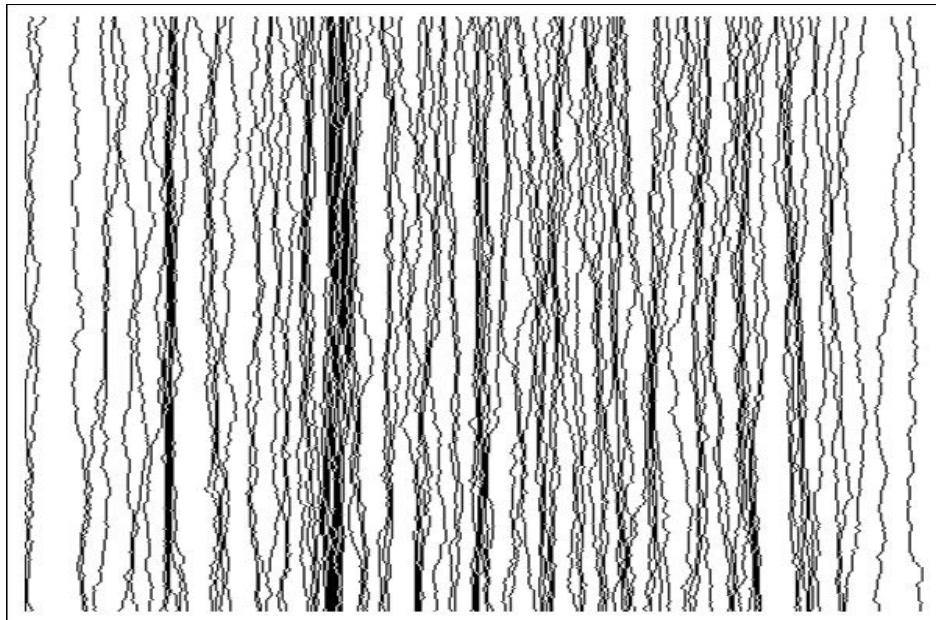


戸田型相互作用を持つ ブラウン運動模型



日本物理学会
第68回年次大会

2013/3/26

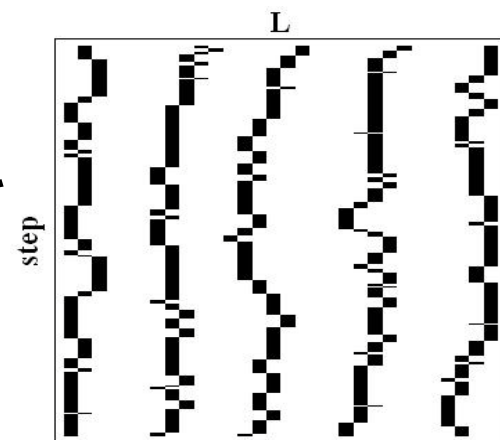
中大理工

多田 紘樹

香取 眞理

1. vicious walker模型

多粒子ランダムウォークを考える際に重要なことは、ランダムウォーカー自身にどのような相互作用を設定するかということである。ランダムウォーカー同士が同時刻に同一の格子点を共有できないという条件を課すことにより、強い斥力相互作用を導入すると、系は排除体積効果を持つことになる。このような系は vicious walker模型 (M. Fisher 1984) と呼ばれている。この模型は濡れや融解などの非平衡な物理現象を説明するモデルとして用いられている。



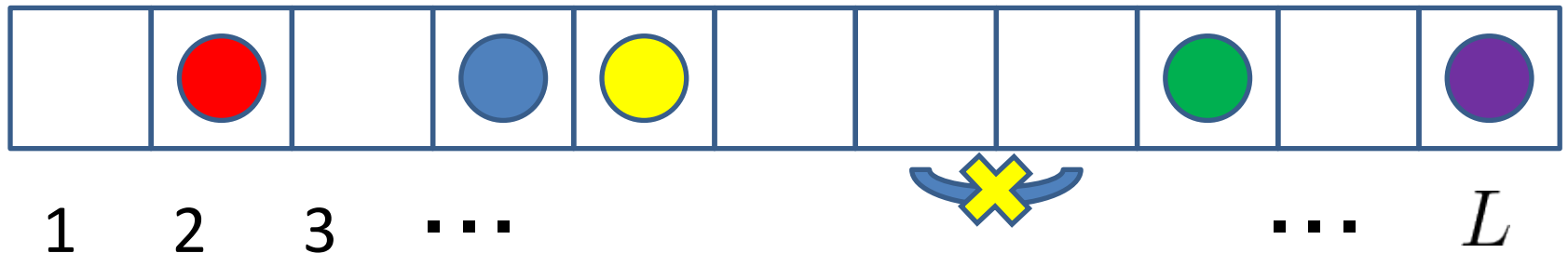
2. 戸田格子モデル

パラメータ温度 T を導入することで、絶対零度では vicious walk であるが、温度が高くなると粒子同士の位置を交換できるモデルを考えた。粒子間の相互作用として戸田格子型ポテンシャルを導入した。

$$V = \sum_{j=1}^{N-1} e^{-(x_{j+1} - x_j)/a} \quad (a > 0)$$

3. モンテカルロ法

- (1) サイト L の上に粒子を N 個ランダムに初期配置する. (各粒子は $(j = 1, \dots, N)$ でラベル付けされている)
- (2) サイト L の中から最近接ペアを1つランダムに選ぶ.



ただし, 少なくとも片方に粒子がいなければペアを選びなおす.

3. モンテカルロ法

(3) 選ばれたペアを入れ替え, 他のサイトはそのままにした状態を次の候補とする.

現在



候補



3. モンテカルロ法

(4) 現在の配置のポテンシャル V_1 と候補の配置のポテンシャル V_2 を計算する.

$$V = \sum_{j=1}^{N-1} e^{-(x_{j+1} - x_j)/a} \quad (a > 0)$$

- (i) $V_1 \geq V_2$ ならば必ず候補を採用する.
- (ii) $V_1 < V_2$ ならば候補の状態の確率と現在の状態の確率の比 q を計算する.

3. モンテカルロ法

詳細つり合いの条件

$$e^{-V_1/T} p_{1 \rightarrow 2} = e^{-V_2/T} p_{2 \rightarrow 1}$$
$$\Leftrightarrow e^{-(V_2 - V_1)/T} = q \quad \left(\beta = \frac{1}{k_B T} \right)$$

[0,1]の乱数 r を生成し

$r < q$ ならば候補を採用する.

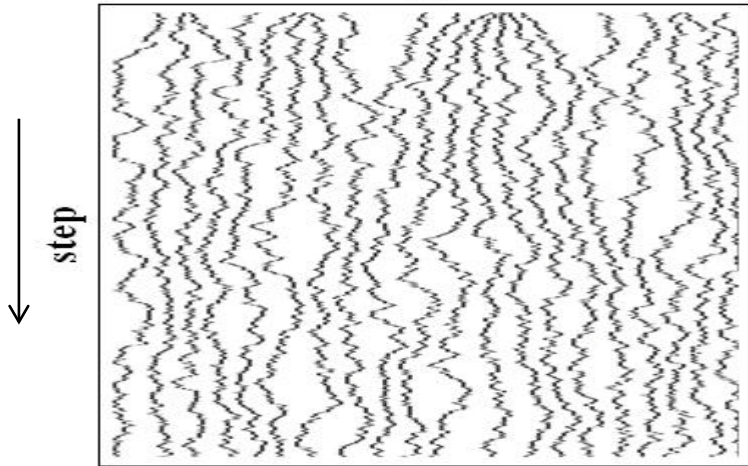
さもなければ、現在の状態をそのまま次の状態とする.

(5) 上の手続きを繰り返す.

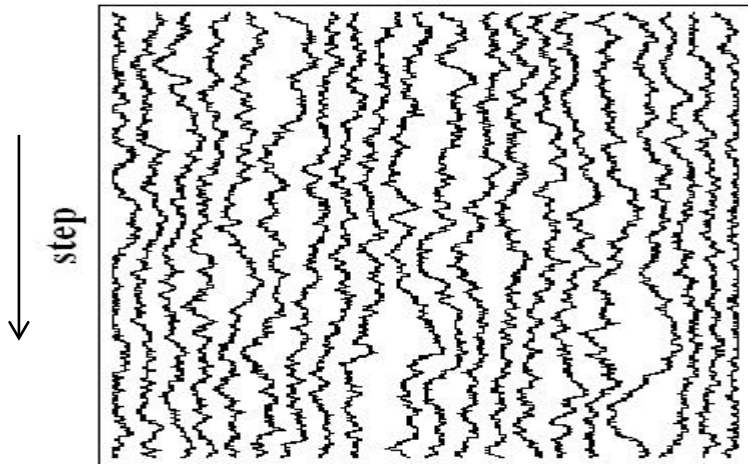
4. 時空図

$$N = 20, L = 200, \text{step} = 10000$$

L



L



$$T = 0.01$$

粒子のいるサイトを黒，粒子のいないサイトを白で表示した.

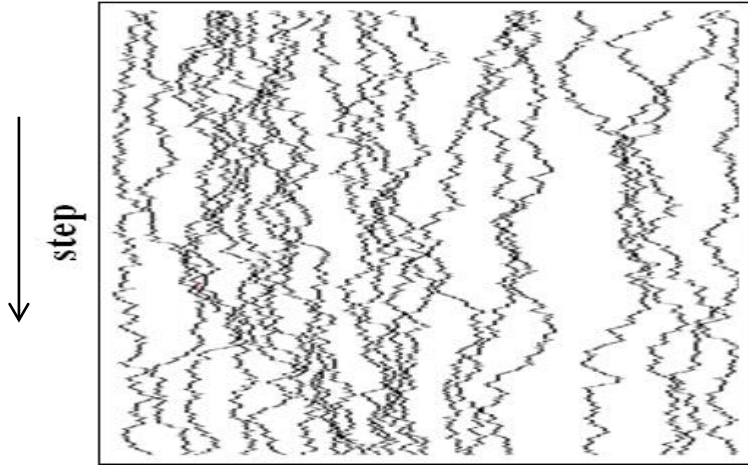
温度の低い時では，粒子同士の間隔が等間隔になるように拡散し，粒子は排他的に運動している様子が見られる.

$T \rightarrow 0$ ではvicious walkである.

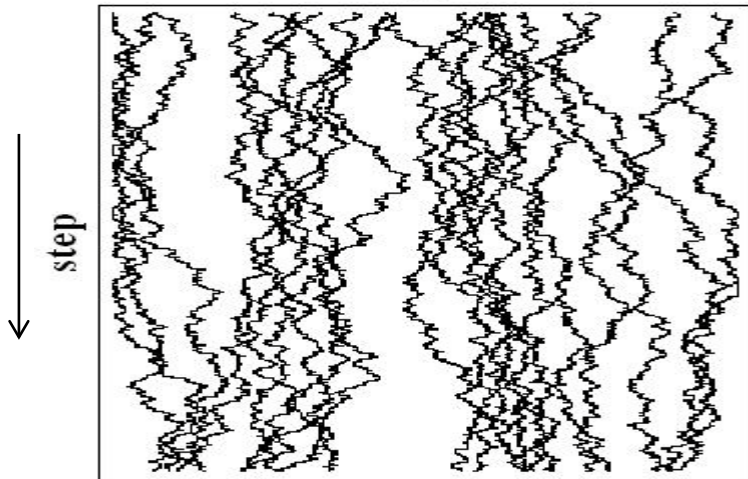
4. 時空図

$$N = 20, L = 200, \text{step} = 10000$$

L



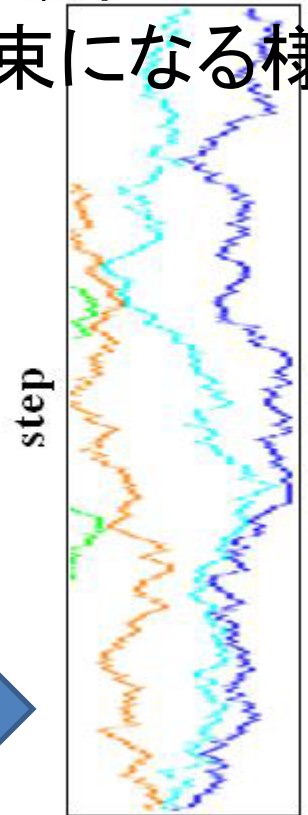
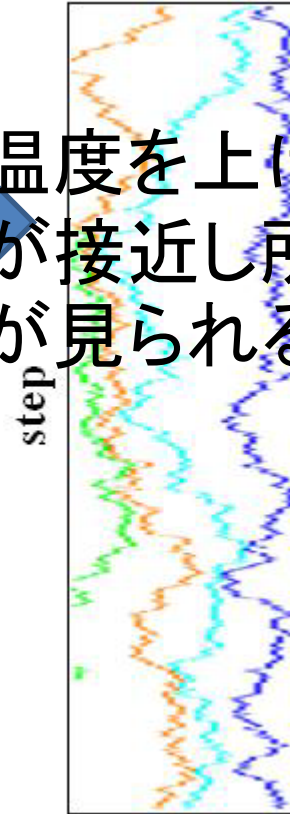
L



$T = 1.0$

束の中の様子

温度を上げると束の中の粒子同士が接近し所々束になる様子が見られる。

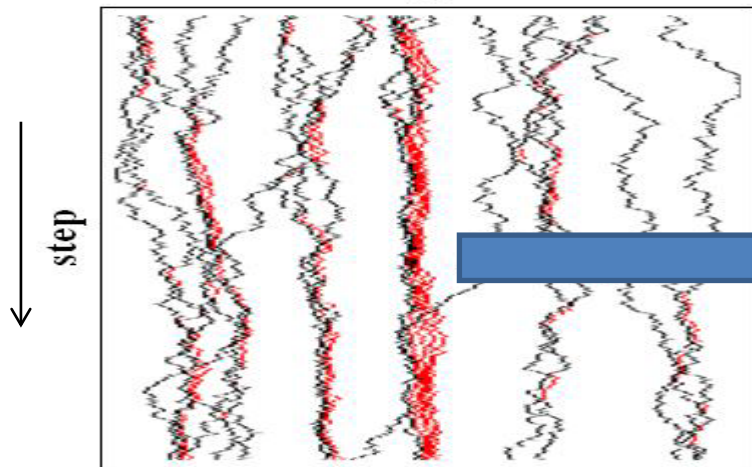


4. 時空図

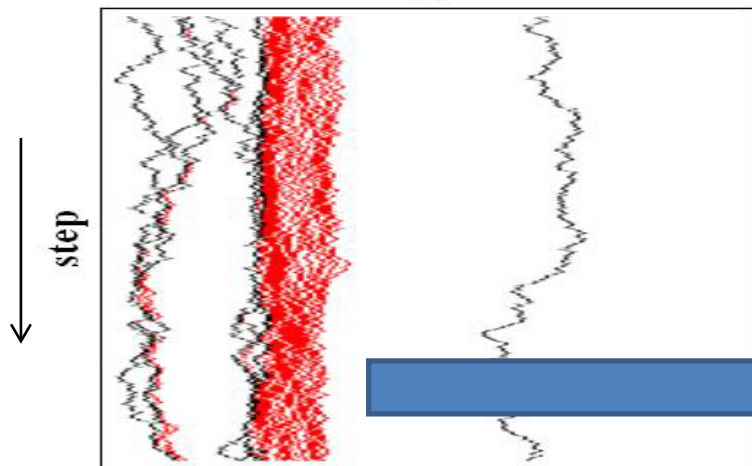
$N = 20, L = 200, step = 10000$

L

束の中の様子



L



$T = 100$

さらに温度を上げると粒子は交叉を繰り返し、いくつかの束を形成する様子が見られる。定常状態では束になっている様子がより顕著である。この束をクラスターと呼ぶことにし、クラスターが形成される様子を調べた。



10

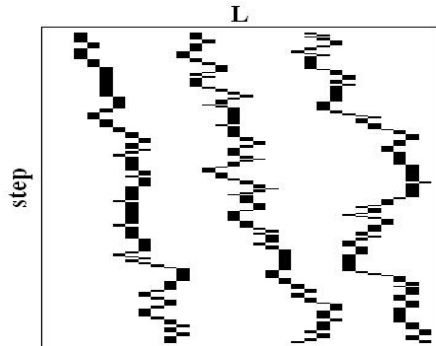
なぜクラスターになるのか

熱力学・統計力学に従うと自由エネルギー
 $F = E - TS$ を最小にするような状態が
実現するだろう。

$T = 0$ なら E が低い方が安定。

$T > 0$ なら E が大きくても、 S が大きければ安定。

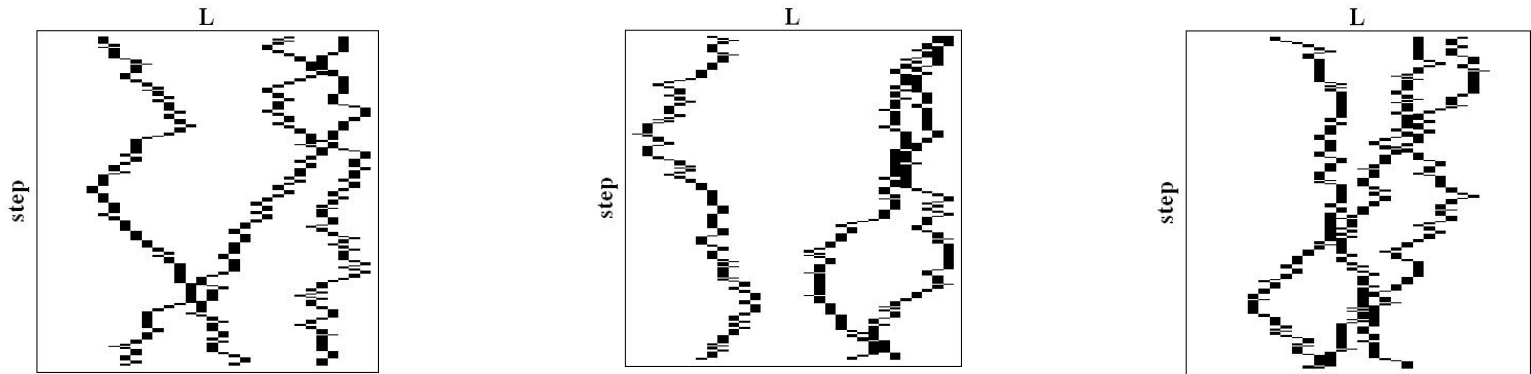
交叉なしの場合



の1通りしかない。

なぜクラスターになるのか

交叉ありの場合, 同じ E でも,



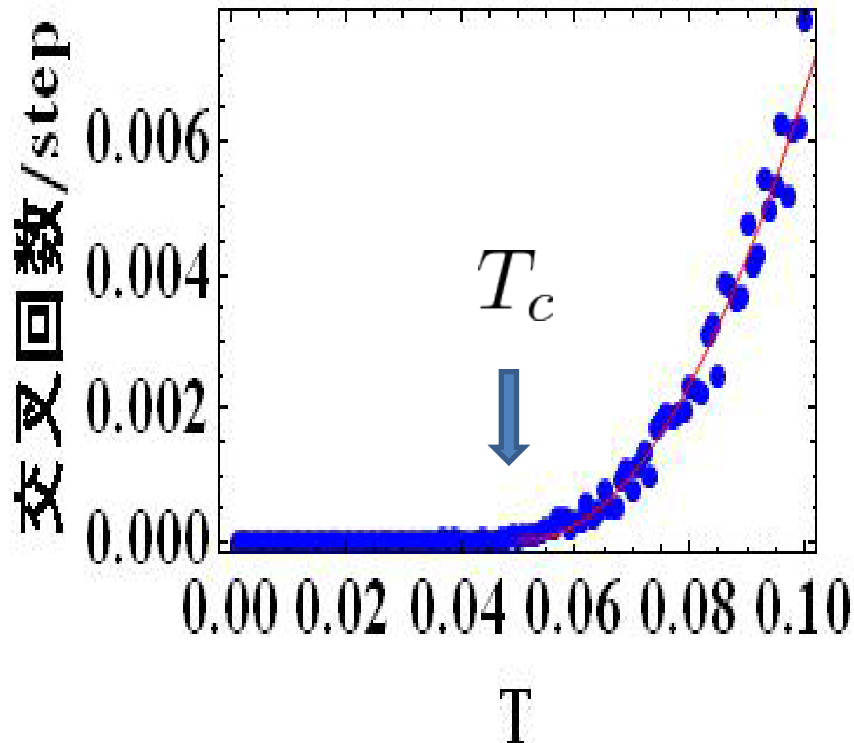
など多くのパターンがありうる.

今はペアでの更新を課している(遠くのもの同士は交叉できない), さらに密度を一定にしているため, 交叉回数を多くする(S を大きくする)ためには, クラスターになる方が得である.

5. 交叉・非交叉相転移

$$\rho = 0.4$$

温度と交叉回数の関係



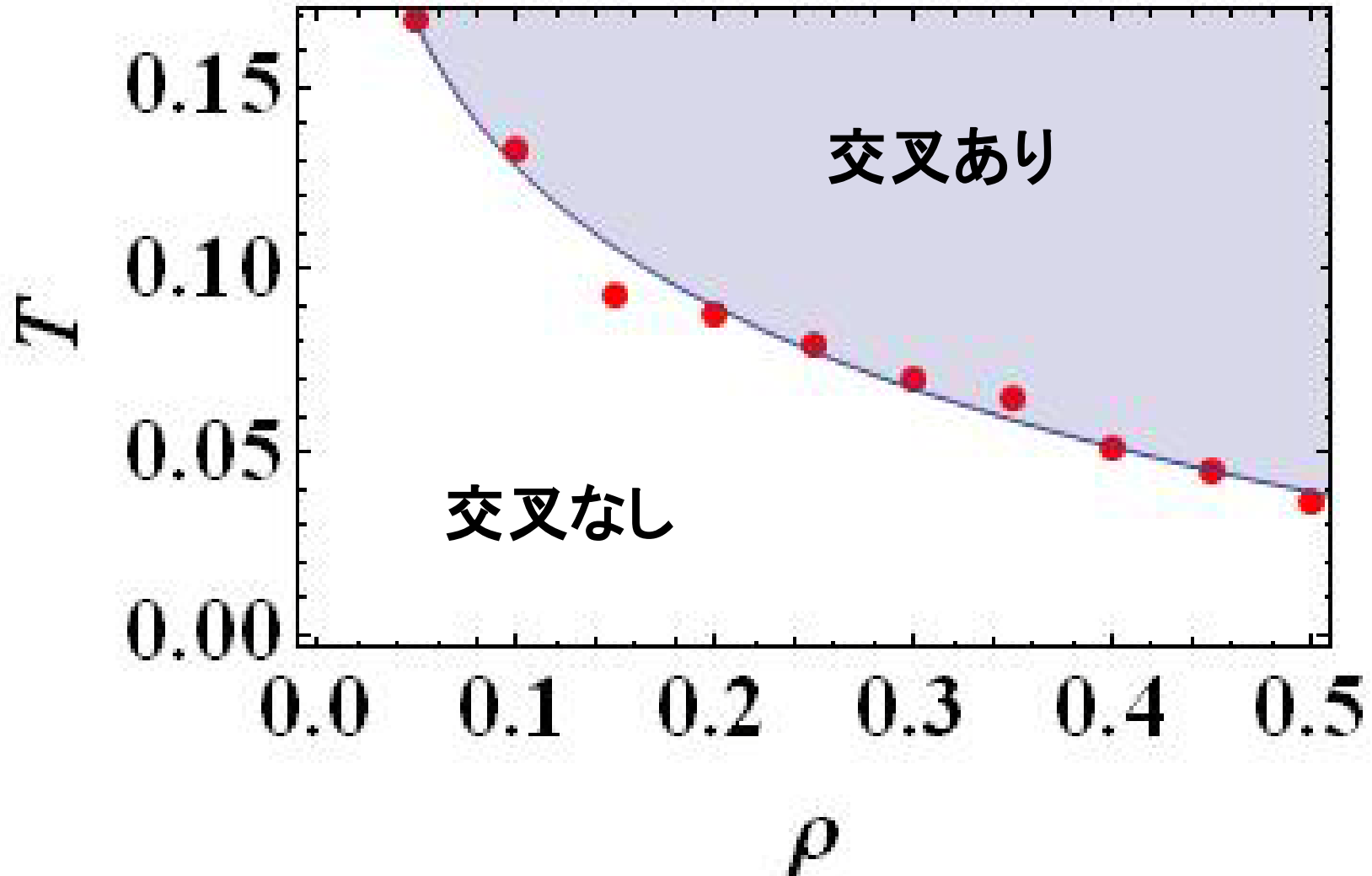
各密度, 各温度に対し
て1000step, 100サンプル
行い, 1stepあたりの
交叉回数をカウントした.
2次曲線でフィッティン
グを行い, 転移温度を
求めた.

交叉回数/step

$$\sim (T - T_c)^2, \quad T > T_c$$

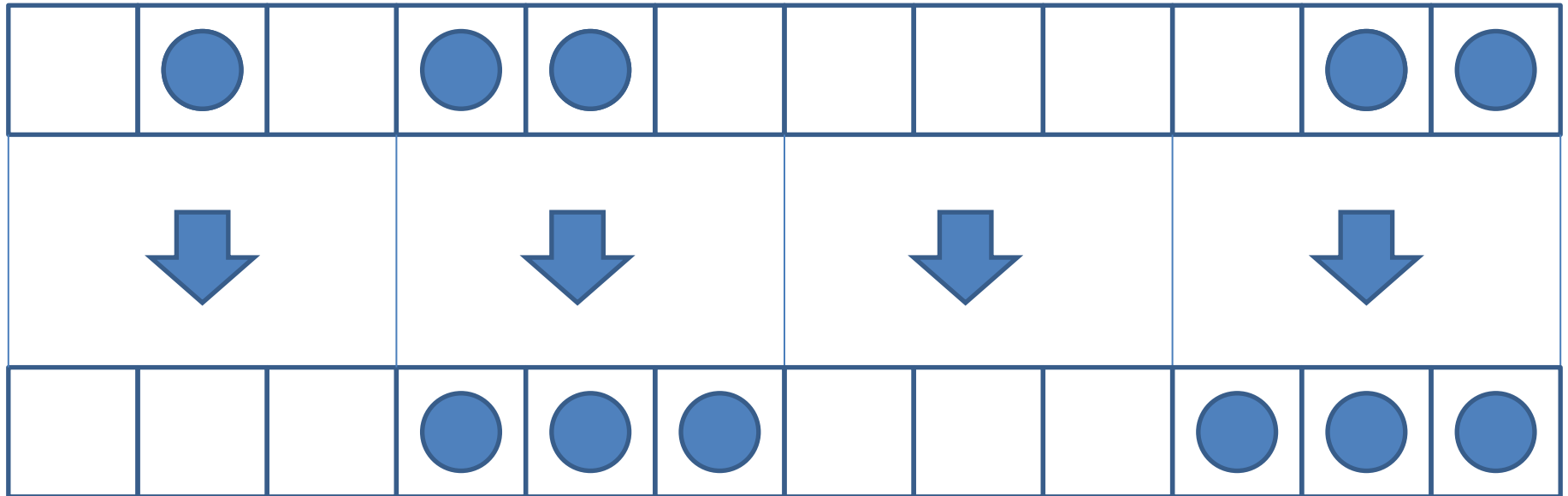
5. 交叉・非交叉相転移

相図

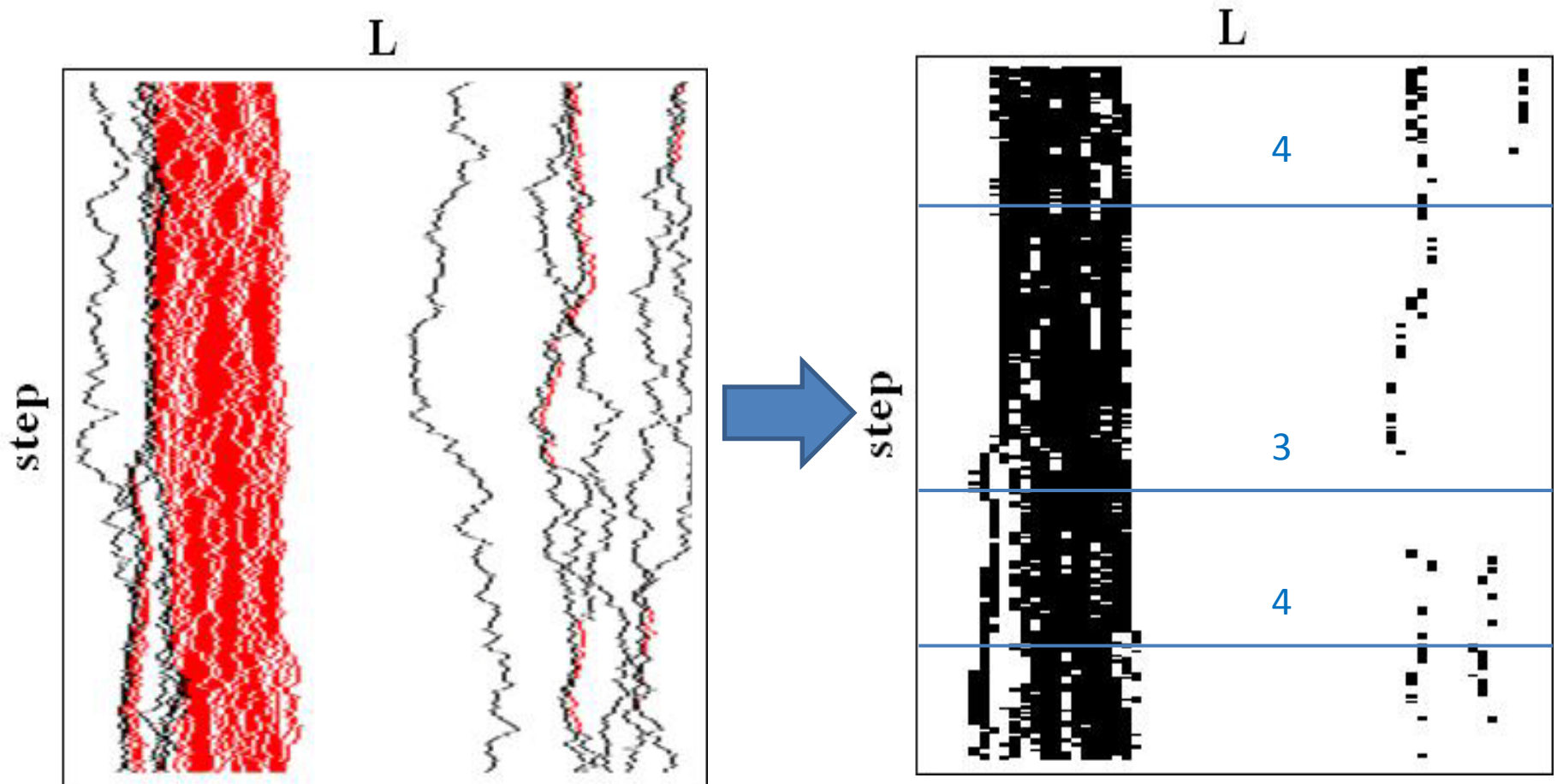


6. 繰り込みを用いた クラスターの構造解析

クラスターの定義を明確にするため、相転移で用いられる繰り込みの方法を適用した。 L サイトを3サイトずつ区切り、3つのサイトをひとくくりにして扱う。新しいサイトは次のように3つのサイトの多数決で決める。

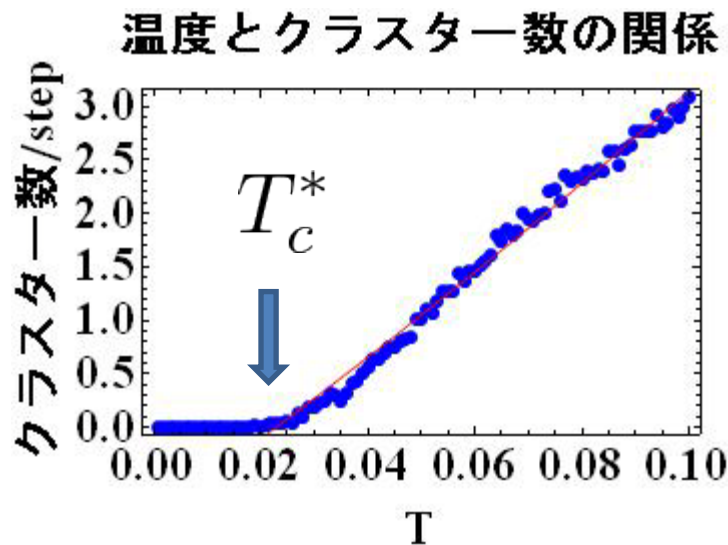
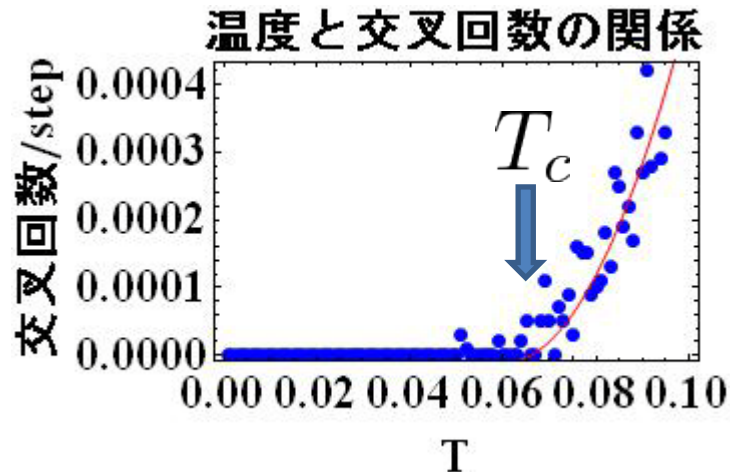


6. 繰り込みを用いた クラスターの構造解析



7. 温度とクラスターの関係

$$\rho = 0.3 \quad L = 180$$

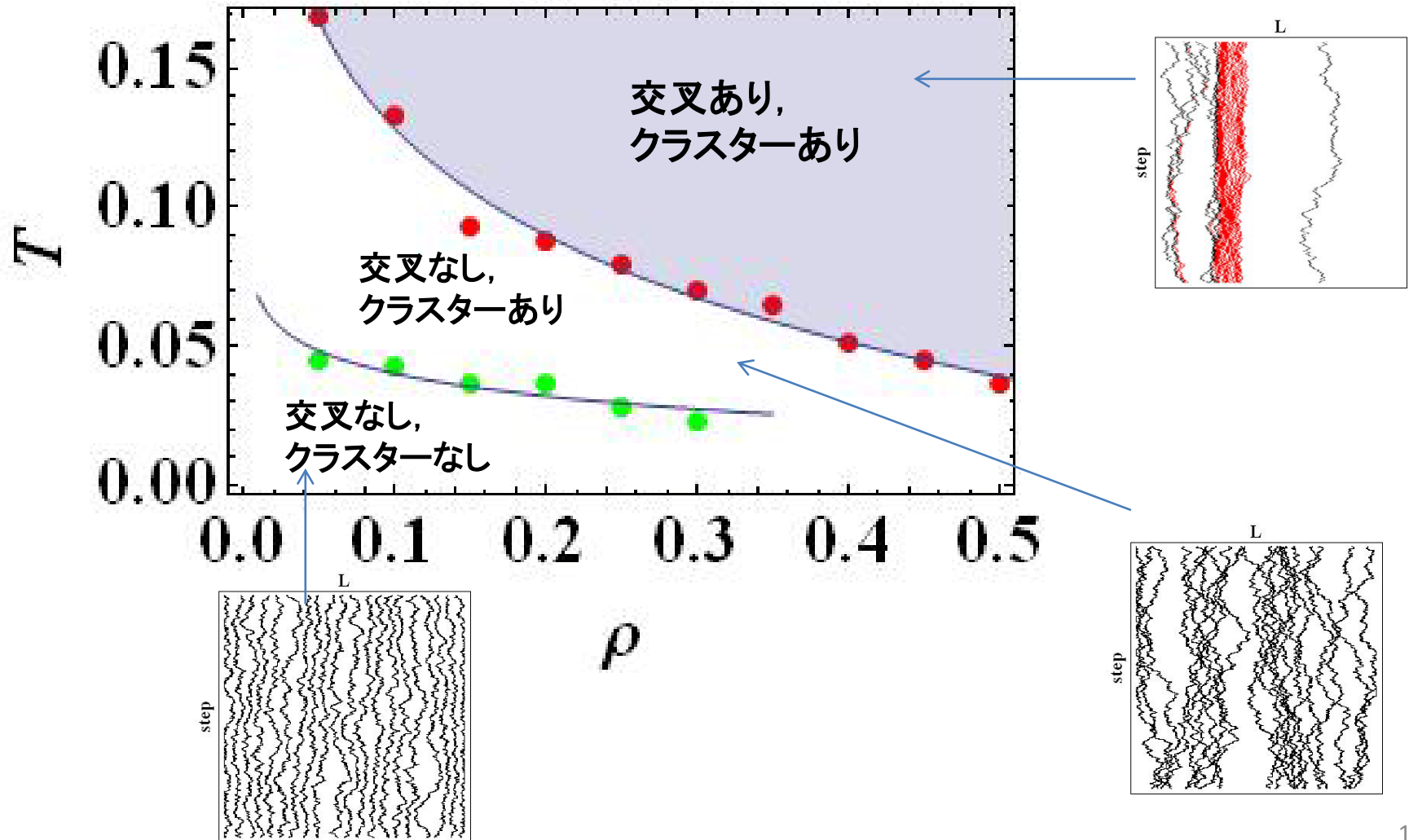


交叉回数とクラスター数では立ち上がりの温度に違いが見られる. これは粒子同士が接近しクラスターが形成され, その後交叉が起きるためである. 2次曲線でフィッティングを行い転移温度 T_c, T_c^* を求めた.

$$\begin{aligned} \text{交叉回数/step} &\sim (T - T_c)^2, & T > T_c \\ \text{クラスター数/step} &\sim (T - T_c^*)^2, & T > T_c^* \end{aligned}$$

8. クラスター・非クラスター相転移

相図



9. まとめと今後の課題

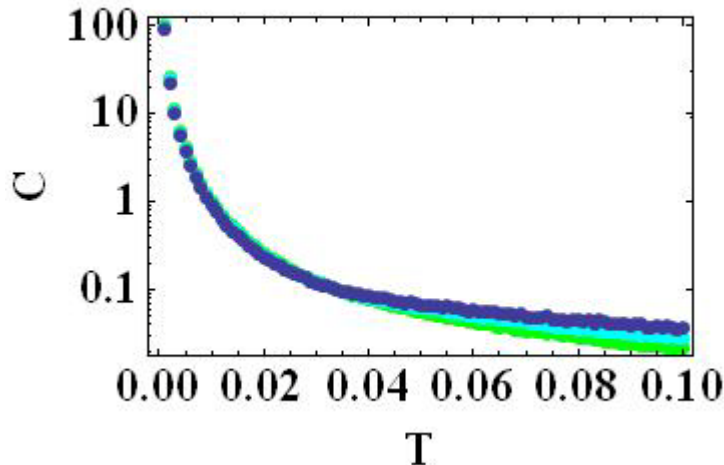
- (1) 絶対零度ではvicious walkであるが、温度を入れたモデルを考案した.
- (2) 排他的な系に温度を入れ、粒子軌跡の複雑なパターンを得ることができた.
- (3) 相図を描くことができ、3つの相になることがわかった.

今後は解析的にそれぞれの相があることを示したい.

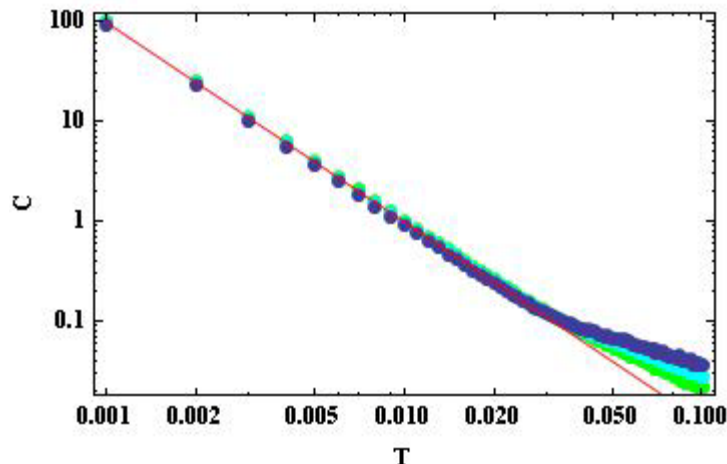
(資料) 比熱

● $L = 60$ ● $L = 90$ ● $L = 180$

温度と比熱の関係



温度と比熱の関係



密度 $\rho = 0.3$ のときの比熱を示した.

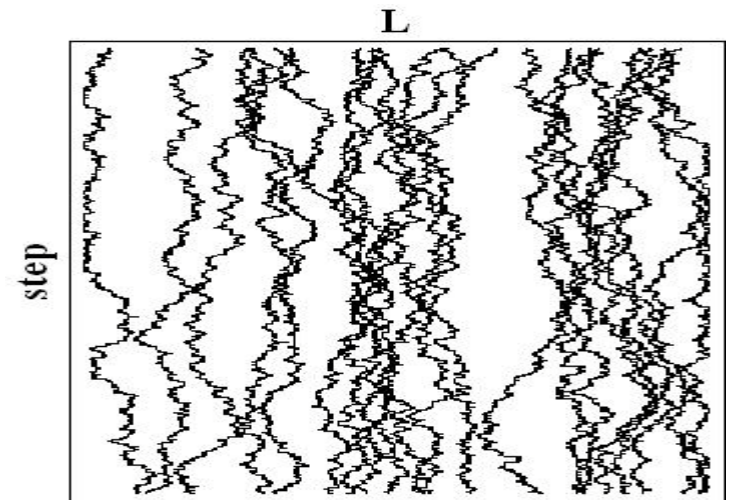
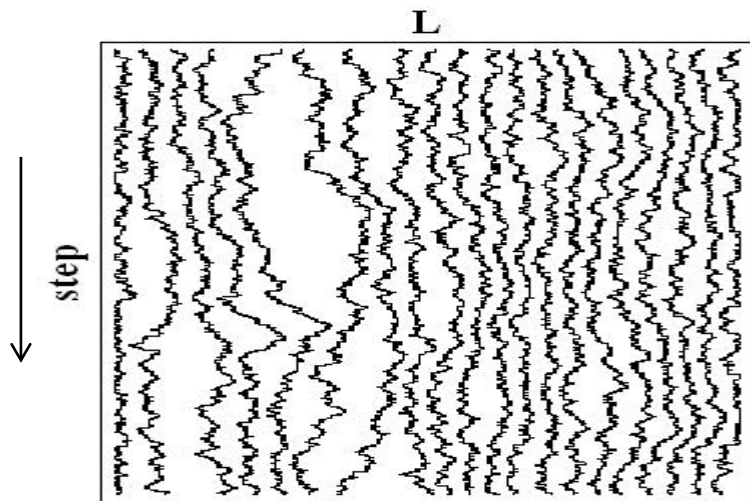
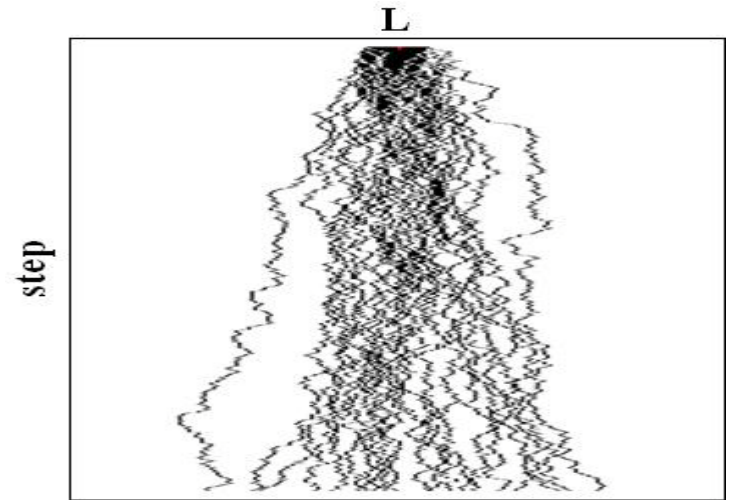
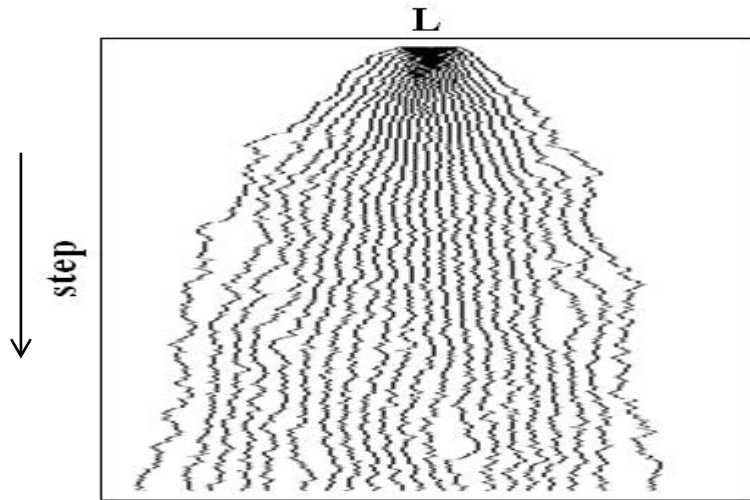
上図より有限温度で平衡状態の相転移はない.

両対数プロットより, 次の臨界指数が得られた.

$$C \sim T^{-2.0}$$

(資料) 初期配置の変更 (中央に密集)

$N = 20, L = 200, step = 10000$

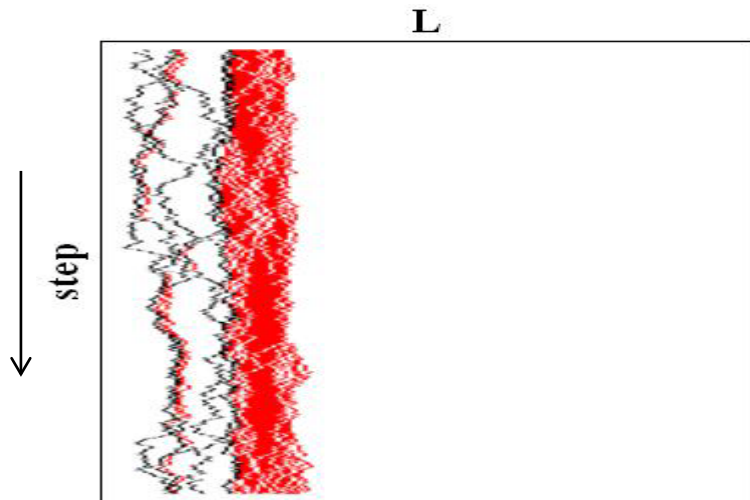
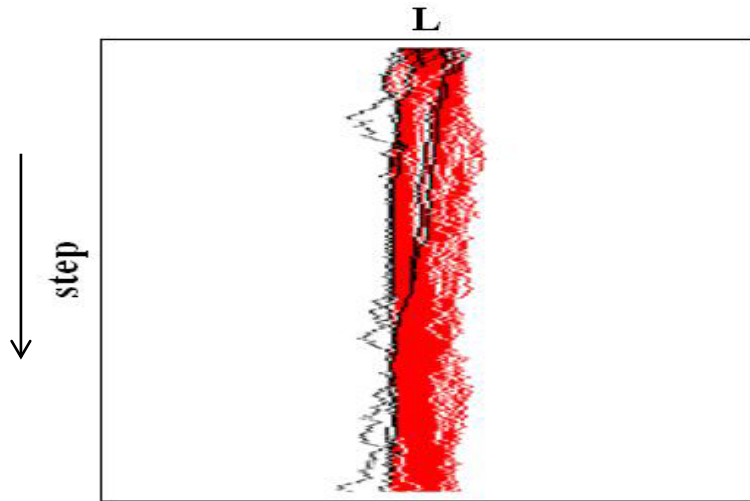


$T = 0.01$

$T = 1.0$

(資料) 初期配置の変更 (中央に密集)

$$N = 20, L = 200, \text{step} = 10000$$



$$T = 100$$

初期配置として、粒子を中央に密集させて配置し、1つのクラスターを形成している状態から時間発展を観察した。温度が低いとき、粒子同士の間隔が等間隔になるように拡散する。温度を上げると、粒子は交叉するようになり、クラスター状態を維持する。