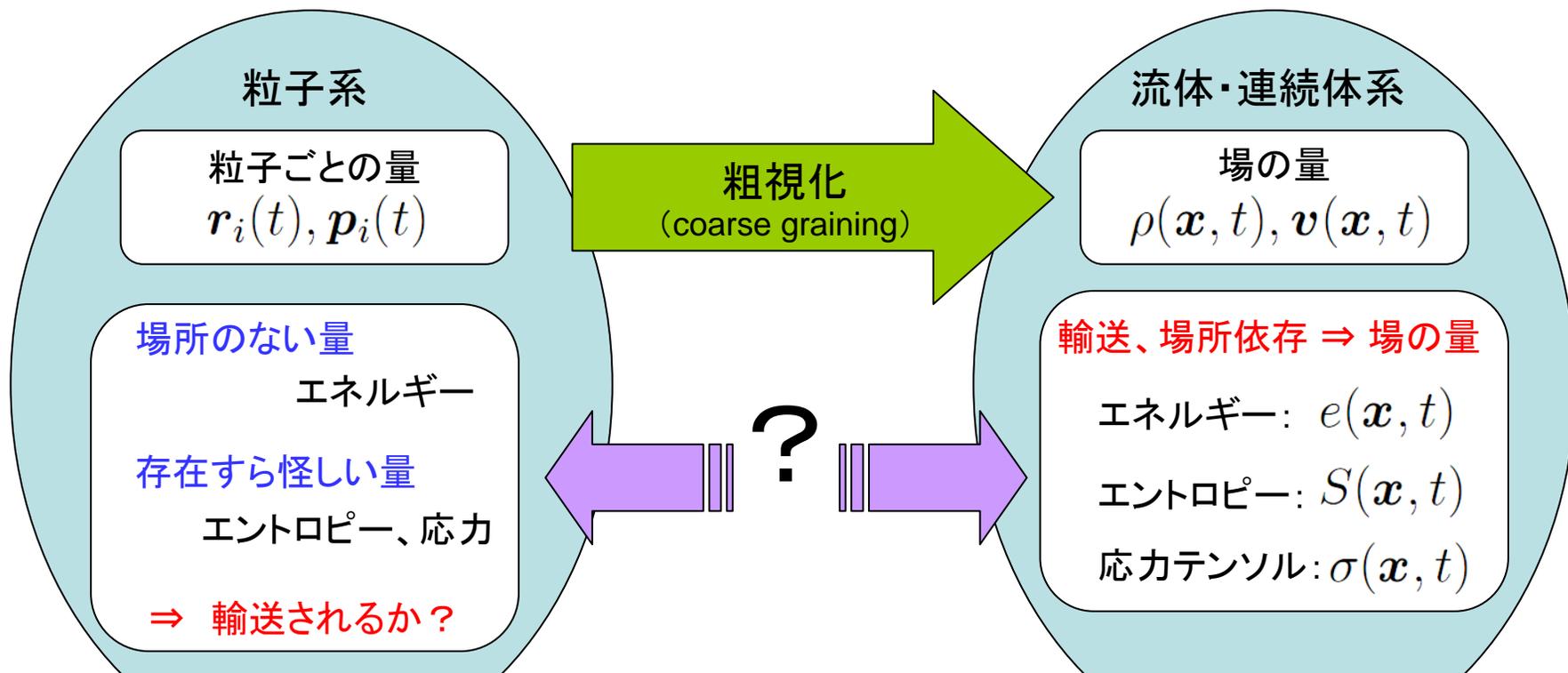


Diracデルタ関数を用いたエネルギー流と応力テンソル

○伊藤篤史¹, 中村浩章²

名大理¹, 核融合研²

粒子系では位置・速度は粒子ごとに与えられる量である。一方、流体・連続体系では密度・速度といった基本的な物理量は場の量として記述される。さらに、エネルギーやエントロピーは輸送され、応力(圧力)は場所ごとに違う値を示す。すなわち、それらも流体系においては場の量である。



粒子系において場の量を定義することで、マイクロな物理量の流れを導出する

Diracデルタ関数を用いたエネルギー流と応力テンソル

○伊藤篤史¹, 中村浩章²

名大理¹, 核融合研²

エネルギー密度場 with Diracデルタ関数

1) 粒子のエネルギー:
$$e_i(t) = \frac{\mathbf{p}_i(t)^2}{2m_i} + u_i(t),$$

2) エネルギーを粒子の位置に局在化 \Rightarrow 粒子系でのエネルギー密度場

$$e(\mathbf{x}, t) = \sum_i e_i(t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_i(t)),$$

3) 連続の式を満たすベクトル場を探す

$$\frac{\partial e(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = 0,$$

4) エネルギー流束場が求まる

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \sum_i e_i(t) \dot{\mathbf{r}}_i(t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_i(t)) + \sum_{i,k>i} \mathbf{j}_{i \rightarrow k}(t) \chi_{ik}(\mathbf{x}, t)$$

粒子間相互作用による流れ

ポスター発表:P11

Diracデルタ関数を用いたエネルギー流と応力テンソル

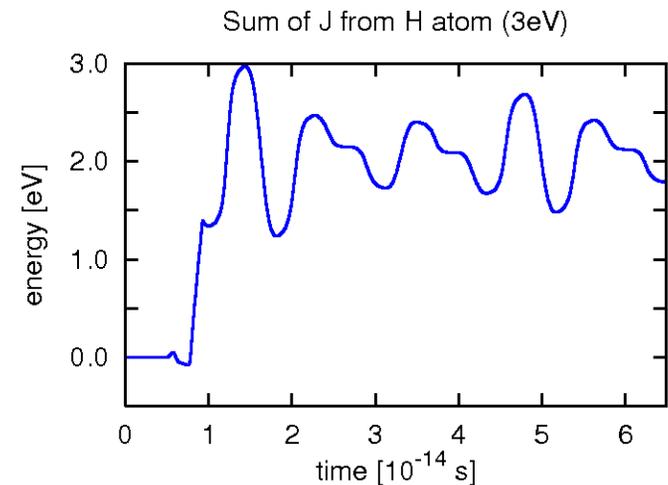
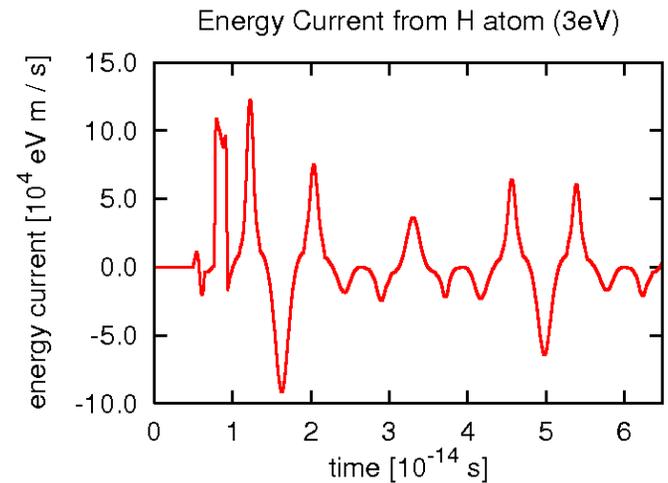
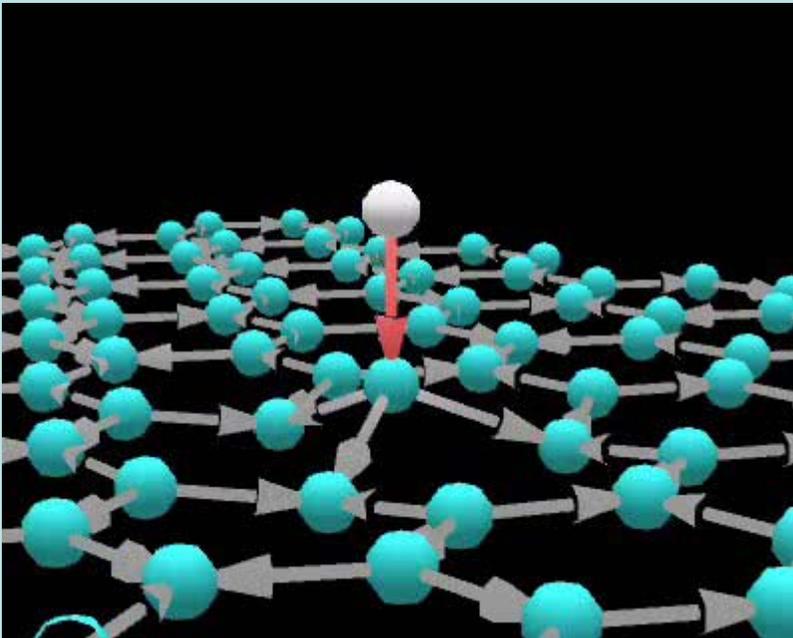
○伊藤篤史¹, 中村浩章²

名大理¹, 核融合研²

粒子間相互作用による流れ

$$\dot{j}_{i \rightarrow k} = \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{p}_i}{m_i} + \frac{\mathbf{p}_k}{m_k} \right) \cdot \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_{ik}}$$

応用例) グラフェン表面の水素原子吸着のMD



1. 局在化エネルギー密度場^[1,2]

N粒子Hamiltonian

$$H = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i(t)^2}{2m_i} + U(\mathbf{r}_1(t), \mathbf{r}_2(t), \dots),$$

において、粒子エネルギーを定義する:

$$e_i(t) = \underbrace{\frac{\mathbf{p}_i(t)^2}{2m_i}}_{\text{kinetic}} + \underbrace{u_i(t)}_{\text{interaction}}, \quad U(\mathbf{r}_1(t), \mathbf{r}_2(t), \dots) = \sum_i u_i(t).$$

Diracデルタ関数を用い粒子の位置にエネルギーを局在化させたエネルギー密度場を作る:

$$e(\mathbf{x}, t) = \sum_i e_i(t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_i(t)),$$

エネルギー保存則は次の様に対応する:

$$E = \sum_i e_i(t), \quad \Rightarrow \quad \int e(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} = E.$$

[1] S. Takesue, unpublished.

[2] S.Lepri, et. al. Phys.Rep.377 (2003) 1.

2. 連続の式とエネルギー一流束場

エネルギーは保存量であるので、その密度場は**連続の式**を満たす：

$$\frac{\partial e(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = 0,$$

このときの**エネルギー一流束場**は、粒子の移動による項と、粒子間の相互作用による項からなると考えられる：

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \sum_i e_i(t) \dot{\mathbf{r}}_i(t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_i(t)) + \sum_{i,k>i} j_{i \rightarrow k}(t) \chi_{ik}(\mathbf{x}, t)$$

1) movement of particle 2) interaction between particles

ただし、 $j_{i \rightarrow k} (= -j_{k \rightarrow i})$ は粒子間エネルギー一流の大きさ。

さらに、ベクトル場 $\chi_{ik}(\mathbf{x}, t)$ には次の関係式を課す。

$$\nabla \cdot \chi_{ik}(\mathbf{x}, t) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_i(t)) - \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_k(t)).$$

三次元空間なら

$$\begin{aligned} \chi_{ik}(\mathbf{x}, t) \equiv & (\mathbf{r}_k(t) - \mathbf{r}_i(t)) (\mathbf{r}_k(t) - \mathbf{r}_i(t))_x \\ & \times \delta\left(\left((\mathbf{r}_k(t) - \mathbf{r}_i(t)) \times (\mathbf{x} - \mathbf{r}_i(t))\right)_y\right) \delta\left(\left((\mathbf{r}_k(t) - \mathbf{r}_i(t)) \times (\mathbf{x} - \mathbf{r}_i(t))\right)_z\right) \\ & \times \theta\left(\left(\mathbf{r}_k(t) - \mathbf{r}_i(t)\right) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{r}_i(t))\right) \theta\left(\left(\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_k(t)\right) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{r}_k(t))\right), \end{aligned}$$

エネルギー密度の時間微分:

$$\frac{\partial e(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \sum_i \frac{de_i(t)}{dt} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_i(t)) - \sum_i e_i(t) \dot{\mathbf{r}}_i(t) \cdot \nabla \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_i(t)),$$

エネルギー流束の空間微分

$$\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \sum_i e_i(t) \dot{\mathbf{r}}_i(t) \cdot \nabla \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_i(t)) + \sum_{i, k \neq i} j_{i \rightarrow k}(t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_i(t)).$$

上2式の比較から、粒子間エネルギー流の満たす関係式が得られる。

$$\frac{\partial e(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad \Rightarrow \quad \frac{de_i(t)}{dt} = - \sum_{k \neq i} j_{i \rightarrow k}(t).$$

粒子エネルギーの時間微分が、粒子 $k \neq i$ についての和に展開できれば、各要素を粒子間エネルギー流とみなすことができる。

3. 二体相互作用における粒子間エネルギー流

相互作用が二体ポテンシャルの和だとすると、

$$U(\mathbf{r}_1(t), \mathbf{r}_2(t), \dots) = \sum_{i,k>i} \phi_{ik}(r_{ik}).$$

粒子の位置に局在する相互作用エネルギーは次のように決められる:

$$u_i(t) \equiv \sum_{k \neq i} \frac{1}{2} \phi_{ik}(r_{ik}).$$

粒子エネルギーの時間微分をPoisson括弧式を使って和に展開すると

$$\frac{de_i(t)}{dt} = -\{H, e_i(t)\} = -\sum_{k \neq i} \{e_k(t), e_i(t)\},$$

結果、粒子*i*から粒子*k*へ輸送される粒子間エネルギー流が得られる:

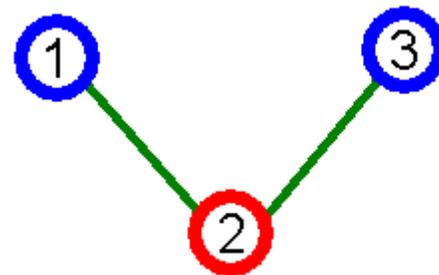
$$j_{i \rightarrow k}(t) = \{e_k(t), e_i(t)\} = \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{p}_i}{m_i} + \frac{\mathbf{p}_k}{m_k} \right) \cdot \frac{\partial \phi_{ik}(r_{ik})}{\partial \mathbf{r}_i}.$$

4. 多体相互作用の局在化における問題点

多体力の場合、粒子位置に局在した相互作用エネルギー u_i はどのように決めるのか？

歴史的には・・・ 3体力については、相互作用エネルギーは均等に3分割されてきた[3,4,5]

$$U = \phi_{12}(r_{12}) + \phi_{23}(r_{23}) + \phi^{(3)}(\theta_{\text{H}_2\text{O}}),$$
$$\Rightarrow u_1 = u_2 = u_3 = \frac{1}{3}U$$



しかし、水分子において酸素原子は水素原子らとは状況が異なるのではないか？

新手法に要求される課題：

- 1) 3体力のみならず、4体以上の任意の多体力を扱えること
- 2) u_i の時間微分が求まればよい $\Rightarrow u_i$ の形自体は不必要
- 3) 粒子での和の形に展開できること

[3] R. J. Hardy, Phys. Rev. 132 (1963) 168.

[4] S. G. Volz, Phys. Rev. B 61 (2000) 2651.

[5] Y. Chen, J. Chem. Phys. 124 (2006) 054113.

5. 多体相互作用における粒子間エネルギー流

運動量保存則と角運動量保存則を満たすために、相互作用ポテンシャルは粒子の粒子位置の相対ベクトルの関数である必要がある:

$$U(\mathbf{r}_{12}(t), \dots, \mathbf{r}_{ik}(t), \dots, \mathbf{r}_{N-1,N}(t)),$$

ただし、 $\mathbf{r}_{ik} \equiv \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k$ は粒子位置の相対ベクトル。

実際に、上の例の水分子のボンド角は相対ベクトルで表現できる:

$$\cos \theta_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{\mathbf{r}_{12} \cdot \mathbf{r}_{23}}{r_{12} r_{23}},$$

相互作用ポテンシャルの全微分形式を書き下す:

$$\begin{aligned} dU(\mathbf{r}_{12}(t), \dots, \mathbf{r}_{ik}(t), \dots, \mathbf{r}_{N-1,N}(t)) &= \sum_{i,k>i} \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_{ik}} \cdot d\mathbf{r}_{ik} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,k \neq i} \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_{ik}} \cdot (\dot{\mathbf{r}}_i(t) - \dot{\mathbf{r}}_k(t)) dt. \end{aligned}$$

これより、局在した相互作用エネルギーの形式はわからなくとも、その時間微分が求まる:

$$\frac{du_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{k \neq i} \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_{ik}} \cdot (\dot{\mathbf{r}}_i(t) - \dot{\mathbf{r}}_k(t)).$$

さらに、運動エネルギーの時間微分は

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} \right) = -\frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \cdot \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_i} = -\frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \cdot \sum_{k \neq i} \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_{ik}}.$$

であり、粒子エネルギーの時間微分が粒子kによる和で書かれる:

$$\frac{de_i}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} \right) + \frac{du_i}{dt} = -\frac{1}{2} \sum_{k \neq i} \left(\frac{\mathbf{p}_i}{m_i} + \frac{\mathbf{p}_k}{m_k} \right) \cdot \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_{ik}}.$$

結果、多体相互作用における粒子間エネルギー流が得られた:

$$j_{i \rightarrow k} = \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{p}_i}{m_i} + \frac{\mathbf{p}_k}{m_k} \right) \cdot \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_{ik}}.$$

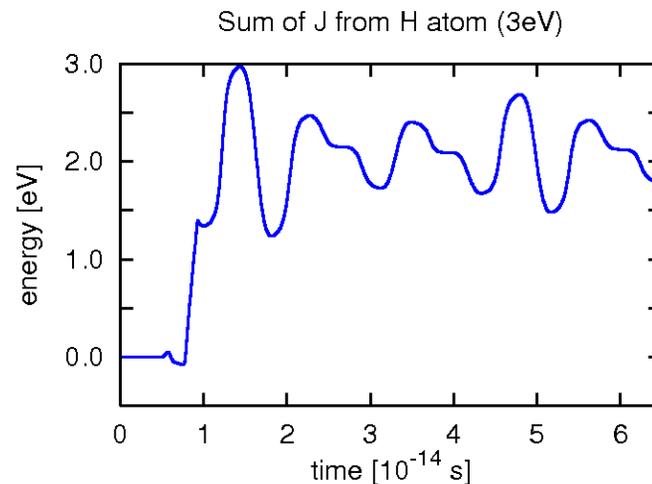
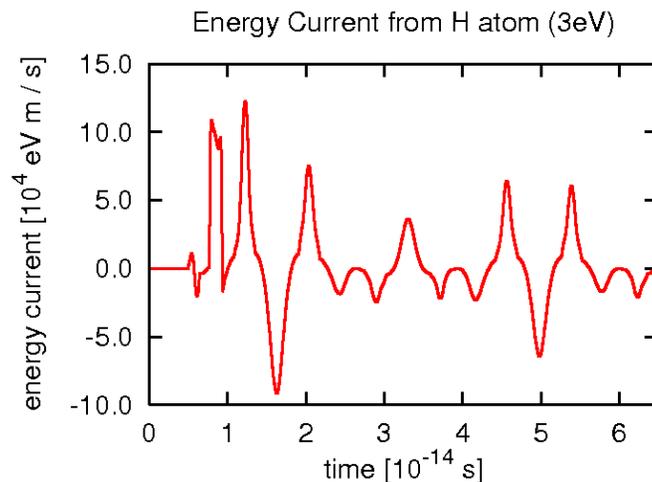
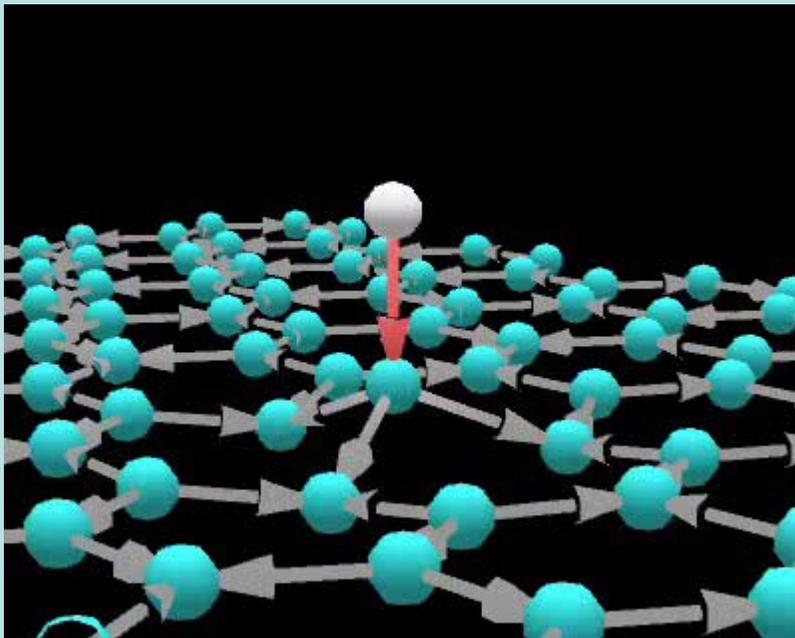
ここで、 $\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_{ik}}$ ($= -\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_{ki}}$) は \mathbf{r}_{ik} の変化により粒子i,k間に作用する力.

7. 分子動力学への応用

粒子間相互作用による流れ

$$\dot{j}_{i \rightarrow k} = \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{p}_i}{m_i} + \frac{\mathbf{p}_k}{m_k} \right) \cdot \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_{ik}}$$

応用例) グラフェン表面の水素原子吸着のMD



8. まとめ

- デルタ関数を用いて粒子系でのエネルギー密度を導入し、連続の式によってエネルギー流束場と結びつけた。その結果、粒子間エネルギー流が得られた。
- 理論を拡張し、多体力相互作用においても粒子間エネルギー流を得た：

$$\dot{j}_{i \rightarrow k} = \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{p}_i}{m_i} + \frac{\mathbf{p}_k}{m_k} \right) \cdot \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_{ik}}.$$

- 運動量密度場から連続の式を介して運動量流速テンソルを導出し、応力テンソルを得た。
- 分子動力学への応用として、グラフェンでの水素原子吸着においてエネルギーの拡散を示した。

9. Future works

- 連続の式を使えない非保存量の取り扱い
- エントロピーなどその他の物理量の取り扱い