

令和元年6月5日現在

機関番号：32619

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K05482

研究課題名(和文) 構造相転移における多体系の動力学

研究課題名(英文) Dynamics of many-body systems in structural phase transition

研究代表者

富田 裕介 (TOMITA, Yusuke)

芝浦工業大学・工学部・教授

研究者番号：50361663

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,700,000円

研究成果の概要(和文)：双極子相互作用する2次元Lennard-Jones(LJ)粒子モデルを構築し、圧力一定の分子動力学シミュレーションを行った。シミュレーション結果から、構築したモデルは格子を構成する粒子の双極子の大きさの組み合わせにより、いくつかの構造相転移を示すことが明らかとなり、構造相転移を示すシンプルなモデルを構築するという本研究の目的の一つを達成することができた。また、LJ粒子のダイナミクスの解析に用いたウェーブレット解析を2次元スピン系のスナップショット(瞬間的配置)の解析に適用し、スナップショットのデータの圧縮に伴うエントロピー生成とスピン系の臨界普遍性に深い関わりが存在することを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、双極子を持つLennard-Jones粒子を規則的に並べた単純なモデルを構築し、この単純なモデルを用いて構造相転移の基礎研究が可能となることを示した。温度や圧力の変化に伴って物質の結晶構造が変化する構造相転移の本質を理解することは、物質科学の基礎/応用研究において重要な課題の一つであるが、本研究で構築された単純なモデルを用いることで、様々な系の研究が手頃な計算量で実施することが可能となった。また、スピン系のスナップショットの画像圧縮によるエントロピー生成と臨界普遍性に関する研究により、統計物理学と画像情報との間に深い関わりがあることを示した。

研究成果の概要(英文)：I constructed a two-dimensional Lennard-Jones (LJ) system with dipole-dipole interactions. Results obtained from molecular dynamics simulations using a barostat show that the system exhibits structural phase transitions depending on combinations of sizes of dipolar moments of particles. One of the purpose of the project to construct a simple model that exhibits structural phase transitions has achieved. Applying a wavelet transformation to snapshots of spin configurations, I showed that there is a deep relation between entropy productions of data compression of spin configurations and universality classes of critical spin systems.

研究分野：計算物理学

キーワード：構造相転移 臨界現象 エントロピー

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

温度や圧力の変化に伴い物質の結晶構造が変化する構造相転移の本質を理解することは、物質科学の基礎および応用研究において重要な課題の一つであるが、実用性の高い物質の性質として調べられることはあっても、その基礎研究はあまり多くはないという状況であった。構造相転移の基礎研究の重要性は共通認識としてあったにもかかわらず、研究されることが少なかったのは、個別の物質についての研究手法は確立されていても、構造相転移一般について調べる研究手法が確立されていなかったという事情があった。

2. 研究の目的

物質ごと、あるいは温度や圧力もしくは電場や磁場などの外的要因に依存して構造相転移は観測されるが、様々な構造相転移を各々の物質・各々の外的要因に依存した各論としてではなく、より基本的な模型を用いて各論を超えた一般論を展開するための下地を与えるのが本研究の目的である。

3. 研究の方法

構造相転移の一般論を議論するために、構造相転移を示し、かつ、なるべく単純な模型を構築する。構築した模型を用いて数値計算を行い、構造相転移を伴う相転移の本質について有限サイズスケール解析などを用いて解析を行う。

4. 研究成果

双極子モーメントを持つ 2 次元 Lennard-Jones(LJ)粒子模型を構築し、分子動力学法による数値計算を行い、構築した単純な模型が構造相転移を示すことを確認した。本研究では、2 次元格子を A 格子と B 格子の 2 つの格子に分け、それぞれの格子に異なる大きさの双極子を配した(図 1 参照)。数値計算から確認されたことは、B 格子の双極子に比べて A 格子の双極子が十分に大きな場合、相転移点で A 格子から双極子モーメントが秩序化しはじめ、双極子モーメントの秩序化とともに格子は正方格子から長方格子への構造相転移を示す。一方、B 格子の双極子が A 格子の双極子に比べて十分に大きな場合には、A 格子は隣接する B 格子の、B 格子は隣接する A 格子の方に双極子モーメントが向く秩序化を示し、双極子モーメントの秩序化とともに格子は正方格子から斜方格子への構造相転移を示す。また、B 格子の双極子モーメントのサイズが、上記の長方格子、斜方格子への構造相転移を示す場合の間にある場合には、格子ははじめ長方格子への構造相転移を示し、その後、秩序化が進むとともに長方格子から斜方格子への構造相転移を示す。これらの数値計算により、本研究で構築した模型は双極子相互作用する LJ 粒子というシンプルなもので構成されているが、構造相転移の際には双極子モーメントの秩序化と LJ 粒子の排除体積効果による多体系の協力現象が大きく影響するという非自明な結果を得ることができた。

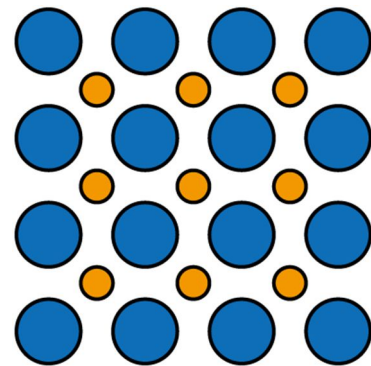


図 1: 青い円が A 格子でオレンジの円が B 格子を示す。

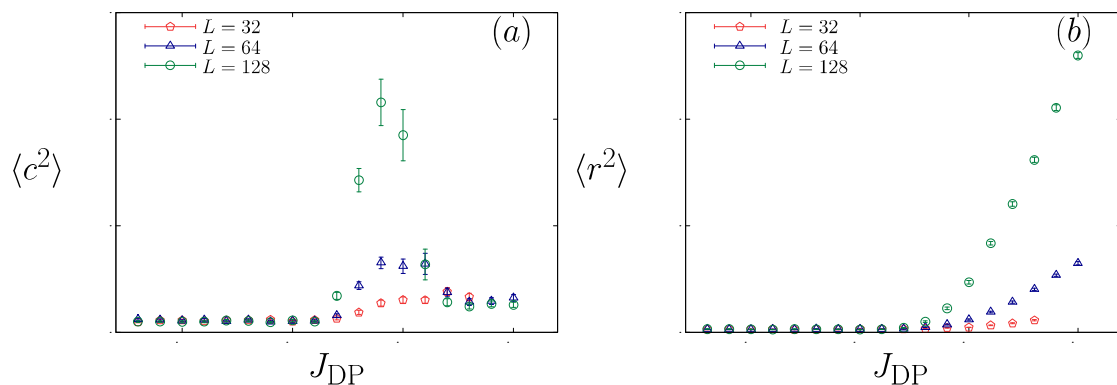


図 2(a)長方格子の秩序パラメータ。(b)斜方格子の秩序パラメータ。一度、長方格子に変形した後、斜方格子への変形を示している。

また、LJ 粒子のダイナミクスの解析に用いたウェーブレット解析を 2 次元スピン系のスナップショット(瞬間的スピン配置)に適用し、スナップショットデータの圧縮とエントロピーとの関係についての研究を行った。スナップショットデータを圧縮するには元のデータから除去するデータが生じるが、ウェーブレット変換では除去するデータを保持することにより、圧縮されたデータを復元することが可能である。このことより、除去されるデータと圧縮後のデータの和は常に保存されている。スピン系のスナップショットは、相転移の生じる温度の低温側および高温側では比較的単純であり、相転移温度で複雑なものとなるが、ウェーブレット変換によって除去される情報の階層構造を調べた結果、除去される情報量は Calabrese-Cardy の式によってよく記述されることがわかった。画像変換と臨界現象との関係については以前から議論されているが、その関係を明確な形で示したのは本研究が初めてだと思われる。

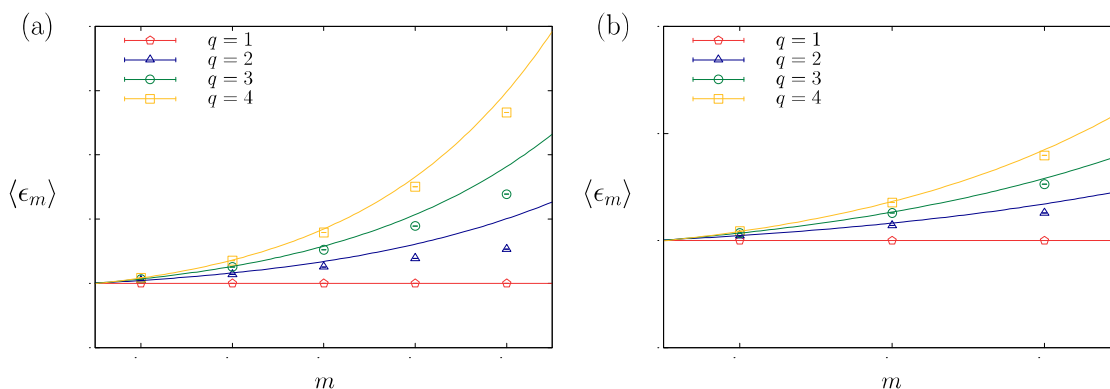


図 3: (a)ウェーブレット変換によって除去される情報の階層依存性。実線は Calabrese-Cardy の式で、異なる 4 つのスピン模型のデータが Calabrese-Cardy の式でよく記述されていることがわかる。(b) (a)の拡大図。

5 . 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 1 件)

Y. Tomita, “Measurement of entanglement entropy in the two-dimensional Potts model using wavelet analysis”, Phys. Rev. E **97**, 052128 (2018) (査読あり).

〔学会発表〕(計 3 件)

富田裕介, 「スピン模型による構造相転移の数値計算 II」日本物理学会第 74 回年次大会、九州大学(伊都キャンパス)、2019 年 3 月

富田裕介, 「ウェーブレット解析を用いた 2 次元 Potts 模型のエントラングメント・エントロピーの計算」日本物理学会 2018 年秋季大会、同志社大学(京田辺キャンパス)、2018 年 9 月

富田裕介, 「スピン模型による構造相転移の数値計算」日本物理学会第 73 回年次大会、東京理科大学(野田キャンパス)、2018 年 3 月

〔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:

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：
国内外の別：

〔その他〕
ホームページ等

富田研究室ホームページ
<http://www.comphys.las.shibaura-it.ac.jp/>

6 . 研究組織

(1)研究分担者

研究分担者氏名：

ローマ字氏名：

所属研究機関名：

部局名：

職名：

研究者番号（8桁）：

(2)研究協力者

研究協力者氏名：

ローマ字氏名：

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。