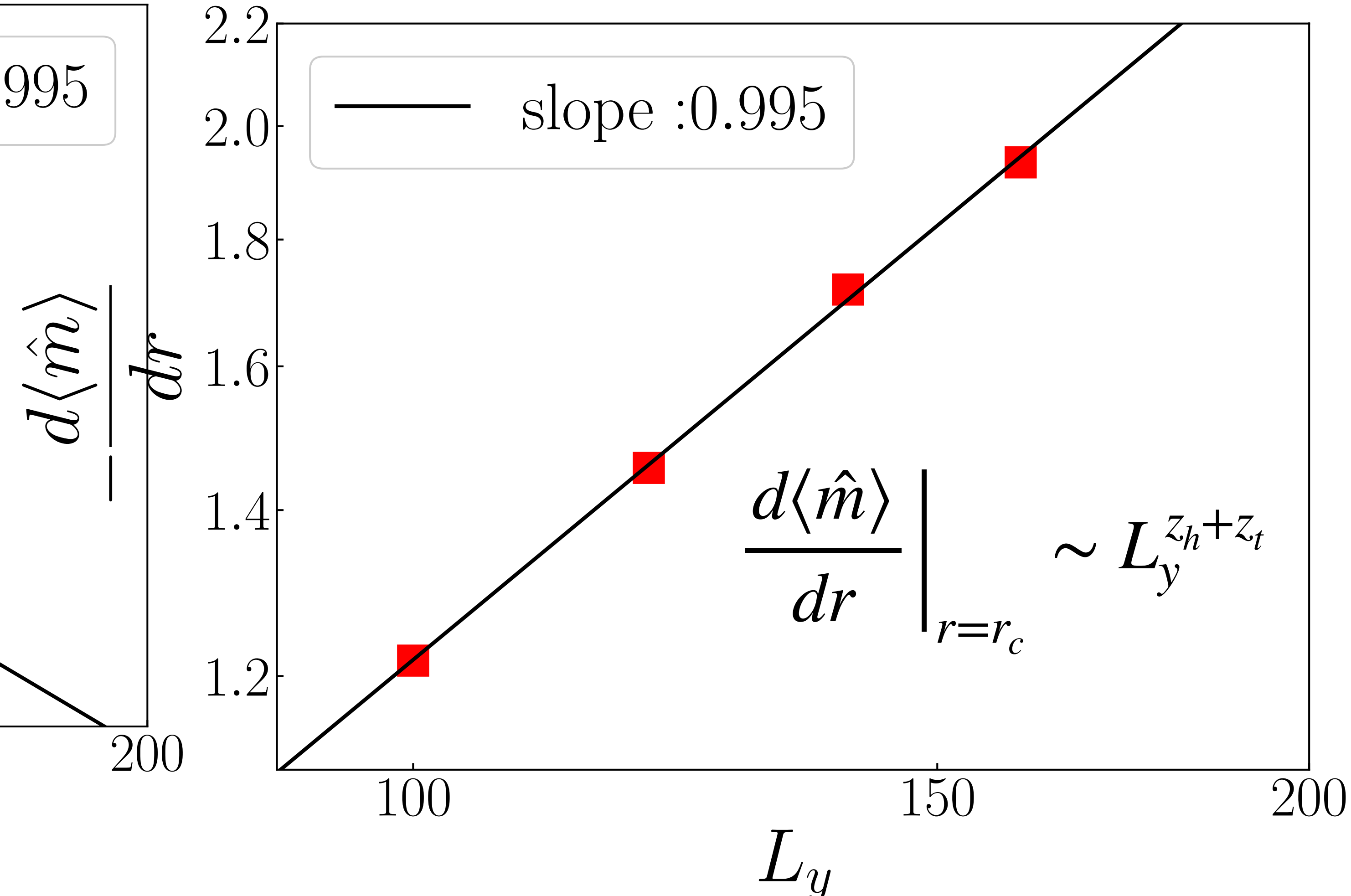
臨界指数 β , γ

計算方法： $\langle \hat{m} \rangle_{h=0} = L_y^{z_h} \tilde{M}(L_y^{z_t} t, L_y^{z_{Lx}} L_x^{-1})$

定義：$\langle \hat{m} \rangle \simeq (-t)^{\beta}, \chi \simeq |t|^{-\gamma}$

$$\beta = -\frac{z_h}{z_t}$$





- $\beta = 0.50$ ⟵ 平均場理論 $\beta = \frac{1}{2}$の値に近い
- $S(\boldsymbol{k}) \sim \frac{1}{t^{\gamma} + k_x^{0.68} + k_y^{2.0}}$ ⟵ 線形化モデル $S(\boldsymbol{k}) \sim \frac{1}{t^{\gamma} + k_x^{2/3} + k_y^{2}}$に近い

臨界指数は平均場理論/線形化モデルで与えられる