

変形する粒子のジャミング転移と固有振動

齊藤 国靖*

Jamming Transition and Normal Modes of Deformable Particles

Kuniyasu Saitoh*

The jamming transition of soft particles has well been studied by physicists and the critical behavior of the pressure, elastic moduli, and excess coordination number has been examined by numerous experiments and simulations. In numerical studies of the jamming transition, molecular dynamics simulations play an important role in extracting critical exponents and analyzing normal modes. In most numerical simulations, however, the particles are not allowed to deform though real soft particles can be deformed by contacts with neighboring particles. Here, we theoretically and numerically investigate the jamming transition of deformable particles. Employing the Morse-Witten model, we derive the (extended) Hessian of soft deformable particles. We also use the Morse-Witten model for the force law in molecular dynamics simulations and numerically demonstrate mechanically stable packings of deformable particles. We find that the shear modulus and density of states of deformable particles are quantitatively different from those of artificially undeformed particles.

Keywords: Granular materials, Jamming transition, Normal mode analysis, Molecular dynamics, Discrete element method.

1. 緒 言

粉体など巨視的な粒子からなる粒子系は通常の流体とは異なる流動特性（レオロジー）や輸送特性を示す。粒子系のこれらの性質を決める重要なパラメーターの一つが粒子の充填率または被覆率 ϕ であり、ある臨界値 ϕ_c を境に流動特性[1]と輸送特性[2]は劇的に変化することが知られている。物理学においては、 ϕ_c を境に起こる粒子系の変化のことをジャミング転移と呼び、液体状態からアモルファス固体への相転移の一種と捉えることが多い。近年、粒子系の流動特性や輸送特性を調べる研究においては、ジャミング転移との関係性に焦点を当てる傾向がある。たとえば、粒子系の粘性率は ϕ_c で発散するが、密度差 $|\phi - \phi_c|$ を使った臨界スケーリングにより、ジャミング転移点近傍での粘性率の振る舞いはほぼ解明されている[1]。また、ジャミング転移点近傍における粒子系の拡散係数[2]や固有振動も詳しく調べられており、粘弾性とジャミング転移の関係も明らかになりつつある[3]。特に重要なのは、粒子系特有の固有振動がジャミング転移と密接に関わっており、粒子系の弾性率や動的剛性率は固有振動の状態密度と直接関係していることである。これ

により、粒子系の弾性および粘弾性を予測することは、状態密度がどのように振る舞うかという問題に帰着する。

ところで、ジャミング転移に関する研究において、分子動力学法が果たしてきた役割は大きい。分子動力学法の基本は全粒子の運動方程式を数値的に解くことであるから、粒子をどのようにモデルするかが重要となる。たとえば、弾性力を模擬した斥力、粒子の相対速度に比例する粘性力、電気的な相互作用による引力、粒子表面に付着した液体の表面張力、粒子間の摩擦など、これまでさまざまな粒子モデルが考案され、粒子系の流動特性や輸送特性への影響が議論されてきた。しかし、これまでのモデルは基本的に球形であり、計算効率の都合上、粒子自身は変形しないことが大前提であった。もちろん、実際の粒子は粒子同士の接触により多少なりとも変形し、完全な球形ではあり得ない。そこで、本研究ではこれまでのジャミング転移に関する研究を変形する粒子モデルによって見直し、粒子系の物理的な理解をさらに深めることが目的である。

2. 変形する粒子の理論

2.1 Morse-Witten モデル

変形する粒子モデルにはさまざまなものがあり、数値計算による研究も進んでいる。たとえば、1つの粒子をポリゴン（多角形）に置き換え、多数の頂点を動かすことで粒子の変形を再現するモデルがある[4,5]。このモデルでは、粒子の大変形をシミュレートできるというメリットがあり、頂点同士の相互作用を調節すれば、粒子の硬

2024 年 11 月 2 日受付
京都産業大学大学院 理学研究科
(〒 603-8555 京都市北区上賀茂本山)
Division of Science, Kyoto Sangyo University
(Kamigamo Motoyama, Kyoto 603-8555, Japan)
* Corresponding Author k.saitoh@cc.kyoto-su.ac.jp

さもコントロールすることができる。しかし、粒子が受ける力は多数の頂点に働く力の合力として与えられるため、多くの粒子からなる粒子系を考えたとき、各粒子の位置や形状から接触する粒子間に働く力を直接求めることができないというデメリットがある。さらに、粒子の滑らかな形状を保つために頂点の数を増やせば、その分計算コストが高くなってしまうのも難点である。そこで、本研究では分子動力学法を念頭に、各粒子の位置と形状から力を計算できる Morse-Witten モデルを導入する[6,7]。Morse-Witten モデルでは、粒子間に働く力が理論的な表式で与えられているため、数値計算だけでなく理論解析にも適している。一方、粒子の変形に対する線形モデルであるため、粒子の大変形は再現できないというデメリットがある。しかし、ここではある程度硬い粒子を想定し、大変形を無視した Morse-Witten モデルでも十分有用な結果が得られる範囲に限って話を進める。なお、以下では簡単のため、2次元の粒子系を考えることにする。

まず、Morse-Witten モデルでは、 i 番目の粒子の輪郭 $\rho_i(\theta)$ を次式で表す。

$$\rho_i(\theta) = R_i + \Delta R_i(\theta) \quad (1)$$

ここで、変形していないときの粒子は半径 R_i の円であるとしており、 $\Delta R_i(\theta)$ は変形によって生じる θ 方向の円形からのズレを表している。粒子の変形はほかの粒子との接触によって力を受けたときに発生し、Eq. (1) の θ は受けた力の作用線から測った角度である。Fig. 1 (a) の実線は Eq. (1) の輪郭をプロットしたものであり、 i 番目の粒子が j 番目の粒子から力 f_{ij} を受けている場合である。このとき、 i 番目の粒子の輪郭は力の作用点を中心に鋭い凹み（カスプ）を形成することに注意しよう。また、Eq. (1) にある粒子の輪郭の円形からのズレは

$$\Delta R_i(\theta_j) = \frac{R_i}{2\pi\gamma} f_{ij} g(\theta_j) \quad (2)$$

で与えられる。ただし、 $f_{ij} = |f_{ij}|$ は力の大きさ、 γ は線張力、 $g(\theta_j)$ は θ_j のある関数である。なお、Eq. (2) では j 番目の粒子から受ける力の作用線から測った角度であることを明示するため、 θ ではなく θ_j を用いた。また、 i 番目の粒子が複数の粒子と接触して力を受ける場合、円形

からのズレはそれらの粒子に対する Eq. (2) を重ね合わせて

$$\Delta R_i(\theta) = \frac{R_i}{2\pi\gamma} \sum_{j \in c(i)} f_{ij} g(\theta_j) \quad (3)$$

とすればよい。ここで、和の記号にある $c(i)$ は i 番目の粒子と接触する粒子の番号を要素とする集合であり、左辺の θ は水平方向（ x 軸方向）から測った角度として再定義した。

次に、Morse-Witten モデルにおける力の表式を説明しよう。Morse-Witten モデルでは、接触する粒子の間に働く力を接触面における圧力によって表し、ヤング・ラプラスの式を使って力の表式を求める。これにより、力の大きさは次式を満たすことになる。

$$\delta_{ij} = -\frac{R_i}{2\pi\gamma} \sum_{k \in c(i)} f_{ik} g(\theta_{ijk}) - \frac{R_j}{2\pi\gamma} \sum_{k \in c(j)} f_{jk} g(\theta_{jik}) \quad (4)$$

ここで、左辺の δ_{ij} は変形する前の粒子間の重なりであり、 i 番目と j 番目の2つの粒子の中心間距離 r_{ij} を用いて、 $\delta_{ij} = R_i + R_j - r_{ij}$ と定義される。これは変形しない粒子モデルでもたびたび登場する量であり、2つの粒子の位置さえわかればただちに計算できるものである。一方、Eq. (4) の右辺は力の大きさ f_{ik} および f_{jk} の線形結合であり、添え字の k はそれぞれ i 番目と j 番目の粒子の接触相手の番号を表している。また、2つの角度 θ_{ijk} と θ_{jik} は3つの粒子の中心間を結ぶ2つの直線の間の角度として定義され、Fig. 1 (b) に示すような位置関係を満たす。このように、Morse-Witten モデルにおける力の大きさを求めるには、Eq. (4) を f_{ik} や f_{jk} について解けばよい。しかし、右辺の係数が角度の関数 $g(\theta_{ijk})$ や $g(\theta_{jik})$ を含み複雑であるため、数値解法を用いる必要がある。特に、Eq. (4) は力の大きさの連立一次方程式なので、Gauss-Jordan 法などで数値解を求めることになる。また、力の大きさ f_{ij} は i 番目と j 番目の粒子の接触だけでなく、 i 番目と k 番目、 j 番目と k 番目など、ほかの粒子同士の接触にも依存することに注意しよう。これは変形しない粒子間に働く力 f_{ij} が粒子間の重なり δ_{ij} と 1 対 1 に対応する状況とはまったく異なっており、一見無関係な粒子ペアにも影響されるという意味で、非局所的な相互作用であるといえる。

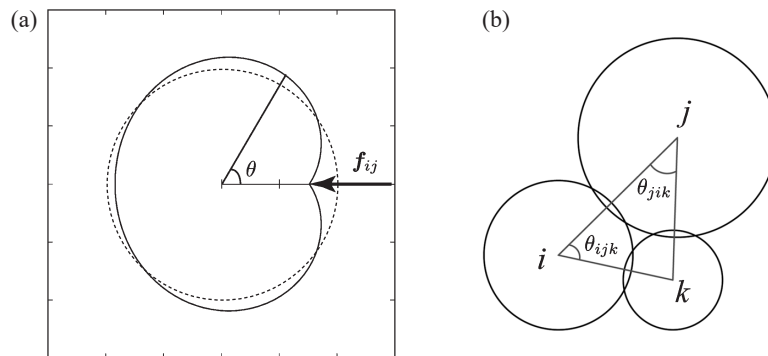


Fig. 1 (a) The shape of a deformable particle. The solid line represents Eq. (1) while the dashed line indicates the initial (undeformed) particle shape. (b) The relationship between the two angles, θ_{ijk} and θ_{jik}

今後の計算のため、連立一次方程式 Eq. (4) を行列とベクトルの掛け算に書き換えておこう。まず、粒子間の重なり δ_{ij} を $i < j$ の条件を付けて縦一列に並べたベクトルを $|\delta\rangle$ とし、 f_{ij} も同様に $i < j$ の条件を付けて縦一列に並べたベクトルを $|f\rangle$ とすれば、Eq. (4) は

$$|\delta\rangle = K^{-1}|f\rangle \quad (5)$$

と表される。ただし、接触する粒子ペアの総数を N_c とし、2つのベクトル $|\delta\rangle$ と $|f\rangle$ はいずれも N_c 次元の縦ベクトルである。また、Eq. (5) の右辺にある K^{-1} は $N_c \times N_c$ の正方行列であり、その要素は Eq. (4) の右辺にある2つの力の大きさ f_{ik} と f_{jk} に掛かっている係数を表している。さらに、 f_{ik} と f_{jk} の係数の表式から、 K^{-1} は対称行列であることもわかる。

2.2 粒子変位による力の変化

次節で粒子変位による弾性エネルギーの変化を計算するため、ここでは個々の粒子が変位したことによる力の大きさ f_{ij} の変化を求めよう。まず、力学的な平衡状態にある粒子系に何らかの摂動を加え、各粒子がわずかに変位したとする。粒子の変位によって、接触する i 番目と j 番目の粒子の中心間距離は変化し、粒子間の重なりも δ_{ij} から $\delta'_{ij} \equiv \delta_{ij} + \Delta_{ij}$ に変化する。ここで、 Δ_{ij} は粒子間の重なりの変化分であり、

$$\Delta_{ij} \approx -u_{ij}^{\parallel} - \frac{1}{2r_{ij}} u_{ij}^{\perp 2} \quad (6)$$

と近似することができる。ただし、 $u_{ij}^{\parallel}$ と $u_{ij}^{\perp}$ はそれぞれ粒子間の相対変位の法線成分と接線成分の大きさである。また、 Δ_{ij} 、 $u_{ij}^{\parallel}$ 、 $\frac{u_{ij}^{\perp 2}}{2r_{ij}}$ をそれぞれ $i < j$ の条件を付けて縦一列に並べたベクトルを $|\Delta\rangle$ 、 $|u^{\parallel}\rangle$ 、 $|u^{\perp}\rangle$ とすれば、上式は

$$|\Delta\rangle = -|u^{\parallel}\rangle - |u^{\perp}\rangle \quad (7)$$

と表される。

ところで、Morse-Witten モデルは非局所的な相互作用であるから、接触する粒子間に働く力の大きさはすべての粒子間の重なり関数

$$f_{kl} = f_{kl}(\dots, \delta_{ij}, \dots) \quad (8)$$

であると考えなければならない。つまり、粒子が変位することによって、 k 番目と l 番目の粒子間に働く力の大きさは

$$f'_{kl} = f_{kl}(\dots, \delta'_{ij}, \dots) \quad (9)$$

のように変化する。これに $\delta'_{ij} \equiv \delta_{ij} + \Delta_{ij}$ を代入し、 Δ_{ij} を微小量としてテイラー展開すると、粒子変位による力の大きさの変化は

$$\delta f_{kl} \equiv f_{kl}(\dots, \delta_{ij} + \Delta_{ij}, \dots) - f_{kl}(\dots, \delta_{ij}, \dots) \approx \sum_{ij} \left(\frac{\partial f_{kl}}{\partial \delta_{ij}} \right) \Delta_{ij} \quad (10)$$

で与えられる。ただし、 Δ_{ij} の高次項は無視しており、微分係数は粒子が変位する前の力学的な平衡状態におけるものである。また、和の記号は接触する N_c 個の粒子ペア ij に対する和を表している。さらに、 δf_{kl} を $k < l$ の条件

を付けて縦一列に並べたベクトルを $|\delta f\rangle$ とすると、Eqs. (5), (7) より、Eq. (10) は

$$|\delta f\rangle = -K|u^{\parallel}\rangle - K|u^{\perp}\rangle \quad (11)$$

と書き直される。これが粒子変位による力の大きさの変化である。

2.3 弾性エネルギーの変化

前節に続き、粒子変位による系の弾性エネルギーの変化を求めよう。まず、力学的な平衡状態にある粒子系が蓄えている弾性エネルギーは

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2} \sum_{ij} f_{ij} \delta_{ij} \\ &= \frac{1}{2} \langle f | \delta \rangle \end{aligned} \quad (12)$$

で与えられる。これは、力 f_{ij} で重なり δ_{ij} の分だけ粒子同士を押し込んだことによる仕事と同じである。上式より、粒子が変位したことによる E の変化は

$$\Delta E = \frac{1}{2} \langle f | \Delta \rangle + \frac{1}{2} \langle \delta f | \delta \rangle + \frac{1}{2} \langle \delta f | \Delta \rangle \quad (13)$$

となる。また、上式に Eqs. (5), (7), (11) を代入すれば、

$$\Delta E \approx \frac{1}{2} \langle u^{\parallel} | K | u^{\parallel} \rangle - \langle f | u^{\perp} \rangle \quad (14)$$

と近似することができる。ただし、相対変位の3次以上の項は無視した。ここで、 $\frac{f_{ij}}{r_{ij}}$ を対角成分とする $N_c \times N_c$ 行列 F を導入すれば、Eq. (14) の右辺の第2項は

$$\langle f | u^{\perp} \rangle = \frac{1}{2} \langle u^{\perp} | F | u^{\perp} \rangle \quad (15)$$

と表される。したがって、Eq. (14) をさらに計算すると

$$\begin{aligned} \Delta E &= \frac{1}{2} \langle u^{\parallel} | K | u^{\parallel} \rangle - \frac{1}{2} \langle u^{\perp} | F | u^{\perp} \rangle \\ &= \frac{1}{2} \left(\langle u^{\parallel} |, \langle u^{\perp} | \right) \begin{pmatrix} K & 0 \\ 0 & -F \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |u^{\parallel}\rangle \\ |u^{\perp}\rangle \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (16)$$

となる。上式の右辺の $2N_c$ 次元ベクトルを

$$|u\rangle \equiv \begin{pmatrix} |u^{\parallel}\rangle \\ |u^{\perp}\rangle \end{pmatrix} \quad (17)$$

とし、 $2N_c \times 2N_c$ の正方行列

$$H \equiv \begin{pmatrix} K & 0 \\ 0 & -F \end{pmatrix} \quad (18)$$

を定義すると、Eq. (16) は

$$\Delta E = \frac{1}{2} \langle u | H | u \rangle \quad (19)$$

となる。これが粒子変位による弾性エネルギーの変化である。

2.4 ヘッセ行列と拡張ヘッセ行列

前節で求めた弾性エネルギーの変化から、ヘッセ行列を導出しよう。Eq. (17) の $2N_c$ 次元ベクトルは接触する粒子間の相対変位に関するものであるが、これを各粒子の変位からなる $2N$ 次元ベクトル

$$|q\rangle \equiv (u_{1x}, u_{1y}, \dots, u_{Nx}, u_{Ny})^T \quad (20)$$

に変換する $2N_c \times 2N$ 行列 R を求めることができる。これにより, Eq. (17) を

$$|u\rangle = R|q\rangle \quad (21)$$

と表すことができるので, Eq. (19) の弾性エネルギーの変化は

$$\Delta E = \frac{1}{2} \langle q | R^T H R | q \rangle \equiv \frac{1}{2} \langle q | H^* | q \rangle \quad (22)$$

となる。ただし,

$$H^* = R^T H R \quad (23)$$

は $2N \times 2N$ 行列であり, 変形する粒子のヘッセ行列である。さらに, 粒子系が単純せん断変形を受けたときの粒子変位を考えると, Eq. (22) の表式は

$$\Delta E = \frac{1}{2} \langle q, \gamma | H_{\text{ex}}^* | q, \gamma \rangle \quad (24)$$

に拡張される。ただし, γ はせん断歪みを表し, H_{ex}^* は拡張ヘッセ行列と呼ばれる $(2N+1) \times (2N+1)$ 行列である。

3. ジャミング転移と固有振動の解析

3.1 変形する粒子の数値シミュレーション

前節の理論に基づき, 変形する粒子からなる系のジャミング転移と固有振動を調べよう。そのために, Morse-Witten モデルを分子動力学法に適用した数値シミュレーションを行う。まず, Fig. 2 (a) は 2 次元平面内の変形しない粒子のシミュレーション結果であり, 分子動力学法によって再現された $N=32$ 個の粒子の力学的な平衡状態を表している。これらの粒子は互いに接触しても円形のまま形を変えないため, 接触する粒子同士は単純に重ねて描かれている。また, 粒子が結晶化 (規則正しく配列) しないよう, 大小 2 種類の粒子を 1:1 の割合で配置している。なお, 粒子の被覆率は $\phi=0.90$ であり, 境界条件には周期的境界条件が用いられている。一方, Fig. 2 (b) は Morse-Witten モデルを適用した分子動力学法の計算結果であり, 粒子同士の接触によって各粒子の輪郭が Eq. (1) に従って変形している。この結果は Fig. 2 (a) の状態を初期条件としており, 全粒子が静止するまで系のエネルギーを緩和させた力学的な平衡状態である。また, 初期条件をさまざまに変えてシミュレーションを行ったとしても, 最終的には Fig. 2 (b) のような平衡状態が得られる。たとえば, Fig. 3 は初期条件における粒子の被覆率 ϕ を増やしたときのシミュレーション結果であり, いずれも系のエネルギーを緩和させた力学的な平衡状態を表している。初期条件の ϕ を増やすことは系に加える圧力を増やすことと同じであり, ϕ が大きいほど, (d) のように粒子は圧縮されて大きく変形する。一方, ϕ が小さいほど, 各粒子に働く力は弱く, (a) のように粒子はほとんど変形しない。このように, Morse-Witten モデルはいかなる初期条件に対しても力学的な平衡状態を再現できる優れた粒子モデルである。

3.2 変形する粒子のジャミング転移

ジャミング転移とは, 粒子の充填率または被覆率 ϕ が

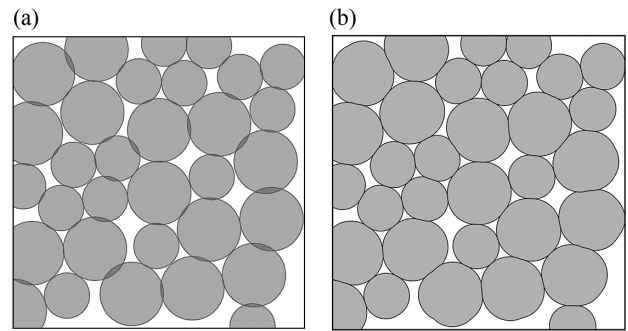


Fig. 2 Snapshots of (a) undeformed and (b) deformable particles

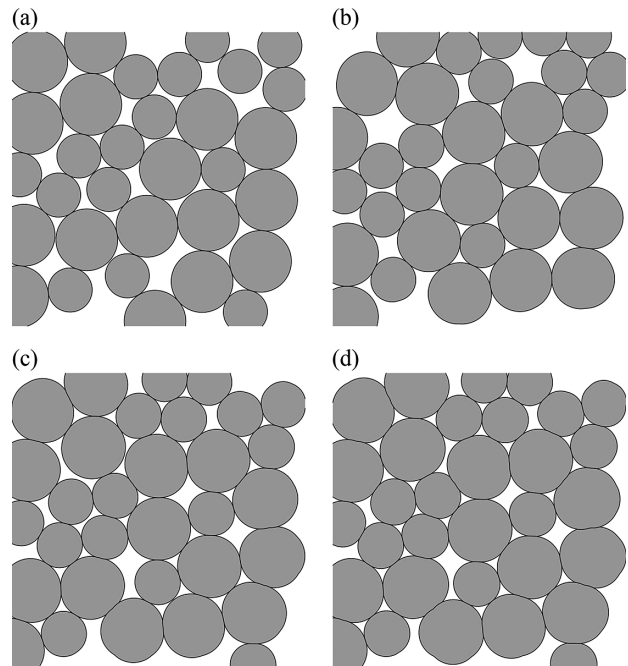


Fig. 3 Snapshots of deformable particles, where the initial packing fraction is given by (a) 0.84, (b) 0.86, (c) 0.88, and (d) 0.90

ある臨界値を超えたとき, 系が剛性を獲得する現象のことである。これは巨視的な粒子系における液体状態からアモルファス固体への相転移現象であるともいわれる。これまで, 変形しない粒子のジャミング転移については多くの研究がなされており, ジャミング転移点と呼ばれる臨界値 ϕ_c の近傍において, さまざまな物理量が臨界的に振る舞うことが知られている。そこで, Morse-Witten モデルを適用した分子動力学法により, 粒子の変形がジャミング転移や物理量の臨界的な振る舞いに対してどのような影響を与えるかを調べよう。

まず, Fig. 3 に示した異なる状態のうち, 一番弱く圧縮された (a) の状態がもっともジャミング転移点に近い状態である。一方, 一番強く圧縮された (d) の状態はジャミング転移点からもっとも離れている。ところで, 粒子が変形すると, 粒子の被覆率が初期条件における ϕ に一致するとは限らない。したがって, 変形する粒子のジャミング転移点を被覆率で表すのは不適切である。そこで, 変形した後の粒子間の重なり δ_{ij} の平均値 $\langle \delta \rangle$ を代用する。

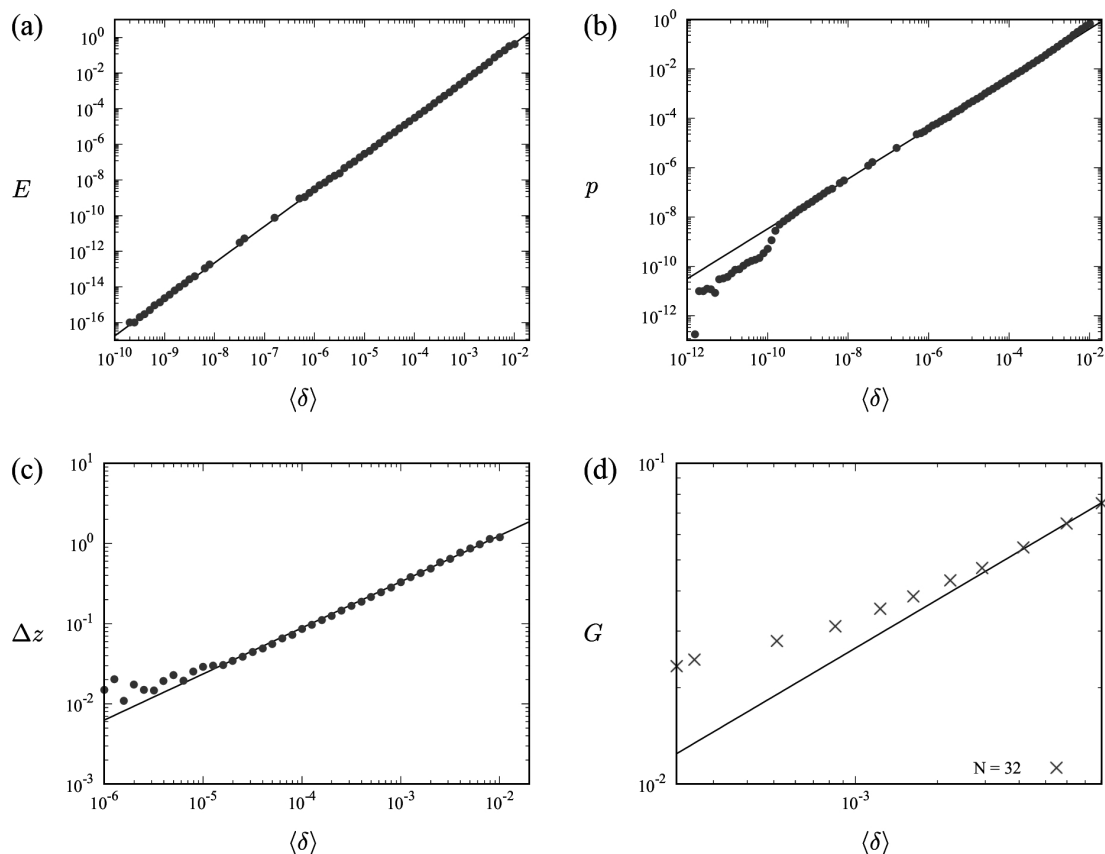


Fig. 4 Double logarithmic plots of (a) the elastic energy E , (b) pressure p , (c) excess coordination number Δz , and (d) shear modulus G as functions of the mean overlap $\langle\delta\rangle$

系が圧縮されて粒子同士が接触している場合、粒子間の重なりは常に正 $\delta_{ij} > 0$ である。よって、 $\langle\delta\rangle = 0$ であれば、系はジャミング転移していないか、ちょうどジャミング転移し始める状態である。一方、 $\langle\delta\rangle > 0$ であれば、系はジャミング転移した状態であるといえる。実際、変形しない粒子の場合、重なりは平均値はジャミング転移点からの距離に比例し、 $\langle\delta\rangle \propto \phi - \phi_c$ が成り立つ[8]。これより、変形する粒子の場合も $\langle\delta\rangle$ をジャミング転移点からの距離の尺度として採用する。

Fig. 4 (a) は変形する粒子の力学的な平衡状態における弾性エネルギー E と $\langle\delta\rangle$ の関係を両対数プロットしたものである。ただし、 E は Eq. (12) によって計算されている。ここで、粒子間の力の大きさが線形バネで与えられる変形しない粒子の場合、弾性エネルギーは重なりは平均値の 2 乗に比例し、 $E \propto \langle\delta\rangle^2$ が成り立つ。一方、図中の実線はスケーリング $E \propto \langle\delta\rangle^{2.1}$ を表しており、変形する粒子の弾性エネルギーは重なりは平均値に対してやや強い依存性を示すことがわかる。次に、Fig. 4 (b) は圧力 p と $\langle\delta\rangle$ の両対数プロットであり、実線のスケーリング $p \propto \langle\delta\rangle$ は変形しない粒子の場合と同じである。つまり、粒子の変形の効果は圧力には顕著に現れない。また、Fig. 4 (c) は余剰配位数 Δz と $\langle\delta\rangle$ の両対数プロットであり、実線のスケーリング $\Delta z \propto \langle\delta\rangle^{0.57}$ は変形しない粒子の臨界的な振る舞い $\Delta z \propto \langle\delta\rangle^{1/2}$ [9] とは若干異なる。ここで、余剰配位数とは、粒子の配位数（接触する粒子の数） z の平均値から臨界値

$z_c = 4$ （空間次元を d として、臨界値は $z_c = 2d$ で与えられる）を差し引いたものであり、ジャミング転移した状態における粒子配置の性質を表すパラメーターである。したがって、粒子の変形は粒子配置に対して一定の違いを生み出すことがわかる。最後に、Fig. 4 (d) は変形する粒子の剛性率 G と $\langle\delta\rangle$ の両対数プロットであり、 G は拡張ヘッセ行列 H_{ex}^* の固有値と固有ベクトルから計算されている。ここで、実線は変形しない粒子の臨界スケーリング $G \propto \langle\delta\rangle^{1/2}$ [9] を表しており、 $\langle\delta\rangle$ が十分大きければ、変形する粒子の剛性率は変形しない粒子の臨界的な振る舞いと一致することがわかる。ところが、 $\langle\delta\rangle$ が小さいほど、つまり系がジャミング転移点に近いほど、変形する粒子の剛性率は臨界スケーリングから大きく外れてしまう。今のところ、ジャミング転移点近傍での剛性率の違いが粒子の変形によるものなのか、あるいは有限サイズ効果なのかは結論できないが、Morse-Witten モデルを用いて変形する粒子の剛性率を計算できたことには十分意義がある。

3.3 変形する粒子の固有振動

粒子系の微小振動は固有振動の重ね合わせとして表すことができる（固有振動については、固体物理学の教科書[10]などを参照してほしい）。これまで、変形しない粒子からなる系の固有振動については詳しく調べられ、特に固有振動の状態密度とジャミング転移の関係については多くの研究がある[11]。そこで、粒子の変形が系の固

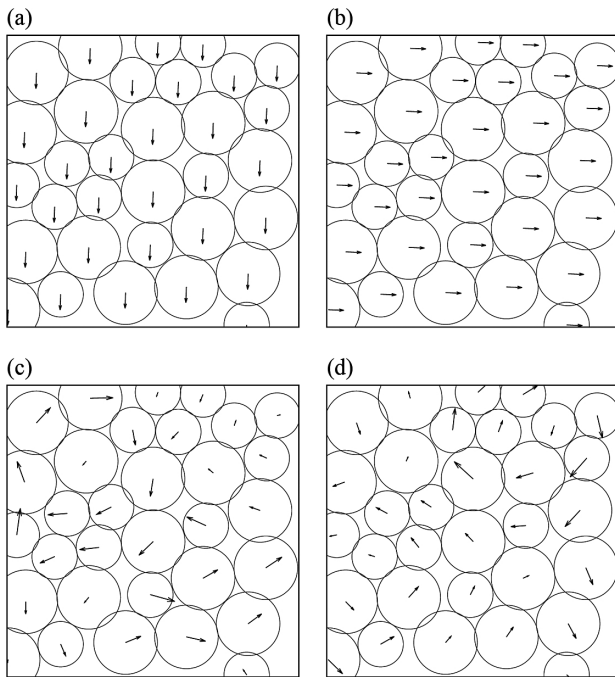


Fig. 5 Normal modes (arrows) of the four lowest eigenfrequencies. The eigenfrequency is zero in (a) and (b) whereas it is finite in (c) and (d). Here, each particle is represented by the initial (undeformed) particle shape

有振動に与える影響を明らかにするため、Eq. (23) のヘッセ行列を解析しよう。簡単のため、 N 個の粒子の質量はどれも同じであるとすると、ヘッセ行列の固有値は固有振動数の2乗に一定の粒子質量をかけたものと等しくなる。固有振動数の個数は粒子系の自由度 $2N$ に一致するが、2次元平面内の粒子系が周期的境界条件下に置かれると、自明な並進モードが2つだけ含まれることになる。これらの並進モードは系の弾性エネルギーを変化させないため、対応する固有振動数はゼロである。**Fig. 5** (a) と (b) は Eq. (23) のヘッセ行列から得られる2つの並進モードであり、ともに固有振動数(固有値)がゼロの固有モード(固有ベクトル)を矢印で表している。見ての通り、いずれの並進モードにおいても全粒子が一方向に動き、系全体が平行移動するだけである。一方、**Fig. 5** (c) と (d) は有限の固有振動数をもつ固有モードであり、各粒子の振動の向きはさまざまである。このように、Morse-Wittenモデルから定式化されたヘッセ行列を用いても、変形しない粒子からなる系と同様、2つの並進モードと複雑な固有モードが得られる。

次に、Eq. (23) のヘッセ行列の固有値を解析し、変形する粒子からなる系の固有振動の状態密度を求めよう。**Fig. 6** (a) は変形する粒子の固有振動数 ω と状態密度 $D(\omega)$ の両対数プロットである。ただし、異なるシンボルは変形する粒子の余剰配位数 Δz の違いを表しており、 Δz は図中の矢印の向きに増加している。まず、 Δz の値にかかわらず、状態密度は ω の小さい方から徐々に増加し、ある固有振動数を境に頭打ちとなり、図中の点線に沿って一定(プラトー)になる。このようなプラトー領域はかな

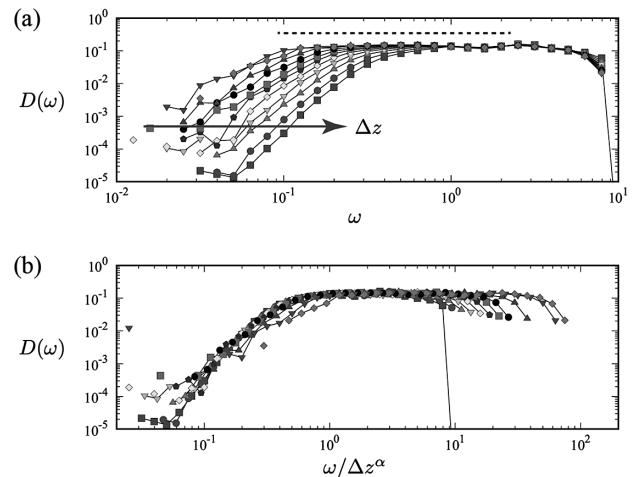


Fig. 6 (a) Double logarithmic plots of the density of states $D(\omega)$, where the excess coordination number increases as indicated by the horizontal arrow. (b) The density of states plotted as a function of scaled eigenfrequency, where the exponent is $\alpha = 0.75$

り大きな ω までおよび、固有振動数の最大値をカットオフとして状態密度はゼロになる。変形しない粒子からなる系の状態密度も定性的にはこれと同じであり、プラトー領域が始まる固有振動数の値は Δz に比例することが知られている。これを変形する粒子の場合に確かめるため、**Fig. 6** (b) のように ω を Δz^α でスケールしてから状態密度をプロットする。もし変形しない粒子の場合のように、プラトー領域が始まる ω の値が Δz に比例するならば、小さな固有振動数側の状態密度は $\alpha = 1$ とすればすべて重なるはずである。しかし、変形する粒子の場合、状態密度を重ねるためには $\alpha = 0.75$ 程度がちょうどよく、変形しない粒子の場合とは定量的に異なることがわかる。実は、粒子系の剛性率 G は状態密度のプラトー領域が始まる ω の値によって決まり、変形しない粒子の場合は $G \propto \Delta z$ であることが知られている。一方、粒子が変形する場合にはこれとは異なる結果となっており、**Fig. 4** (d) で見られた剛性率と臨界スケーリングの違いも含め、粒子の変形が剛性率に与える影響をさらに詳しく調べるのが今後の課題である。

4. 結 言

変形しない粒子のジャミング転移に関しては、これまでに多くの研究がなされ、圧力や剛性率、余剰配位数など、さまざまな物理量の臨界的な振る舞いが明らかにされてきた。また、粒子系の固有振動は剛性率など弾性応答に関わる物理量と直接関係しているため、ジャミング転移点近傍における状態密度の振る舞いを知ることは重要であり、現在でも盛んに研究されている。本研究では、粒子の変形がこれら粒子系のジャミング転移と固有振動にどのような影響を与えるかを明らかにするため、Morse-Wittenモデルに基づく理論計算と数値シミュレーションを行った。まず、連立一次方程式を解くことで得られる力の表式をベクトルと行列を用いて整理し、各粒子が変

位することによる力の大きさや弾性エネルギーの変化を求めた。一般に、弾性エネルギーの変化は粒子変位のベクトルとヘッセ行列の積として表すことができるが、これを Morse-Witten モデルの場合に応用し、変形する粒子からなる系のヘッセ行列の表式を導出した。さらに、単純せん断変形の場合を考え、拡張ヘッセ行列も求めた。次に、分子動力学法に Morse-Witten モデルを適用した数値シミュレーションを行い、変形する粒子からなる系の力学的な平衡状態を再現した。これにより、変形する粒子のジャミング転移や物理量の臨界スケーリングを調べ

ることができた。また、理論計算で導出したヘッセ行列の固有値解析を行い、変形する粒子からなる系の固有振動の状態密度を求め、変形しない粒子からなる系との定量的な違いを見出した。さらに、拡張ヘッセ行列の固有値と固有ベクトルを用いて変形する粒子の剛性率を求め、ジャミング転移点近傍における臨界スケーリングを検証した。今後は変形しない粒子との違いが顕著となった状態密度と剛性率に着目し、粒子の変形の効果や有限サイズ効果について説明することが課題となる。

References

- [1] P. Olsson, S. Teitel, Critical scaling of shear viscosity at the jamming transition, *Phys. Rev. Lett.* 99 (2007) 178001.
- [2] K. Saitoh, T. Kawasaki, Critical scaling of diffusion coefficients and size of rigid clusters of soft athermal particles under shear, *Front. Phys.* 8 (2020) 99.
- [3] K. Saitoh, T. Hatano, A. Ikeda, B. P. Tighe, Stress relaxation above and below the jamming transition, *Phys. Rev. Lett.* 124 (2020) 118001.
- [4] A. Boromand, A. Signoriello, F. Ye, C. S. O'Hern, M. D. Shattuck, Jamming of deformable polygons, *Phys. Rev. Lett.* 121 (2018) 248003.
- [5] A. Boromand, A. Signoriello, J. Lowensohn, C. S. Orellana, E. R. Weeks, F. Ye, M. D. Shattuckf, C. S. O'Hern, The role of deformability in determining the structural and mechanical properties of bubbles and emulsions, *Soft Matter* 15 (2019) 5854.
- [6] D. C. Morse, T. A. Witten, Droplet elasticity in weakly compressed emulsions, *Eur. Phys. Lett.* 22 (1993) 549.
- [7] F. F. Dunne, J. Winkelmann, D. Weaire, S. Hutzler, Implementation of Morse-Witten theory for a polydisperse wet 2D foam simulation, *Phil. Mag.* 99 (2019) 2303.
- [8] M. van Hecke, Jamming of soft particles: Geometry, mechanics, scaling and isostaticity, *J. Phys.: Condens. Matter* 22 (2010) 033101.
- [9] C. S. O'Hern, L. E. Silbert, A. J. Liu, S. R. Nagel, Jamming at zero temperature and zero applied stress: The epitome of disorder, *Phys. Rev. E* 68 (2003) 011306.
- [10] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College Publishing, US (1976).
- [11] M. Wyart, S. R. Nagel, T. A. Witten, Geometric origin of excess low-frequency vibrational modes in weakly connected amorphous solids, *Europhys. Lett.* 72 (2005) 486.

〈著者紹介〉

齊藤 国靖

京都大学大学院理学研究科で博士（理学）を取得後、オランダのトゥエンテ大学で研究員、東北大学材料科学研究所で助教、同大学数理科学連携研究センターで准教授を経て、京都産業大学大学院理学研究科の准教授に就任。現在、同研究科の教授。
専門：ソフトな粒子系の理論および数値計算



ジャミング転移
jamming transition

粉体の様に多数の粒子から成る粒子系が「流れる状態」から「固まった状態」に変化すること。物理学では、ジャミング転移は粒子系が液体状態からアモルファス状の固体に変化する相転移の一種であると考えられており、その変化は粒子の配位数や系の剛性によって特徴づけられる。具体的には、粒子系がジャミング転移するかどうかは空間に占める粒子の割合（充填率）によって決まり、充填率がある臨界値を超えると、配位数の平均値は不連続に増加し、剛性率はゼロから連続的に増える。その他、圧力、体積弾性率、動径分布関数、固有振動の状態密度、粘性率など、粒子系の様々な物理量がジャミング転移を挟んで変化することが知られている。

スケーリング
scaling

ジャミング転移で発散する物理量やゼロから連続的に増える物理量の多くは、粒子の充填率と臨界値の差を底（てい）とするべき乗則に従う。この性質はいわゆる臨界現象に類似しており、べき乗則の指数はジャミング転移の場合でも臨界指数と呼ばれている。臨界指数を求める方法は臨界現象の理論によって確立しているが、実験値や数値シミュレーションのデータから臨界指数を定めるのに有効な手段がスケーリングである。スケーリングを実行するには、物理量が充填率と外部パラメータのある関数（スケーリング関数）であると仮定する。そこで、様々な条件下で測定した物理量が共通の曲線に乗る様に、測定値と外部パラメータをべき乗則の底を使ってうまくスケールし、臨界指数を定めることができる。

（京都産業大学 齊藤 国靖）