

令和2年度 9月修了

京都大学大学院理学研究科

修士論文発表会

修士論文要旨集

2020年7月14日(火)

物理学第一分野

物理学第一分野修士論文発表会

場所：理学研究科5号館 5階・第4講義室
発表：15分（別に質問時間5分程度）

2020年7月14日（火）10:00～10:20

目 次

1. 3次元円筒形細管に閉じ込められた剛体球のMDシミュレーションと転送行列法による解析
庫本 和人（10:00）・・・・・・・・ 1

3次元円筒形細管に閉じ込められた剛体球のMDシミュレーションと転送行列法による解析

物性基礎論:統計動力学研究室 庫本 和人

Abstract The hyperuniform system is a system that the structure factor is suppressed in the long wavelength limit. I investigate whether hard spheres confined in a cylindrical narrow tube is hyperuniform or not by using the MD simulation and the transfer matrix method, and found that the system is not hyperuniform.

© 2020 Department of Physics, Kyoto University

自然界や人工物に現れる様々な点配置がハイパーユニフォームか否かについて近年になって議論が活発になった[1]。ハイパーユニフォームな系とは、無限体積極限で数密度揺らぎがなくなる、言い換えれば長波長極限での構造因子が0になる系である。以下の式(1)がハイパーユニフォームの数学的な定義である

$$\lim_{v_1(\mathbf{R}) \rightarrow \infty} \frac{\langle N(\mathbf{R})^2 \rangle - \langle N(\mathbf{R}) \rangle^2}{\langle N(\mathbf{R}) \rangle} = \lim_{|\mathbf{k}| \rightarrow 0} S(\mathbf{k}) = 0. \quad (1)$$

結晶や準結晶、及び一部の乱れた系の中にはハイパーユニフォームなものがある。ハイパーユニフォームの概念により、これらを系統的に分類し、特徴付けることができるようになってきた。中でも乱れたハイパーユニフォームな系はこれまであまり知られてこなかったが、近年、物理学、物質科学、数学、工学、生物科学など幅広い学問領域と関わりがあることが分かってきた[1]。

具体的に構造因子が計算できるモデルとして、過去に詳しく調べられていた2次元細管内に閉じ込められた剛体円盤の系、及び3次元円筒形細管内に閉じ込められた剛体球の系に関する研究[2]が取り上げられるようになった。このような系は、最近接粒子以外の粒子と直接相互作用しない1次元的な系とみなせる。このうち、2次元細管内の剛体円盤の系の場合、ランダムな配置をとった時にはハイパーユニフォームにはならず、特定の規則にしたがった配置を取る特殊な場合にハイパーユニフォームになることが先行研究から分かっている[3]。本研究ではこの先行研究を参考に、3次元円筒形細管内に剛体球を閉じ込めた場合にも、2次元細管内の剛体円盤の系に対してなされた解析法を適用できるか、系がハイパーユニフォームか否かを論じることができるかどうかをMDシミュレーションを活用しつつ調べた。MDシミュレーションの結果、周期的境界条件を課した3次元円筒形細管内の剛体球の系は、各粒子が二重螺旋構造を取ることが確認され、2次元細管内の剛体円盤の系のようなランダムな配置にはならなかった。この結果について、2次元細管内の剛体円盤の系で考えられるジャミング状態に対応するものが3次元円筒形細管内の剛体球の系にはないことが原因であると結論づけた。またこの二重螺旋構造の安定性について転送行列を用いた配置エントロピーの理論的計算から考察した。

References

- [1] S. Torquato, Phys. Rep. **745**, 1 (2018).
- [2] D.A. Kofke and A.J. Post, J. Chem. Phys. **98**, 4853 (1993).
- [3] M.J. Godfrey and M.A. Moore, Phys. Rev. Lett. **121**, 075503 (2018).