

## 論文内容の要旨

論文題目 : 時間的階層のある多体系の相転移現象の統計力学的研究

氏名 : 中島千尋

本研究は、特徴的な時間スケールが互いに大きく隔たった複数の自由度を持ち、なおかつそれらがスケールを越えて相互に影響し合うような多体系の相転移現象に関する研究である。ダイナミクスの時間スケールが速い自由度  $f$  と遅い自由度  $s$  による系を考え、両者の時間スケールは大きく隔たっているものとして断熱近似を行った次のような記述形式を考える。

$$\tau \frac{d s}{d t} = \frac{d}{d s} \left( F_f(s) - \log P_{prior}(s) \right) + \eta(t) \quad (1)$$

$$\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = 2T_s \delta(t - t') \quad (2)$$

$$F_f(s) = -T_f \log \text{Tr}_f e^{-\beta_f H(f,s)} \quad (3)$$

式 (1) は遅い自由度の従う確率過程であり、 $\eta(t)$  は式 (2) に従って温度  $T_s$  で特徴づけられるホワイトノイズである。自由度  $s$  が式 (1)、(2) で記述される確率過程に従う一方で、自由度  $f$  は、固定された  $s$  の配位のもとで素早く定常状態に至る。この定常状態は全系のハミルトニアン  $H(f,s)$  と温度  $T_f$  のもとのカノニカル分布で表されるとする。式 (3) は  $f$  についてのカノニカル分布から定義した部分自由エネルギーである。ここで  $\beta_f = 1/T_f$  とする。自由度  $s$  は  $f$  を含まない事前分布  $P_{prior}(s)$  に加え、 $f$  に関する部分自由エネルギーを有効ポテンシャルとして受ける。従って、 $s$  は  $f$  の統計的性質の影響を受けながら運動する様になっている。本論文では、このような時間スケールの階層を内包するような系の示す相転移現象を考える。この形式のモデルを partially annealed 模型と呼ぶ。神経回路網の自己組織的な振る舞い、タンパク質やりガンド - レセプター結合のデザイン問題など、限定的な局面ではあるが、このような記述形式が適用できる系がある。

partially annealed 模型はスピングラスや構造ガラスなどの強い空間非一様性を持った系の取り扱いから派生した模型であり、速い自由度と遅い自由度の相互依存性が考慮されて

いる点が特徴である。この模型には、通常の平衡系では見られないタイプの相転移が存在しうる。

本論文ではまず、partially annealed 模型の相転移における平衡状態では見られない振る舞いの端的なものとして、負の潜熱を伴う1次転移を取り扱う。遅いスピン自由度と速い粒子自由度が格子上の各点にあるスピン格子ガス系で2種類の自由度がそれぞれ異なる熱浴温度にある場合に、負の潜熱を伴う1次転移が存在することを示した先行研究がある。筆者は、先行研究を受けて拡張したスピン格子ガス模型を考え、平均場模型の範囲で解析を行った。熱浴温度が2つある partially annealed 模型では、速い自由度、遅い自由度それぞれに関連して2つの部分にエントロピーを分解できる。この分解された2つのエントロピーの1次転移における飛びの値と前述の2つの熱浴それぞれの温度に関して、Clausius-Clapeyron 関係式を得ることができた。これにもとづき、負の潜熱は、相が移る時に、2つのエントロピーの飛びの符号が互いに逆である場合に起こることがわかった。これにより、先行研究で言及されていた、負の潜熱の発生にはハミルトニアン $\mathcal{H}$ の寄与に競合が必要であるという点を、エントロピーの寄与の競合という形で整理した。また上記の Clausius-Clapeyron 関係式をもとに、1次転移の相境界の形状と潜熱の出現条件に関係があり、負の潜熱の生じる領域を相境界の形状から特定できることが分かった。また、同じ自由度を持ち、時間スケールの大小関係が互いに逆である場合の二つのスピン格子ガス模型の相転移の振る舞いをそれぞれ調べ、時間スケールの大小関係に依存して相転移の振る舞いに定性的な違いが生じることを明らかにした。

加えて、負の潜熱に対する短距離揺らぎの影響についての考察も行った。平均場模型は1体化問題として定式化されるため空間揺らぎは考慮されない。そのために内部エネルギーや比熱などの熱力学的な量が実空間における系とはかけ離れた振る舞いを示す。そこで、空間揺らぎを取り込む一歩としてスピン格子ガスのベータ近似による解析を行い、相図を得た。

また、本論文では partially annealed 模型の臨界現象の有限次元揺らぎの問題も考える。partially annealed 模型の相転移に関しては多くの先行研究があるが、そのほとんどは平均場模型に関するものであり、有限次元系の臨界現象について調べられた研究は少ない。筆者らは、神経回路網の記述に用いられる partially annealed spin glass 模型の Migdal-Kadanoff 繰り込み群による解析を行った。partially annealed spin glass 模型は quenched spin glass 模型にボンド自由度の熱的相関の効果を導入して拡張した模型である。本研究では、partially annealed spin glass 模型を階層格子上で考え、Migdal-Kadanoff 繰り込み変換により、固定点の図、相図、相関長臨界指数を求めた。

そこで得られた相図では、速い自由度であるスピン熱浴の温度を下げることでスピング

ラス相から強磁性相への転移が見られる。これに関しては、西森ラインの性質から一般的な制限が課される quenched spin glass 模型の相図との比較を行い、partially annealed spin glass 模型のスピングラス-強磁性相転移が quenched spin glass 模型とは定性的に異なる振る舞いの一つであることが分かった。ボンド自由度の熱的相関の有無が quenched spin glass 模型と partially annealed spin glass 模型の顕著な違いであることから、このスピングラス-強磁性転移がボンド自由度の相関に起因するものであることが言える。強磁性-スピングラス転移に関する相関長の臨界指数の値も計算し、少なくとも Migdal-Kadanoff ユニバーサリティクラスの範囲ではこの転移の指数の値が常磁性-強磁性転移の指数の値と一致するという結果が得られた。

また quench spin glass 模型ではスピングラス秩序が存在しない分岐数  $q = 2$  の階層格子 (有効次元  $d_{\text{eff}} = 2$  の格子) において、partially annealed spin glass 模型では有限温度でスピングラス転移が見られた。これは、ボンド自由度の相関が導入された partially annealed spin glass 模型の場合には 2 次元格子上でもスピングラス相が有限温度で安定に存在する可能性を示しており、スピングラス転移の下部臨界次元の値が変化することを示唆している。

上記の結果を通して、遅い変数による有効記述では見いだすことができない、遅い自由度の相関が存在しない系では起こりえないという意味で、時間スケールをまたいだ相関や遅い変数間の非自明な相関が重要な影響をもたらしていると考えられる相転移現象の存在を示すことができた。