

平成 30 年 6 月 27 日現在

機関番号：14301

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2015～2017

課題番号：15K17737

研究課題名(和文) ソフトマターにおける非平衡相転移の非摂動的な解析

研究課題名(英文) Nonperturbative analysis on non-equilibrium phase transition in soft materials

研究代表者

藪中 俊介 (Yabunaka, Shunsuke)

京都大学・福井謙一記念研究センター・特定研究員

研究者番号：60749852

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：気体液体間の状態の遷移に代表される、相転移現象は、平衡状態においてはよく理解されているが、エネルギーや物質の流れが非平衡環境ではまだ理解が進んでいない。そのため私は、その理論的解析に必要な連続体方程式を、細胞組織や自己推進粒子系に対して構築するとともに、相転移現象の普遍性を分類するために有用である繰り込み群の手法の発展にも取り組んだ。

研究成果の概要(英文)：Phase transition phenomena in equilibrium environments are well understood, but phase transition phenomena in non-equilibrium environments, where energy and material flows exist, are not well understood. In order to investigate phase transition phenomena in non-equilibrium environments, I constructed several continuum equations for active materials, such as cellular tissues and self-propelled particles, and developed the method of renormalization group, which is useful for defining universality classes of phase transition.

研究分野：ソフトマター

キーワード：繰り込み 多重臨界点 細胞組織 連続体理論 自己推進粒子

1. 研究開始当初の背景

(1) 化学反応系、自己推進粒子系、細胞組織など非平衡状態において、平衡系の相転移現象に類似したパターンの転移現象（非平衡相転移）は数多く知られている。しかし、平衡系における相転移現象が、かなり詳しく分類されているのに比べて、非平衡相転移がどのように分類されるかはかなり未知の部分が多かった。

(2) 特に、自己推進粒子系や細胞組織などのアクティブマターと呼ばれる物質群に関しては、理論的解析のもととなる連続体方程式も定式化が十分なされていない系が多数あった。

(3) 一方、化学反応系などにおいては、繰り込み群の解析により、いくつかの普遍性クラスが発見されそれらを記述する場の理論が特定されている。このような観点から、繰り込み群の技法の発展も非平衡相転移の理解に重要なことが示唆されていた。

2. 研究の目的

アクティブマターなどに対する連続体方程式の構築を進めるとともに、非平衡相転移を記述するための繰り込み群の技法を様々な方面において発展させる。特に、非平衡相転移に関する研究に最近数多く用いられている、非摂動繰り込み群に着目し、その計算精度の向上や、新しい普遍性クラスの発見を試みる。

3. 研究の方法

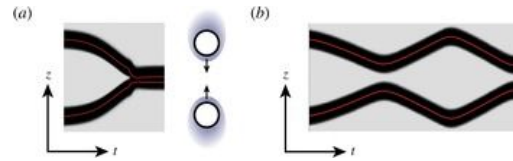
自己推進粒子系や細胞組織などのアクティブマターに対し、これまでのソフトマター物理で用いられていた2元混合系や液晶の流体力学方程式を化学エネルギーの消費の効果を考慮に入れて拡張することで連続体方程式を構築した。

また、非摂動繰り込み群理論に関しては、技法を学ぶ過程で、平衡系で最も簡単な系である0(N)モデルの臨界現象に関し、いかなる次元、成分数においてもガウス固定点に一致しないという意味で非摂動的な固定点が存在するという非自明な結果を発見した。さらにこれより少し複雑な0(N)×0(2)モデルにおいて同様の現象が存在するかを調べた。

4. 研究成果

(1) まず、私が以前構築した自己推進する液滴のモデルを、液滴多体系に適用する第一歩として、東北大 AIMR の義永那津人准教授とともに、2体の液滴の正面衝突に関する解析を行った。モデルの流体方程式を液滴の重心自由度に縮約を行うことにより、分岐点の近傍、液滴間の距離が大きい場合に解析的な液滴の運動方程式を導出した。またモデルの流体方程式を直接数値計算することも行った。その結果、分岐点近傍では液滴の弾性的な衝突が起こり、より粘性率を下げて分岐点

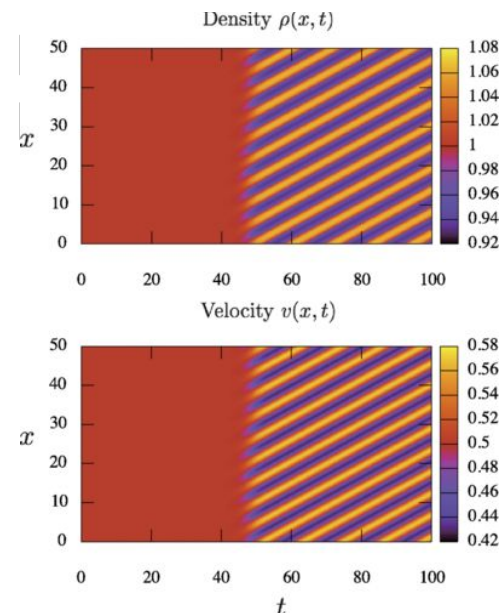
から離れると液滴の融合が生じることを示した。



液滴の衝突ダイナミクスの時空間プロット。(左) 粘性率が低く分岐点から離れている場合 (右) 分岐点の近くの場合

2) また、細胞組織は、細胞より大きなスケールで見ると、ソフトな弾性体であるとともに、細胞の自発運動、変形極性の異方性、アクティブなストレスなどこれまでのソフトマター物理では考慮に入られていない特徴を持つ。細胞組織の挙動を理解することは基礎科学的にも、医療への応用面でも重要性は極めて高いが、このような特徴を統一的に記述する理論はこれまで存在していなかった。

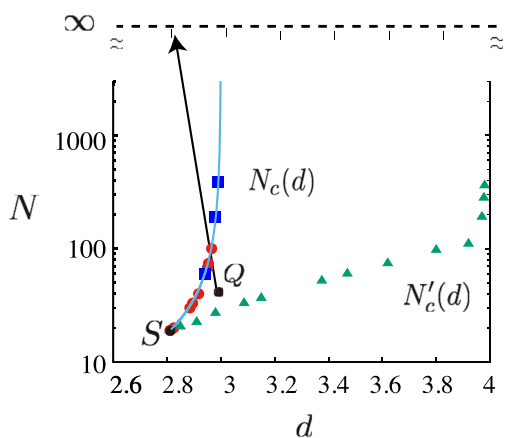
私は、キュリー研究所の Philippe Marcq 博士と共に、これまで細胞骨格のパターンダイナミクスの記述に成功しているアクティブゲル理論を拡張することにより、空間1次元でこのような特徴を統一的に記述できる連続体方程式を構築し、最も単純な応用例として組織成長速度や密度波の理論的記述を行った。



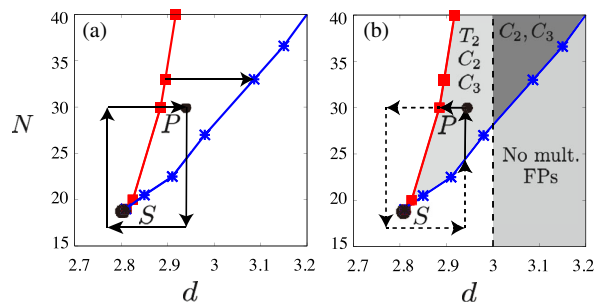
我々の細胞組織の連続体モデルから得られた進行波の時空間パターン（空間1次元の場合で、密度場（上）、速度場（下）を示す）

(3) パリ第6大学の Bertrand Delamotte 博士とともに、平衡系で最も簡単な系である $O(N)$ 模型の臨界現象に関し、いかなる次元 d 、成分数 N においてもガウス固定点に一致しないという意味で、(特に 3 次元では、成分数が 20 程度より大きな場合)、これまでに知られていなかった非摂動的な多重臨界固定点があるいくつかの存在することを発見した。それらは、 (d, N) の空間の中である領域内で二つのリーマン面が重なっているような複雑な構造を持ち、固定点解を追跡しながら、ある特別な点の周りを一周すると、二つの固定点それぞれ入れ替わるという”double valued structure”を発見した。 $O(N) \times O(2)$ 模型に関しても、これまでに知られていなかった非摂動的な固定点を見つけた。

また、これらの非摂動的な固定点がなぜ、これまでの Large- N 解析 (非摂動的な方法だと考えられている) で得られなかったのかということに関しても考察し、 $O(N)$ 模型では、Large- N の極限でプロパゲータの特異性、 $O(N) \times O(2)$ 模型では、結合定数がこれまでの Large- N 解析で用いられたのと異なるスケールリングを示すことを発見した。現在、これらの理由により Large- N での挙動がどのように変わるかについてまとめた論文を準備中である。

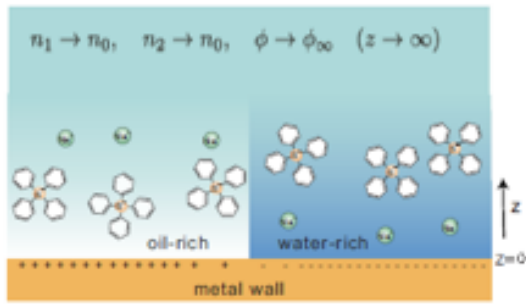


$d=3$ で、ガウス固定点から分岐する 3 重臨界固定点 T_2 を、次元を下げながら追跡すると成分数が 20 より大きな場合には、ある次元 $d_c(N)$ において、今まで知られていない非摂動的な固定点 C_3 (3 方向不安定) と衝突することで消滅する。さらに、 C_3 を次元を上げながら追跡すると $d'_c(N)$ において、さらに別の非摂動的な固定点 C_2 (2 方向不安定) と衝突することで消滅する。



(左) 点 P から出発し、2つの曲線 $N_c(d), N'_c(d)$ が交わる点 S の周りを、3 重臨界固定点 T_2 を時計回りに追跡すると、連続的に固定点解を追跡することができ、点 P に戻ってくる際には、 C_2 として戻ってくる。(右) 点 P から出発し、反時計回りに T_2 を追跡すると、 $N_c(d)$ 上で、 C_3 と衝突し、複素解に変化する。点線で示されるように、複素解をさらに追跡すると、 $N'_c(d)$ 上で C_2 として、実解に戻り P に到着する。また、各領域にどの多重臨界固定点が存在するかを示している。

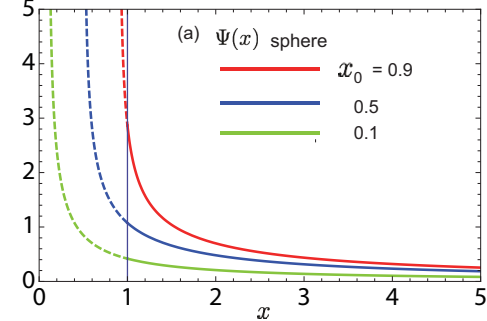
4) 生体など、イオンと溶媒の相互作用が重要な系は数多い。一般には水などの高い極性溶媒中では、陽イオン、陰イオンの溶媒和の違いの効果が存在している。我々は、このような系の中で最も簡単な例の一つとしてイオンを含む、水油二元混合系の金属壁付近の振る舞いを研究した。その結果、表面電荷の関与する新しい表面相転移を発見し、ある平均表面電荷密度の範囲では、壁面上の一様状態が不安定になり、次ページの図のように二つの異なる電気二重層が相共存することを示した。さらに、我々はこの現象がこれまで知られていない新しい表面相転移現象の帰結として理解できることも示した。この研究は、相転移理論からの興味のみならず、コロイドの安定性に重要である電気二重層の研究に新しい局面を切り開く結果であるとして、査読者から高く評価され、Phys. Rev. Lett. 誌に掲載された。



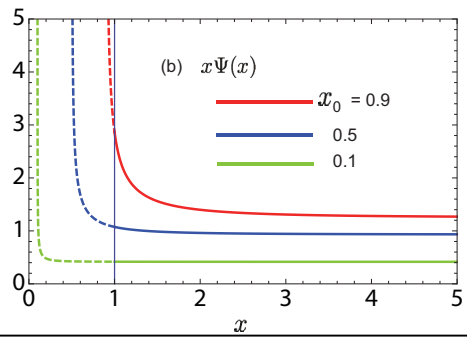
表面電荷の総量が一定の境界条件では、壁付近で異なる構造の電気二重層が横方向に共存する事で電荷の関与する相分離パターンが発生する。

5) 臨界吸着のプロファイルの計算

臨界点に非常に近い気液系や2元混合系などが境界と接している場合、どちらかの成分が非常に強く選択的に境界に吸着される。我々は、臨界揺らぎの効果を局所的に取り込んだ Local renormalized functional theory (R. Okamoto and A. Onuki JCP 2012) を用いて、下図のように、3次元空間中の球(コロイド粒子に対応)や無限に長い円柱の周りの吸着のプロファイルを計算した。また最近、慶應大学の藤谷教授と共同で、臨界吸着の効果によりコロイドの抵抗係数がどのように Stokes 則からずれるかを考察している。従来の理論 (R. Okamoto, S. Komura and Y. Yujitani, JPSJ (2013)) で、平均場として扱われてきた臨界揺らぎの効果を Local renormalized functional theory により記述し、さらに任意の表面親和性で使える理論的枠組みを構築した。その結果は、具体的な数値解析をさらに行った後、論文として発表する予定である



球の周りの臨界吸着のプロファイル。半径を1になるように規格化し、吸着の強さを变化させた時のプロファイルをいくつか描いている。

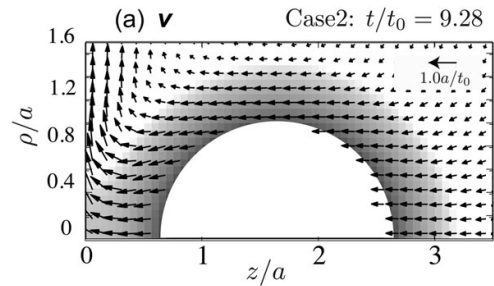


円柱の周りの臨界吸着のプロファイル。先ほどと同様に半径を1になるように規格化している。

6) 臨界吸着のプロファイルの計算

臨界点近くでの二元混合系中では、コロイドの周りの大きな吸着層の裾が重なる事でいわゆる臨界カシミア効果とよばれる同種のコロイド間の引力的相互作用が働く事はよく知られている。さらにコロイド間の距離が十分近づいたときには吸着層の架橋が一次転移的に起こり(ブリッジング転移)、粒子間の引力も同時に強くなる場合がある。このダイナミクスを調べるため、前節の研究と同様のモデルの数値計算を行った。

結果「1.架橋の形成は、拡散流ではなく流れ場によって支配されている事、2.粒子の周りの吸着層は変形せず粒子と同じ速度で動く事、3.架橋を形成させた場合、最終状態で2粒子の間隔が相関長の数十倍程度離れていても先程述べた吸着層の裾の重なりで起因する場合に比べ、圧倒的に強い引力が働く事」を示した。これらの効果は、コロイド粒子懸濁液中での温度場の変化による可逆的なコロイド結晶などの構造形成に大きな役割をはたしているものと私は考えている。



ブリッジング過程におけるコロイド粒子の周りの流れ場の様子。粒子周りの吸着層がコロイド粒子とほぼ同じ速度で動いている。

5. 主な発表論文等
(研究代表者、研究分担者及び連携研究者に)

は下線)

〔雑誌論文〕(計 9 件)

[1] Shunsuke Yabunaka, Ryuichi Okamoto and Akira Onuki, “Hydrodynamics in bridging and aggregation of two colloidal particles in a near-critical binary mixture”, *Soft Matter*, 11, 5738-5747 (2015)

[2] Akira Onuki, Shunsuke Yabunaka, Takeaki Araki and Ryuichi Okamoto, “Structure formation due to antagonistic salts”, *Current Opinion in Colloid Interface Science*, 22, 59-64 (2016).

[3] Bertrand Delamotte, Maxim Dudka, Dominique Mouhanna and Shunsuke Yabunaka “Functional renormalization group approach to noncollinear magnets”, *Phys. Rev. B* 93, 064405 (14) (2016).

[4] Shunsuke Yabunaka and Natsuhiko Yoshinaga, “Collision between chemically driven droplets”, *Journal of Fluid Mechanics*, 806, 205-233 (2016).

[5] Shunsuke Yabunaka and Philippe Marcq, “Cell growth, division and death in cohesive tissues: A thermodynamic approach”, *Phys. Rev. E* 96 (2), 022406 (2017).

[6] Shunsuke Yabunaka and Philippe Marcq, “Emergence of epithelial cell density waves”, *Softmatter* 13, 7046-7052 (2017).

[7] Shunsuke Yabunaka and Akira Onuki, “Electric double layer composed of an antagonistic salt in an aqueous mixture: Local charge separation and surface phase transition”, *Phys. Rev. Lett* 119 118001 (5) (2017).

[8] “Critical adsorption profiles around a sphere and a cylinder in a fluid at criticality: Local functional theory”, Shunsuke Yabunaka and Akira Onuki, *Phys. Rev. E* 96, 032127 (7) (2017).

[9] Shunsuke Yabunaka and Bertrand Delamotte, “Surprises in $O(N)$ Models: Nonperturbative Fixed Points, Large N Limits, and Multicriticality”, *Phys. Rev. Lett.* 119, 191602 (2017).

〔学会発表〕(計 3 件)

[1] 非摂動繰り込み群方程式の Full-Potential 解、Large- N 解による三角格

子反強磁性体の解析、日本物理学会 2015 年秋季大会、神戸

[2] $O(N)*O(2)$ 模型における多重臨界固定点の非摂動繰り込み群による研究、日本物理学会 2016 年秋季大会、金沢

[3] 非摂動繰り込み群による Large- N での多重臨界現象の解析、日本物理学会 2017 年秋季大会、岩手

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

○出願状況(計 0 件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

○取得状況(計 0 件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕
ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

藪中俊介 (YABUNAKA, Shunsuke)
京都大学福井謙一記念研究センター特定
研究員

研究者番号：60749852

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし

(4) 研究協力者

なし