

剛体円板を用いた自己駆動粒子系の相転移点シフト

村瀬信明¹, 磯部雅晴¹

¹名古屋工業大学大学院工学研究科工学専攻

概要

本研究ではアクティブマター系の排除体積効果と相転移への影響を調べるため、Vicsek モデルにおける質点を剛体円板に変え、Event-Driven 型分子動力学法を実行し、固液相転移近傍における相図を作成した。素子間の衝突頻度と Vicsek モデルの相互作用の競合により、粒子占有率に相転移点シフトがみられた。また、アクティブマター度の増大と系の配向秩序度に非自明な関係が得られた。

Anomalous phase transition in self-propelled hard disk systems

Nobuaki Murase, Masaharu Isobe

Graduate School of Engineering, Nagoya Institute of Technology

Abstract

In this study, we investigate the phase behavior of the self-propelled hard disk systems with the Vicsek-type interaction via event-driven molecular dynamics simulation systematically. In addition to the ordinal order-disorder transition of the collective velocity field known in the original point particle of the Vicsek model, we observed the novel competition driven by the global positional order (so-called Alder transition), which cause anomalous phase transition and transition shifts.

1 はじめに

生物のように自ら動く素子（ユニット）は「自己駆動粒子 (Self-propelled Particles)」と呼ばれ、これらを素子とした多体系で生じる巨視的な協調運動は、「アクティブマター (Active Matter)」として、精力的に研究が行われている [1]。自己駆動粒子系を研究する有名なモデルに、いわゆる Vicsek モデルがある [2]。Vicsek モデルは質点を素子とし、近傍素子の速度ベクトルの総和に素子の方向を揃えるモデルである。このモデルでは、ノイズパラメータの増大により粒子（質点）群が1方向に流れる秩序相から乱雑に動く無秩序相へと相転移を起こす [3]。近年では、素子間に様々な相互作用がある系での研究も行われている [4, 5]。本研究では Vicsek モデルにおける相互作用を基礎に、排除体積効果を導入し、

剛体円板系において、Event-Driven 型分子動力学法 (EDMD) [5] を実行した。特に、固液相転移 (いわゆる Alder 転移) 近傍に着目し、相転移点シフトと各相の特徴ならびに、素子間の衝突頻度と Vicsek モデルの相互作用の競合の影響を調べた。

2 シミュレーション手法

平衡系の剛体円板系に Vicsek モデルの相互作用を導入し、EDMD を実行した。2次元剛体円板系 (粒子数 $N = 4096$) において粒子占有率 ν を Alder 転移点近傍 ($\nu = 0.70 \sim 0.75$) で系統的に変え、Vicsek モデルのアクティブマター度として用いられるノイズパラメータ ($\eta = 0.1\pi \sim 1.9\pi$) を変化させた。 η が小さいと系内の粒子は一方向に流れ、 η が大きいと粒子は乱雑に動き平衡系に近くなる。また、Vicsek モデルの相互作用の更新間隔を平衡系での粒子の平

均衝突時間 τ で規格化した値 ($\Delta t/\tau = 1 \sim 100$) で変化させた。速度秩序変数、粒子毎の配向秩序変数 $\phi_6^j = 1/N_j \sum \exp(6i\theta)$ およびグローバル配向秩序変数 $\Phi_6^G = |1/N \sum \phi_6^j|$ を求め、相の特徴づけを行った。

3 結果と考察

図1は $\nu - \eta$ 上のグローバル配向秩序変数の等値線図を示す。これらより、 η の減少（アクティブマター度の増大）により、等値線が占有率の高密度側にシフトする。これは系内の素子が一方向に流れ、固液転移近傍で非平衡流が生じ、結晶化が抑制されるためである。

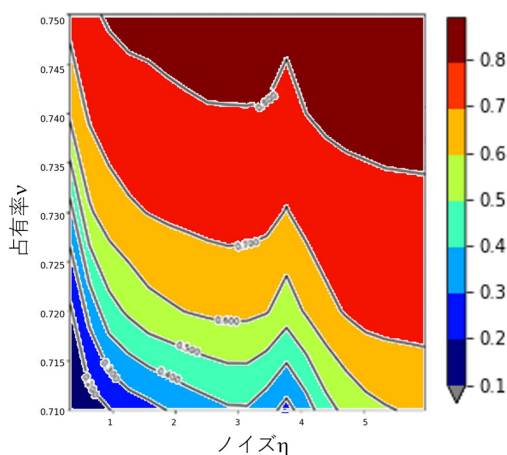


図1: $\nu - \eta$ 空間上のグローバル配向秩序変数と等値線。

図2は $\nu = 0.72$ におけるグローバル配向秩序変数のノイズ η と相互作用の更新間隔 Δt の依存性を示したものである。ノイズを大きくしていき平衡系に近づくときグローバル配向秩序変数が大きくなり、系全体としての結晶秩序が増大する。 $\eta = 0.1 \sim 1.4\pi$ 付近では更新間隔 Δt が短いほどグローバル配向秩序変数が小さくなっており、結晶状態から流動化する。また $\eta = 1.2\pi$ 付近に非自明なカプスが見られる。

質点を用いる Vicsek モデルではノイズパラメータ η の増大により近傍粒子間の速度ベクトルを同一方向にする働きが弱くなる。その結果、速度秩序変数が小さくなり、系は秩序相から無秩序相に相転移を起こす。一方、剛体円板系では ν の増大により固液相転移 (Alder 転移) を起こすことが知られている [7]。ノイズが小さく系が秩序相つまり非平衡系であるほど固液相転移点が高占有率側にシフトしていき、相互作用の更新間隔 Δt が短い程、結晶状態か

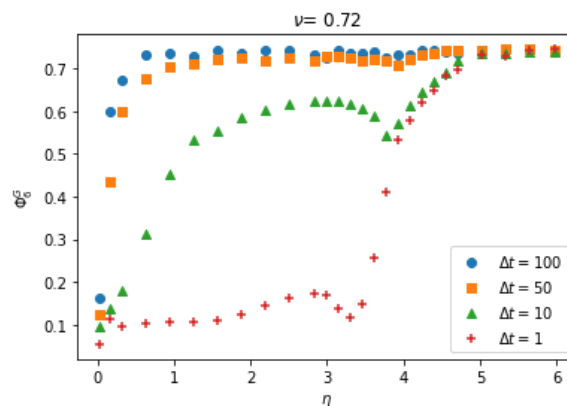


図2: 相互作用時間を変えたときのグローバル配向秩序変数のノイズ η 依存性 ($\nu = 0.72$)

ら流動化することが確認できた。また $\eta = 1.2\pi$ 付近に非自明なカプスが見られる。講演では、これらの特異な挙動を自由体積などの微視的解析を基に相転移点シフトなどについて考察する。

参考文献

- [1] T. Vicsek and A. Zafeiris, Phys. Rep., **517** (2012) 71.
- [2] T. Vicsek, A. Czirók, E. Ben-Jacob, I. Cohen and O. Shocher, Phys. Rev. Lett., **75** (1995) 6.
- [3] A. Czirók, H. E. Stanley, T. Vicsek, J. Phys. A: Math. Gen., **30** (1997) 1375.
- [4] J. Bialké, T. Speck, and H. Löwen, Phys. Rev. Lett., **108** (2012) 168301.
- [5] A. K. Omar, K. Klymko, T. GrandPre and P. L. Geissler, Phys. Rev. Lett. **126** (2021) 188002.
- [6] B. J. Alder and T. E. Wainwright, J. Chem. Phys., **31** (1959) 459.
- [7] E. P. Bernard and W. Krauth, Phys. Rev. Lett. **107** (2011) 155704.; M. Engel, J.A. Anderson, S.C. Glotzer, M. Isobe, E.P. Bernard and W. Krauth, Phys.Rev.E, **87** (2013) 042134.