22 液体および結晶界面に関する数値的方法による研究

Numerical Studies of the Fluid and Crystalline Membranes

○正 鯉 渕 弘 資¹

Hiroshi KOIBUCHI : Ibaraki College of Technology, Nakane 866, Hitachinaka, Ibaraki 312-8508

Key Words: Triangulation, Membrane, Statistical Mechanics, Monte Carlo, Phase Transition, Critical Exponent

1 序論

筆者らは気体と液体または液体と液体を隔てる界面のモ デルの持つ相転移現象を数値実験的に研究している^(1,2,3,4)。 例えば水と油が容器に入っているとすると、その境界は2 つの液体が混じり合わなければ「曲面」を形成する。その 曲面の変形、あるいは変形が進んで曲面という状態を保て なくなるような変形、が2つの液体の混合を引き起こすと 見れば液体の混合現象は、界面という「2次元の広がりを 持った物質の力学」という観点からの研究になる。その広 がった物体を数値的に研究するとき、曲面の離散化によっ て自然に点状の粒子が現れ、従って多粒子系の力学が現れ る。そうすると統計力学的な観点からも自然にその相転移 現象が興味深いものとなる。

そこで,現実の界面の持つであろう一般的な性質(表面 張力と曲げ剛性)⁽⁵⁾を持った界面のモデルを定義して,モ ンテカルロシミュレーション(MC)の方法で,相転移の 有無を研究する。本講演では比熱の数値的測定から,2つ のモデル(液体⁽³⁾および結晶界面⁽⁴⁾)が2次の相転移を持 つことを示す。更に,MCで得られた臨界点近くでの界面 の状態から,CGによってアニメーションを作成し,界面 モデルの持つ2次の相転移現象を可視化出来るかどうか試 みる。

2 界面のモデル

界面のモデル化のための「界面の離散化」を図1に示す。 図1(a),(b)のように,界面をそれが隔てている液体とは独 立なものと考え,更に,界面が容器と接触しているところ



Fig.1. Discretization of interface between two distinct fluids.

は特別であるから、ここを除くために (c),(d),(e) のように 境界を一点に縮める。次に、この界面を計算機で扱うため に (f) のように3角形格子で分割する。数値的には球面上 に一様乱数でばらまかれた N 個の点を Voronoi 3角形分 割で連結する。このように有限個の3角形格子で分割され た界面は、各3角形の頂点(その位置を \vec{X}_i と書く)を界

¹email address: koibuchi@cc.ibaraki-ct.ac.jp

面分子とする分子数 N 個の統計力学的多粒子系になる。

実際の界面は、面積をできるだけ小さくしようとする性質(表面張力)と、同じ面積ならば表面をできるだけ滑らかにしようとする性質(曲げ剛性)を持つと考えられるから、 モデル界面のエネルギー関数としては、面積エネルギー S₁ と曲げエネルギー S₂の1次結合

$$S = S_1 + b S_2, \quad S_1 = \sum_{\Delta} A_{\Delta}, \tag{1}$$
$$S_2 = \sum_{\Delta} \frac{1}{A_{\Delta}} \sum_{i=1}^3 l_i^2 \left(1 - \cos \theta_i\right)$$

を考える。 A_{Δ} は1つの3角形の面積である。この S_2 は, 界面の折れ曲がり具合を計る量⁽³⁾(文献(2)では別の定義 を用いている)であり、3角形の大きさとボンドの長さに 応じて重み付けして定義されている。 S_2 において \sum_j は, 図1に示す3角形 Δ の3つの辺に関する和を表し、 θ_j は 辺 jを共有する2つの3角形の間の角度である。



Fig.2. Three triangles arround the reference one. Cubes represent the vertices.

このとき, S は分子の位置 X に依存するから, このモデ ルの力学変数は X になるが, 更に, S は3角形分割の仕 方 g にも依存するので g の自由度も力学変数になり得る。 ここで, 力学変数が「分子の位置 X と3角形分割 g」で あるものを「液体界面」と呼び, 力学変数が「分子の位置 X」のみであるものを「結晶界面」と呼ぶ。従って, 液体 界面モデルの分配関数は

$$Z(N) = \sum_{g} \int \prod_{i=1}^{N-1} d\vec{X}_i \, \exp(-S(X,g))$$
(2)

となる。ここで、S(X,g) は $S_1 \ge S_2$ が変数 $X \ge g$ に依存することを示す。また、 $\prod_{i=1}^{N-1}$ は N 番目の分子(これは分子でなく境界に対応する)を固定してその自由度を除くことを意味し、 \sum_g はあらゆる 3 角形分割について和を とることを意味する。一方、結晶界面のモデルでは分配関数は

$$Z(N,g) = \int \prod_{i=1}^{N-1} d\vec{X}_i \exp(-S(X,g))$$
(3)

となる。ここで, Z(N,g) は分子数 N と3角形分割 g が 固定されていることを意味する。なお, MC法の初期界面 として,結晶界面では各点から出ているボンド数が一様に なるように, N 個の点を球面上にできるだけ一様に分布さ せて生成したものを使う。

[Na00-4] 熱流体系および固体系のミクロシミュレーションに関する合同シンポジウム・ 第5回分子動力学シンポジウム講演論文集〔'00-3-3,4,浜松〕

3 MC法とその数値実験結果

任意の物理量 Q の平均値 $\langle Q \rangle$ は液体界面の場合,式(2) の Z(N) により

$$\langle Q \rangle = \sum_{g} \int \prod_{i=1}^{N-1} d\vec{X}_i Q \exp(-S(X,g))/Z(N) \qquad (4)$$

と定義される。1分子当たりの面積エネルギーの平均値 $\langle S_1 \rangle / N$ が $\frac{3}{2}$ となることに注意すれ⁽³⁾ ば、界面の面積エネ ルギー S_1 の平均値は分子数 N に比例することになる。即 ち、分子数が一定ならばどんな (X と g の)状態でも面積 は一定値になる。これに対し曲げエネルギー S_2 は一般に は状態 X,g が異なれば異なった値になる。この事情は、結 晶界面のモデルに於いても同様である。

式 (4) の平均に寄与する状態 X, g はメトロポリスMC 法で数値的に生成し、その有限個の状態 $\{X_t, g_t\}$ (時系列 データ)から、物理量の平均値を時系列平均

$$\langle Q \rangle = \sum_{t} Q(X_t, g_t) / \sum_{t} 1$$
 (5)

によって求める。ただし、結晶界面では3角形分割 g は固定する。MC法においては、図3に示す (a) の分子位置の移動過程と (b) のボンドの flip (または3角形再分割) 過程 が力学変数 $X \ge g$ を update する。結晶界面では g を固



Fig.3. Basic MC processes: (a) displacement of a molecule, (b) flip of a bond.

定するから,図3(a)の過程のみが界面を変形させる。

図 4(a) には液体界面モデルの曲げエネルギー S_2 の揺ら ぎとしての比熱

$$C = \frac{b^2}{N_{\rm T}} \left(\langle S_2^2 \rangle - \langle S_2 \rangle^2 \right), \tag{6}$$

更に,図4(b)にはそのピーク値 C_{max} 対3角形の数 $N_{\text{T}}=2N-4$ を示す。図4の結果は文献(3)のデータに少しの 追加計算を実施して得られたものであるが、その値は文献 (3)のものとほぼ同じである。この計算に要した最大のM C反復回数(sweeps)は、各Nで $C = C_{\text{max}}$ のときである が、分子数N=150に対して 8.5×10^7 sweeps,N=300に 対して 2×10^8 sweeps,N=600に対して 4.1×10^8 sweeps, N=1000に対して 4.4×10^8 sweeps である。図4(b)の直線 は、N=150で得られた C_{max} を除いた残りの3個の C_{max} に対し、 $C = -\alpha (N_{-})^{\circ}$

$$C_{\max} = a \left(N_{\mathrm{T}} \right)^{\sigma} \tag{7}$$

のパラメータ $a \ge \sigma$ を最小2乗法で fitt したものである。 ここで、 σ は臨界指数と呼ばれ、図 4(b) のデータから

$$\sigma = 0.71 \pm 0.06$$
 (fluid membrane) (8)

を得る。σは2次の相転移のときσ<1となることが知ら れており,式(8)の結果は液体界面モデルが2次の相転移 を持つことを強く示唆している。

図5には結晶界面モデルの比熱とそのピーク値を示す。 この計算に要した最大のMC反復回数 (sweeps) は分子数 N=100に対して 3×10^7 sweeps, N=200に対して 3×10^8



Fig.4. MC results of the fluid membrane. (a) Specific heart C vs. bending rigidity b, (b) $C_{\rm max}$ vs. $N_{\rm T}=2N-4$ in log-log scale.



Fig.5. MC results of the crystalline membrane. (a) Specific heart C vs. bending rigidity b, (b) C_{max} vs. $N_{\text{T}} = 2N - 4$ in log-log scale.

sweeps, N=340 に対して 7×10^8 sweeps, N=600 に対して 7×10^8 sweeps, N=1200 に対して 8×10^8 sweeps である。 臨界指数は図 5(b) の 5 個のデータを式 (7) で fitt すると

 $\sigma = 0.33 \pm 0.01$ (crystalline membrane) (9) となる。この結果 $\sigma < 1$ は,結晶界面のモデルが液体界面 の場合と同様に 2 次の相転移を持つことによるものと考え られる。ただし,式(9)の値は最終的なものではない⁽⁴⁾。ま た,結晶界面の場合 3 角形分割が固定であるから,MC計 算では格子が異なっても分子数 N が同じならば得られる 比熱のピーク値はほぼ同じ値になることを確認しなければ ならない。

4 要約と結論

MC法で曲げエネルギーの揺らぎとしての比熱を計算し, 2種類の界面モデルが2次の相転移を持つことを確認した。 臨界点での界面の(相転移の)様子も可視化(ビデオで発 表)した。今後は文献(2)のタイプの界面モデルについて, 分子数とMC反復回数を大きくして,相転移の有無を確認 したい。この研究は平成10,11年度文部省・日本学術振興 会科学研究費補助金(基盤研究(C)課題番号2-414-4504-10650191)の援助を受けた。

文 献

- (1) 鯉渕, モンテカルロシミュレーションによる1次元界面の研究, 機論, 58-555, B(1992), 3401.
- (2) 鯉渕、2次元界面のモンテカルロシミュレーション、機論、62-593、 B(1996), 173.
- (3) H.Koibuchi and M.Yamada, "Phase Transition of a Model of Fluid Membrane", Int.J.Mod.Phys.C に掲載予定.
- (4) H.Koibuchi and M.Yamada, 準備中.
- (5) F.David ," Introduction to the Statistical Mechanics of Random Surfaces and Membranes", in "Two Dimensional Quantum Gravity and Random Surfaces", D.J.Gross, T.Piran and S.Weinberg Eds. 1992, World Scientific.