

多自由度 Hamilton 系のエネルギー緩和過程に見られる 間欠的ボトルネックと「内部状態」

東京大学 総合文化研究科 森田英俊¹, 金子邦彦

従来、化学反応のような状態間遷移は、少数の遷移経路とそれ以外の自由度とに系を分離し、前者が後者に熱的に励起されてポテンシャル障壁を越える描像で考えられてきた。しかし近年、様々な状態間遷移現象に関して、この描像の限界と新たな概念の必要性が言われている [1, 2]。例えばエネルギー緩和に限っても、タンパクのフォールディングや分子機械のエネルギー入出力等の現象において、こういった問題があるように思う。

このような問題を考えてみるときに、ある程度粗視化されたレベルで何らかの「緩和に関する内部状態」があり、その違いにより緩和の仕方が異なる、という見方があっても良いように思える²。すなわち、緩和してゆくにつれてその内部状態が動的に変化し、それによって逆に緩和の仕方も変化してゆく、という捉え方ができないだろうか。そしてこのような内部状態は、多自由度力学系の何らかの協同現象の結果として現れると思われる。このような動機の下に、抽象的玩具モデルにおけるエネルギー緩和過程について考えてみた。

モデルとして、次の Hamiltonian [3, 4, 5, 6] に従う系を考える。

$$H(q, p) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{K}{2(2\pi)^2 N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [1 - \cos 2\pi(q_i - q_j)]$$

N 個の振り子はその角度 $2\pi q_i$ の差に応じて二体引力 ($K > 0$) 相互作用し、それが All-to-All に結合している。基本的な性質として、平衡状態で二次相転移を示すこと³ [4, 5]、一つの振り子を強く kick⁴ したときに Boltzmann-Jeans conjecture と呼ばれるエネルギー凍結現象 [7] が起きること [6]、等が知られている。

N 個の振り子のうち $N^{(B)}$ 個に温度 T の熱浴 (underdamped Langevin 方程式) を付け、系を平衡にしておく。この系に対し、熱浴の付いていない $N - N^{(B)}$ 個のうち $N^{(K)}$ 個を運動量 $P^{(K)}$ で一度に kick するという操作を行った。すると kick されて励起している振り子 ($N^{(E)}$ 個) は、操作した瞬間の $N^{(K)}$ 個から最終的な零個 (平衡状態) へと、一つずつ緩和していった (図 1 黒×印)。このとき、間欠的に緩和の時間間隔が非常に長くなる (「ボトルネック」と呼ぶことにする) 現象が見られた。

緩和してゆくにつれて、系の何らかの内部状態が変化してゆき、その違いにより速く緩和したりボトルネックになったりする、という様子を捉えたい。そこでここではその状態の候補として、励起部分の「有効温度」という量を導入する。系の性質として、励起部分とそれ以外の部分とは、相互作用が実効的に非常に弱くなっている (Boltzmann-Jeans conjecture の原因)。一方で各部分内では、比較的強く相互作用をしている。つまりこの系は、並進運動している多体系 (励起部分) とほぼ静止した多体系 (それ以外の部分) とが弱く結合している、と見做すこともできる。そこで励起部分において重心運動量 $P^{(E)}$

¹e-mail: morita@complex.c.u-tokyo.ac.jp

²2000 年度物性若手夏の学校での大沢文夫氏の講義に影響を受け、勝手に拡大解釈した。

³microscopic には、振り子が揃って振動している状態と、バラバラに回転している状態との転移。

⁴一つの振り子に撃力を与え、運動エネルギーを瞬間的に励起することを kick と呼ぶことにする。

からの各運動量の「拡がり」を，励起部分の有効温度 $T^{(E)}$ として定義する．

$$T^{(E)}(t) \equiv \frac{1}{N^{(E)}} \sum_{excite} (p_i(t) - P^{(E)}(t))^2, \quad P^{(E)}(t) \equiv \frac{1}{N^{(E)}} \sum_{excite} p_i(t)$$

ここで \sum_{excite} は励起している i に関する和である．

緩和の有効温度依存性を見るべく，ここでは $T^{(E)}$ を色々な値にできるだけ制御して kick し， $N^{(E)}$ が一つ減るまでの時間 τ を調べた (図2)．有効温度が大きくなると一旦 τ は増大し，その後減少する傾向が見られた．そしてこのピークが，励起部分を平衡系と見做したときに相転移の臨界温度に対応する温度 (有効臨界温度) $T_c^{(E)}$ に当たることが分かった．

先程の緩和の時系列においてこの有効温度 $T^{(E)}(t)$ の変化を見たのが，図1 灰線である．実際に，ボトルネックのところでは有効臨界温度 (図1 黒破線) に近付き，それ以外ではそこから離れていることが分かった．

つまり，励起部分が状態を動的に変えながら，有効臨界状態に近付いたり離れたりすることによって，間欠的にボトルネックが生成されることが分かった．そこで現在，この励起部分の状態のダイナミクスについて調べているところである⁵．

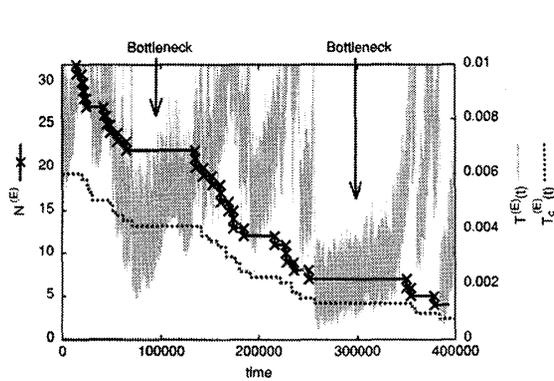


図 1: 励起している振子数 $N^{(E)}$ (黒×印)，有効温度 $T^{(E)}(t)$ (灰点線)，有効臨界温度 $T_c^{(E)}$ (黒破線) の時系列の典型例 (1 sample)． $N = 64$, $N^{(B)} = 32$, $T = 0.01$, $N^{(K)} = 32$, $P^{(K)} = 0.6$. scaling の関係上， $N^{(E)}$ につれて $T_c^{(E)}$ も変化する．

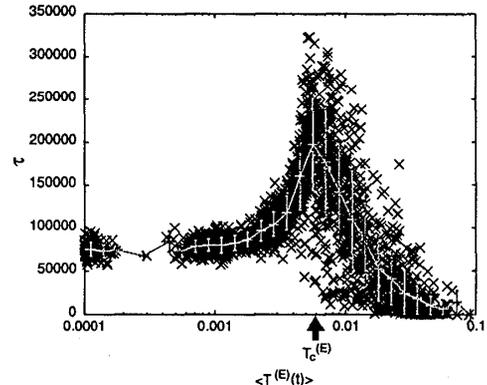


図 2: 励起部分の振子が $N^{(K)}$ 個から一つ減るまでの時間 τ と，有効温度の時間平均との関係． $N = 32$, $T = 0.01$, $N^{(B)} = 16$, $N^{(K)} = 16$, $P^{(K)} = 0.8$. ここでは $T^{(E)}$ を色々な値に出来るだけ制御して kick した．2886 samples を重ね書き．黒×は各 sample, 灰色はその平均と分散． $T_c^{(E)}$ は有効臨界温度．

参考文献

- [1] 本研究会第一回の研究会報告，物性研究 76-1 (2000)，57.
- [2] 池田研介，数理科学 396 (1996)，17.
- [3] T.Konishi, K.Kaneko, J. Phys. A 25 (1992)，6283.
- [4] M.Antoni, S.Ruffo, Phys. Rev. E 52 (1995)，2361.
- [5] Y.Y.Yamaguchi, Prog. Theor. Phys. 95 (1996)，717.
- [6] N.Nakagawa, K.Kaneko, J. Phys. Soc. Jpn. 69 (2000)，1255.
- [7] 首藤啓，齋藤真司，物性研究 73-1 (1999)，63.
- [8] 森田英俊，修士論文 (2002).

⁵研究会後，内部状態は大きく揺らぎつつ平均として有効臨界状態へ向かう傾向があることが分かった [8]．