

過渡結合モデルにおける不均一なダイナミクス

(名古屋大学大学院工学研究科) 畝山多加志

【はじめに】

近年、高分子のからみあいを再現する粗視化モデルとして、高分子間に動的に生成消滅する過渡的なバネを導入するスリップスプリングモデル[1]が注目されている。スリップスプリングモデルをさらに粗視化し、1つの高分子を1粒子とするモデルとして過渡結合モデル（あるいは応答粒子ダイナミクス、RaPiD）[2]がある。過渡結合モデルは静的には理想気体でありながら動的には複雑な緩和や拡散挙動を示すモデルであり、単純なモデルであるにも関わらずからみあった高分子の粘弾性挙動をよく再現できる。最近の研究から、過渡結合モデルは過冷却液体で見られるような動的不均一性を示すことがわかってきた[3]。本講演では、過渡結合モデルの理論構造や運動の不均一性について議論する。

【モデルと結果】

多数の粒子からなる系を考える。粒子は基本的に Langevin 方程式に従って運動する。粒子間には一定確率で動的に線形バネが生成される。また、詳細釣り合いを満たすように一定確率でバネが消滅する。さらに、バネによって粒子間に実効的に引力が働くので、引力をちょうど打ち消すような斥力ポテンシャルを課す。(この斥力の導入により、バネの自由度を統計力学に消去すると静的には理想気体に帰着することが保証される[2].)

上記の過渡結合モデルを用いて数値シミュレーションを行ったところ、バネの効果で遅い緩和が生じるだけでなく、粒子の拡散挙動に明確な不均一性が生じる様子が見られた。過渡結合モデルの挙動は次元にほとんどよらず、不均一性は1次元系でも確認できる。図1に1次元系の粒子の軌跡の例を示す。バネのない単純な Brown 粒子の場合と異なり、粒子がまとまって協同的に動いている様子が観察できる。(これはある種のガラスのモデルにおける時空の「泡」[4]に類似している。) また、このような不均一性は非 Gauss 性パラメータや拡散性のゆらぎ[5]からも観測される。

【参考文献】

- [1] T. Uneyama and Y. Masubuchi, *J. Chem. Phys.* **137**, 154902 (2012).
- [2] T. Uneyama, *J. Chem. Phys.* **150**, 024901 (2019); P. Kindt and W. J. Briels, *J. Chem. Phys.* **127**, 134901 (2007).
- [3] Y. Hachiya, T. Uneyama, T. Kaneko, and T. Akimoto, *J. Chem. Phys.* **151**, 034502 (2019).
- [4] R. L. Jack, J. P. Garrahan, and D. Chandler, *J. Chem. Phys.* **125**, 184509 (2006).
- [5] T. Uneyama, T. Miyaguchi, and T. Akimoto, *Phys. Rev. E* **92**, 032140 (2015).

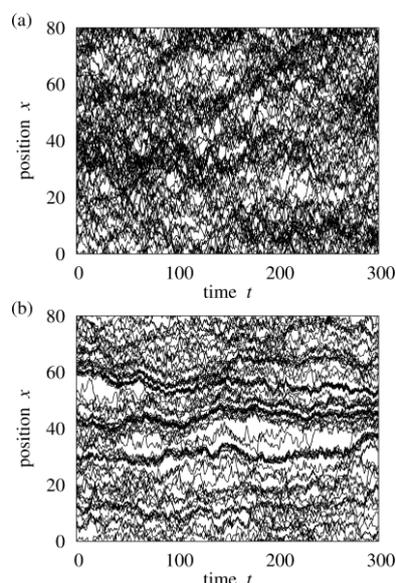


図 1: 1次元(a) Brown 粒子と (b)過渡結合モデルの軌跡。