

斥力相互作用する自己駆動粒子モデルの相分離と長距離相関

足立景亮^{1,2}

¹ 理化学研究所 生命機能科学研究センター

² 理化学研究所 数理創造プログラム

概要

細胞集団のように自ら動く要素の集団はアクティブマターと呼ばれ、多様な協同現象を示す。本稿では、運動性誘起相分離と呼ばれるアクティブマターの凝集現象を概説した後、空間異方性をもつアクティブマターの協同現象を理論的に調べた我々の研究を紹介する。特に、空間異方性をもつ単純なアクティブマターモデルでは、運動性誘起相分離のクラスターサイズの成長則が異方的になることや、相分離していない状態でも密度の長距離相関が現れることを説明する。

Phase separation and long-range correlation in self-propelled particles with repulsive interactions

Kyosuke Adachi^{1,2}

¹ RIKEN Center for Biosystems Dynamics Research (BDR)

² RIKEN Interdisciplinary Theoretical and Mathematical Sciences Program (iTHEMS)

Abstract

Active matter, a crowd of self-propelled elements like cell population, shows diverse collective phenomena. In this article, we review the aggregation of active matter called motility-induced phase separation and our theoretical work on collective phenomena of active matter with spatial anisotropy. In active matter models with anisotropy, the growth law in motility-induced phase separation is anisotropic, and long-range density correlation appears without phase separation.

1 はじめに

細胞のように自ら動く要素の集まりはアクティブマターと呼ばれ、その物理的性質の研究が盛んに行われている [1]。鳥や魚の群れといった生物個体の集団から、細胞やバクテリアの集団に至るまで、幅広いスケールの現象がアクティブマター研究の対象となってきた。また、自ら動く力（自己駆動力）を導入した人工粒子も開発されており、より制御された環境下での実験研究も進められている。

アクティブマターでは、動物の群れのように要素が向きをそろえて集団運動する flocking や、細長い細胞の集団のように要素形状の方向がそろったアクティブネマチック秩序など、自己駆動力の効果が

鍵となる多様な協同現象が見つかってきた。このような協同現象のメカニズムや普遍的性質を明らかにするため、単純なモデルを使った理論研究も盛んに行われている [2]。

本稿では、アクティブマターの協同現象の中でも、一部のバクテリア [3] や人工粒子 [4] で観測されている凝集現象に注目する。このような凝集は自己駆動力に起因すると考えられており、水と油の相分離のように密度の非一様性が自発的に生じる現象であるため、運動性誘起相分離と呼ばれている。以下では、単純なモデルに基づいて運動性誘起相分離を紹介し (2 節)、自己駆動力が異方的な場合の協同現象を調べた我々の研究 [5] について述べる (3 節)。

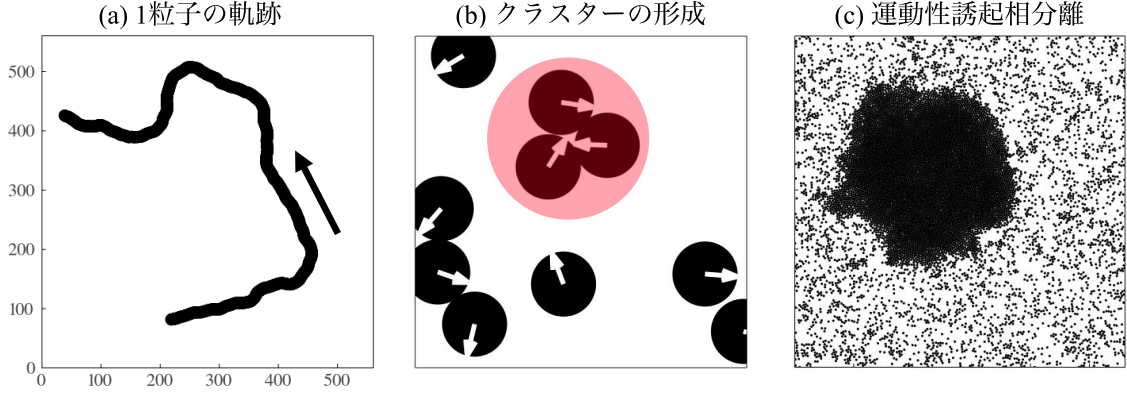


図 1: アクティブ Brown 粒子モデルにおける運動性誘起相分離。(a) 1 粒子の典型的な軌跡。(b) 10 粒子系におけるクラスター形成のスナップショット。(c) 10000 粒子系における運動性誘起相分離のスナップショット (初期状態はランダムな粒子配置、平均充填率 0.4、時刻 $t = 9500$)。

2 運動性誘起相分離

運動性誘起相分離のミニマルモデルとしては、自己駆動力および複数の粒子が同じ場所を占有できない性質 (斥力相互作用) を取り入れたアクティブ Brown 粒子モデル [6] がよく調べられている。二次元系のモデルでは、粒子 i ($1 \leq i \leq N$) の位置 $\mathbf{r}_i(t)$ と自己駆動力の向き $\theta_i(t)$ が次の運動方程式に従うとする。

$$\frac{d\mathbf{r}_i(t)}{dt} = \mathbf{v}_i(t) + \mu \sum_{j(\neq i)} \mathbf{F}_{ij} + \sqrt{2D} \boldsymbol{\xi}_i(t) \quad (1)$$

$$\frac{d\theta_i(t)}{dt} = \sqrt{2D_r} \xi_i^\theta(t) \quad (2)$$

ここで、 $\mathbf{v}_i = (v_0 \cos \theta_i, v_0 \sin \theta_i)$ は自己駆動力を表す (v_0 は正の定数)。式 (1) の右辺第二項と第三項はそれぞれ粒子間の斥力相互作用と並進ノイズを表し、これらの項のため各粒子の動く速さは一般に v_0 からずれる。式 (2) は回転拡散を表し、一般に回転の拡散係数 D_r と並進の拡散係数 D は独立とする。また、 $\boldsymbol{\xi}_i$ および ξ_i^θ は平均ゼロの Gauss ノイズで、 $\langle \xi_i^a(t) \xi_j^b(s) \rangle = \delta_{ij} \delta_{ab} \delta(t-s)$ を満たす ($a, b \in \{x, y, \theta\}$)。粒子間斥力として、ここでは先行研究 [6] と同様に $\mathbf{F}_{ij} = k(2a - r_{ij}) \hat{\mathbf{r}}_{ij} \Theta(2a - r_{ij})$ とする。ここで、 $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ 、 $\hat{\mathbf{r}}_{ij} = (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)/r_{ij}$ 、 $\Theta(x)$ は Heaviside のステップ関数、 a は相互作用距離である。以下では周期境界条件を仮定し、先行研究 [6] と同様に並進ノイズを無視して $D = 0$ とし、 $10/(\mu k)$ と a をそれぞれ時間と長さの単位にとる。

以下、自己駆動力が十分大きい場合 ($v_0 = 1$, $D_r = 0.005$) を考える。まず、1 粒子系における典型的な粒子の軌跡をプロットしたのが図 1(a) であり、粒子は

D_r^{-1} 程度の時間自己駆動力の向きに進み続け、回転拡散によって徐々に向きを変えることがわかる。次に、10 粒子程度の系では、図 1(b) に示すような数粒子からなるクラスターが作られたり壊れたりする。図 1(b) の白色の矢印は自己駆動力の向き ($\cos \theta_i, \sin \theta_i$) を表しており、自己駆動力により粒子が直進しようとする効果と斥力相互作用により粒子同士がすり抜けられない効果が相まってクラスターが作られている。このようなクラスターは、粒子数が十分多くかつ密度が高い場合には巨視的なサイズにまで成長し、図 1(c) に示すような運動性誘起相分離が起こる。

ここで概説したように、運動性誘起相分離は自己駆動力に起因した現象であり、粒子同士を直接引き合わせる相互作用を必要としないのが特徴的である。対照的に、平衡系の気液相分離や液液相分離は基本的に粒子同士の引力相互作用に起因しており、運動性誘起相分離とは出現メカニズムが異なる。このようなメカニズムの違いにも関わらず、理論モデルのシミュレーションや平均場理論により、運動性誘起相分離の相図 [7] やクラスターサイズの成長則 [8] などには平衡系の相分離との共通点が現れることが明らかになってきている。一方、運動性誘起相分離では、密度などのパラメータによってはクラスターが巨視的なサイズにまで成長しないマイクロ相分離が起こる可能性 [9] や相分離臨界点の普遍性クラスが平衡系のそれとは異なる可能性 [10] も指摘されており、どのような条件下で平衡系との共通点が現れるのかはこれから明らかにされていくと考えられる。

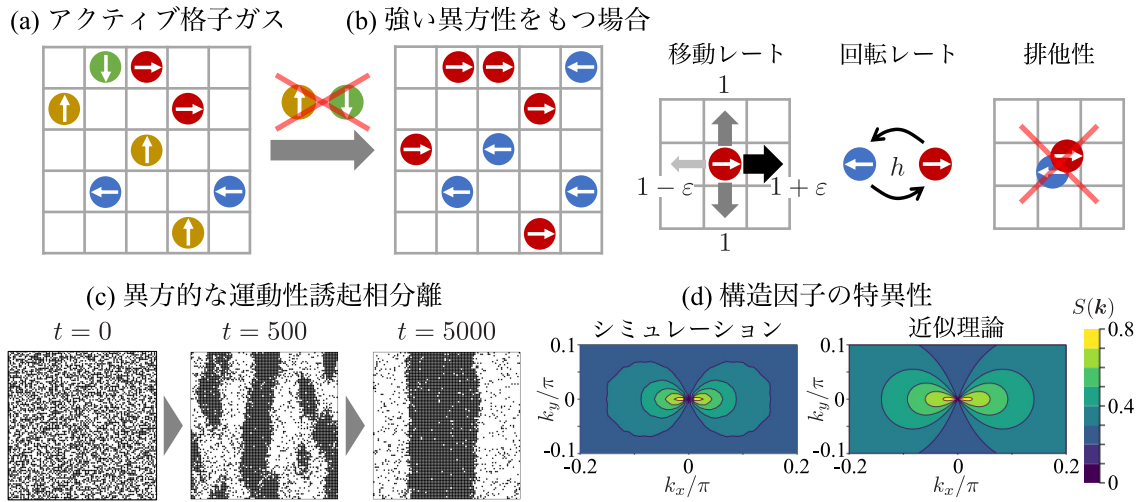


図 2: 異方的な自己駆動力をもつアクティブ格子ガスモデルにおける運動性誘起相分離と長距離相関。(a) アクティブ格子ガスモデル。(b) 強い異方性を想定し、自己駆動力の向きを左右のみに制限したモデル。(c) 自己駆動力が大きい場合 ($\varepsilon = 0.8$) の異方的な運動性誘起相分離のスナップショット (初期状態はランダムな粒子配置、 $\rho_0 = 0.5$ 、システムサイズ 100×100 、 t は Monte Carlo ステップ)。(d) 自己駆動力が小さい場合 ($\varepsilon = 0.2$) にシミュレーションと近似理論で求めた構造因子の等高線プロット (定常状態、 $\rho_0 = 0.6$ 、システムサイズ 200×200)。 $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ での特異性は密度の長距離相関を反映している。

3 異方的な運動性誘起相分離と長距離相関

運動性誘起相分離は、これまで主に空間等方的な系を対象に実験・理論研究が進められてきた。一方、例えば培養細胞を考えると、細胞の接着基板に配向性を導入すれば、自己駆動力の向きに空間異方性が生じる。対称性の観点からは、このように異方的な自己駆動力をもつ系と外場駆動系という非平衡多粒子系には、共通の巨視的性質が現れる可能性がある。これらの系の間関係を明らかにできれば、理論的に提案されてきた外場駆動系の性質をアクティブマターの実験系を使って検証することにもつながると期待される。そこで我々の研究では、異方的な自己駆動力をもつアクティブマターの理論モデルを考え、運動性誘起相分離や密度相関の性質を調べた [5]。

できるだけ単純なモデルとして、アクティブ Brown 粒子モデル (式 (1)、(2)) と類似のメカニズムで運動性誘起相分離が起こるアクティブ格子ガスモデル [11] (図 2(a)) を採用し、自己駆動力の向きを左右のみに制限することで、強い異方性をもつ場合を考える (図 2(b))。このモデルでは、正方向格子に存在する粒子系を考え、各粒子は自己駆動力の向きに対応するスピン自由度 $s = \{\leftarrow, \rightarrow\}$ をもつとする。各粒子の位置とスピン自由度は Markov ジャンプ過程

に従って時間変化するとし、状態間の遷移レートとしては、並進拡散に対応する最近接サイトへの移動レート (1 と取る)、自己駆動力に対応するスピン方向への移動レート ε 、および回転拡散に対応するスピンの回転レート h を考える。さらに、斥力相互作用に対応する排他性を仮定し、複数の粒子は同一サイトを占有できないとする。以下では、回転レートを $h = 0.025$ と固定する。

シミュレーションで相図を調べると、自己駆動力 ε が大きく、かつ平均密度 (1 サイト当りの平均粒子数) ρ_0 が大きいと、相分離が起こることがわかった。図 2(c) のように、クラスターは自己駆動力の向きとは垂直の上下方向に伸びるように成長する。これは、左右方向の自己駆動力によって堆積した粒子が、上下方向へと拡散していくために起こると考えられる。また、 $\rho_0 = 0.6$ 、 $\varepsilon = 0.9$ のときの密度相関関数の解析からは、左右方向・上下方向の典型的なクラスターサイズは経過時間 t に対してそれぞれ $R_x \sim t^{\alpha_x} \cdot R_y \sim t^{\alpha_y}$ ($\alpha_x \approx 0.29 \cdot \alpha_y \approx 0.58$) のようにふるまうことがわかった。 $\alpha_x < \alpha_y$ となることはクラスターサイズの成長とともにアスペクト比 R_y/R_x も成長することを意味しており、クラスターが上下方向に伸びることと整合的である。成長則の指数 α_x 、 α_y の普遍性や解析的表式は今のところ明らかでないが、上下方向には正常拡散が支配的に効

くとすれば、長時間経過後の α_y は 0.5 になるのが自然だと予想される。

次に、 ε が小さい領域では、相分離は起こらないが、密度相関関数 $C(\mathbf{r}) = \langle \delta\rho(\mathbf{r}_0 + \mathbf{r})\delta\rho(\mathbf{r}_0) \rangle$ の Fourier 変換である構造因子 $S(\mathbf{k})$ は図 2(d) 左のような特徴的なパターンを示すことがわかった。ここで、 $\rho(\mathbf{r})$ をサイト \mathbf{r} における粒子数として、 $\delta\rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) - \rho_0$ は局所的な密度ゆらぎ、 $\langle \dots \rangle$ は \mathbf{r}_0 の選び方およびサンプルに関する単純平均を表す。図 2(d) 左より、 $S(k_x = 0, k_y \rightarrow 0) < S(k_x \rightarrow 0, k_y = 0)$ となり、構造因子 $S(\mathbf{k})$ は $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ に特異性をもつことがわかる。 $S(\mathbf{k})$ がこのような特異性をもつと、逆 Fourier 変換によって長距離での密度相関関数は $C(x, y) \sim (-x^2 + y^2)/r^4$ のようにべき減衰を示すことがわかり、相分離していない状態でも長距離相関が現れることを意味している。

ここで得られた $S(\mathbf{k})$ の特異性がどの程度一般的に現れるのかを調べるため、ゆらぐ流体方程式を導出し、密度ゆらぎが小さいと仮定して線形化を行うことで、近似的に構造因子の解析的な表式 $S_{\text{app}}(\mathbf{k})$ を得た。結果のみ記すと、 $\tilde{\rho}_0 = 1 - \rho_0$ とおけば、

$$S_{\text{app}}(\mathbf{k}) = \rho_0 \tilde{\rho}_0 \frac{(2h + \tilde{\rho}_0 k^2)k^2 + 4\varepsilon^2 \tilde{\rho}_0 k_x^2}{(2h + \tilde{\rho}_0 k^2)k^2 - 4\varepsilon^2 \tilde{\rho}_0 (2\rho_0 - 1)k_x^2} \quad (3)$$

となることがわかった。式 (3) をプロットしたのが図 2(d) 右で、シミュレーションの結果 (図 2(d) 左) と比べると、定量的なずれはあるものの $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ 付近での特異性が再現されていることがわかる。また、 $S_{\text{app}}(\mathbf{k})$ の ε 依存性から、異方的な自己駆動力 ε さえあれば、回転レート h や平均密度 ρ_0 の詳細によらず一般的に $S(\mathbf{k})$ の特異性が現れると期待されることがわかった。

上述の $S(\mathbf{k})$ の特異性や対応する密度の長距離相関は、自己駆動力に異方性があれば幅広いアクティブマターモデルで現れると期待され、例えばアクティブ Brown 粒子モデルでも同様の現象が見られることを確認している。また、同じタイプの $S(\mathbf{k})$ の特異性は、外場駆動系と呼ばれる、電場のような一様外場のもとで運動する粒子系のモデルでも現れることが知られている [12]。そのため、本研究の結果は、アクティブマターに異方性を導入することで、外場駆動系と共通の協同現象 (構造因子の特異性や密度の長距離相関) が現れることを示唆している。

4 まとめ

本稿では、近年研究が進められている運動性誘起相分離について概説し (2 節)、空間異方的な自己駆動力によって引き起こされる相分離や長距離相関に関する我々の研究を紹介した (3 節)。今後はより幅広くアクティブマターの協同現象と他の非平衡多粒子系の協同現象との関係を明らかにしていきたい。

謝辞

本稿の研究の一部は、高三和晃氏、川口喬吾氏、中野裕義氏との共同研究であり、JSPS 科研費 JP20K14435 の助成を受けたものです。

参考文献

- [1] G. Gompper et al., J. Phys. Condens. Matter **32**, 193001 (2020).
- [2] H. Chaté, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **11**, 189 (2020).
- [3] G. Liu et al., Phys. Rev. Lett. **122**, 248102 (2019).
- [4] I. Buttinoni et al., Phys. Rev. Lett. **110**, 238301 (2013).
- [5] K. Adachi, K. Takasan, and K. Kawaguchi, Phys. Rev. Research **4**, 013194 (2022).
- [6] Y. Fily and M. C. Marchetti, Phys. Rev. Lett. **108**, 235702 (2012).
- [7] A. P. Solon et al., Phys Rev E **97**, 020602 (2018).
- [8] X.-Q. Shi et al., Phys. Rev. Lett. **125**, 168001 (2020).
- [9] E. Tjhung, C. Nardini, and M. E. Cates, Phys. Rev. X **8**, 031080 (2018).
- [10] F. Caballero, C. Nardini, and M. E. Cates, J. Stat. Mech. **2018**, 123208 (2018).
- [11] S. Whitelam, K. Klymko, and D. Mandal, J. Chem. Phys. **148**, 154902 (2018).
- [12] B. Schmittmann and R. K. P. Zia, Phys. Rep. **301**, 45 (1998).