

研究題目	粉粒体中を伝わる音のダイナミクスの解明	報告書作成者	齊藤国靖
研究従事者	齊藤国靖		
研究目的	<p>音が伝わるとは、一般に空気などの媒質が振動する現象であるが、砂の様なマクロな粒子から成る「粉粒体」も音を伝える媒質である。古くから鳴き砂に代表される粉粒体中の音の伝搬は、人を魅了するばかりでなく、物理現象としても非常に謎が多い。その大きな要因の一つが粉粒体の構成粒子の離散性であり、音を伝搬するはずの粒子達が接したり離れたたり、あるいは不可逆的に移動したりと、連続的な他の媒質には見られない微視的スケールでの複雑な現象を伴う。また、地震の揺れは地面を伝わる音波の代表例だが、反射法など地中の音波を利用した地層・断層調査や、石油など海底資源の探索、およびコンクリート材料の遮音性など、粉粒体中の音波伝搬を理解することは応用上も極めて重要である。</p> <p>離散的な粒子で構成される粉粒体は、連続体的な他の媒質とは大きく異なる性質を持つため、基礎研究の段階でも未解明な現象が数多い。粉粒体中の音の伝搬は構成粒子の物性値(例:粒径分布や質量分布、硬さや粘度、摩擦力など)の影響を強く受けるだけでなく、微視的な粒子構造にも影響されるため、理学・工学の幅広い分野で基礎的な研究が行われてきた。まず、粉粒体中の音速と密度の関係を実験的に詳しく調べたのは、ニューヨーク市立大学シティカレッジの H.A. Makse 教授らのグループで、音波とジャミング現象(粉粒体の密度の増加に伴い、せん断に対する降伏応力が発生する現象)の関係が注目されるきっかけとなった。その後、ライデン大学の M. van Hecke 教授らのグループを筆頭に、数値計算によるジャミング現象の研究が徹底して行われ、同じくライデン大学の V. Vitelli 教授らが音波減衰と輸送係数の関係を議論している。また、分子動力学シミュレーション(以下、MD)による音波の基礎研究では、ガラスのランダムな粒子配置に起因したボゾンピークと分散関係の異常が注目を集めている。一方、粉粒体特有の摩擦の影響については結晶構造に関するものが多く、自然界に見られるランダムな粒子配置と摩擦の影響については更なる研究が必要である。</p> <p>そこで、本研究では最新の MD を用いて、ランダムな粉粒体中の音の伝搬のダイナミクスを微視的な観点から解明する。特に、ガラスや結晶構造に関する先行研究を踏まえ、構成粒子の(1)粒径や質量のランダムネス、(2)粘弾性、および(3)摩擦による回転効果が分散関係や音波の散乱過程にどう影響するかを網羅的に調べる。さらに、分散関係から音波の各成分(p 波と s 波)の性質を理解し、粉粒体のアンジャミング現象(密度低下に伴う音速と剪断弾性率の消失)の解明に努める。また、音波を担う速度場の時間相関を調べることで、音の伝搬に重要な輸送係数(例:粘性率)を微視的に理解し、音波減衰を引き起こす構成粒子の乱流構造のダイナミクスも明らかにする。</p>		

研究内容

1. 摩擦のあるランダムな粉粒体中の音波伝搬と散乱過程

まず、**粒子配置と粒子間の摩擦が音波に与える影響**を調べるため、MD を用いてランダムな粉体中を伝わる音波を調べ、摩擦による分散関係や散乱過程の変化を明らかにする。ここでは純粋に弾性体的な音波を調べるため、**ダイナミカル・マトリックス**を利用した MD を行う(図1(a))。その結果、粒子速度の縦波成分のスペクトルからは通常の分散関係が得られるが、**横波成分のスペクトルからは、通常の分散関係に加え、光学モードの様な新たな分岐が観測された(図1(b))**。これは摩擦による粒子の回転運動に起因するもので、**純粋に回転速度からも明瞭な光学分岐を得ることが出来る(図1(c))**。これらの結果から、音速や音波の散乱係数などを計算することができ、摩擦に起因する新しいモードとランダムな粒子配置が音波の散乱過程に与える影響を明らかにする予定である。なお、本課題はトゥエンテ大学(オランダ)の Luding 教授らとの国際共同研究にも発展しており、今後さらなる研究成果が期待できる。

2. 多分散系の音波と粒子運動の階層性

次に、**粒径分布の種類が音波に与える影響**を調べるため、MD を用いて多分散粒子系の粘性率や音波の担い手である応力鎖の構造を明らかにする。これまで MD による粉粒体の先行研究では、同じ粒径または二種類の粒径(粒径比 1.2~1.4 倍程度)を用いることが多く、自然界に見られる多様な粒径分布の影響はあまり検証されてこなかった。しかし、地震断層中の土砂や、土星リングを構成する岩石や氷など、実際は粒径比が大きく異なる場合(特に粒径が**冪分布**に従う場合)が多い。さらに、粒径比が大きく異なる場合、粒子の充填率が大きくてもマクロな粘性率が異常に小さくなるなど、粒径分布が音波伝搬に与える影響は大きい。そこで、MD により粒径が冪分布に従う多分散粒子系を調べ(図2(a)および(c))、二分散系(粒径比 1.4 倍)の結果とも比較する。その結果、音波の横波を伴う単純せん断変形によって系内部には異方的な応力鎖が発達することが解った。ところが、**大きな粒子が主要な応力鎖を担い、比較的小さな粒子は大きな粒子に囲まれたボイド中を自由に運動し、系全体の音波伝搬には殆ど寄与しない事が解った(図2(b))**。また、粒子配置や粒子間の力の異方性についても、小さな粒子の寄与は殆ど見受けられない。従って、多分散系は異常に小さな粘性率を示し(図2(d))、音波伝搬は二分散系の場合と大きく異なる事が解る。今後はさらに、粒径に応じた自己拡散や動的不均一性の違いなど、粒子運動の階層性も明らかにし、**多分散系の音波伝搬と散乱過程の背後にある微視的なダイナミクス**を解明する予定である。なお、本課題は東北大学 AIMR の阿尻研究室との共同研究にも発展し、今後もさらなる研究成果が期待できる。

3. 粒子運動の渦構造とシェアバンドが音波に与える影響

最後に、MD を用いて音波の成因である粒子速度の空間構造を調べ、横波成分を表す渦構造とシェアバンドが形成されるパラメータ領域を明らかにした。また、粒子速度のスペクトルを用いて波数空間における構造を解明した(※出版済み。「**研究報告書**」を参照)。

<p>研究のポイント</p>	<p>★分子動力学シミュレーションは離散的な構成粒子から成る「粉粒体」の数値計算に最適</p> <p>流体や弾性体など連続媒質の数値シミュレーションとは異なり、分子動力学シミュレーションは離散的な粒子の運動方程式を数値積分し、全粒子の運動を精密に再現する。長波長に及ぶ音波を数値計算するためには数万～数十万個の粒子の運動方程式を解かなければならず、計算に要するコストも大きい。その分曖昧な仮定を導入することなく厳密な音波の解析が出来る。さらに、粒子の硬さ、粘度、摩擦や粒径分布など粉粒体の様々な物性をコントロールすることも可能で、多様な音波を網羅的に調べ上げられるのがポイントである。</p> <p>★「摩擦」や「粒径分布」という新たな物性が音波の様相を大きく変える</p> <p>分子動力学法では様々な物性値をコントロール出来るが、中でも摩擦力は粒子に回転自由度をもたらす、古典的な音波モードに加えて新たな回転モードを生み出す。また、幅広い粒径分布は粒子運動に階層性をもたらす、一様媒質には見られない音波を生み出す。</p>
<p>研究結果</p>	<p>★摩擦のあるランダムな粉粒体中の音波伝搬と散乱過程</p> <p>摩擦のあるランダムな粉粒体の分子動力学シミュレーションにより、粒子速度の縦波と横波成分が示す音波伝搬および粒子の回転速度が示す音波伝搬を調べた結果、横波成分と回転速度からは擬・光学的な新しい音波モードが観測された。この擬・光学モードは粉粒体の構成粒子間に働く摩擦に起因しており、摩擦力を強くすれば音速も速くなり、通常の音波モードに比べて非常に速い振動を示す。さらに、音波の散乱過程の強さを示す「散乱係数」は古典的な音波のレイリー散乱とは全く異なる波数依存性を持つことが発見された。</p> <p>★多分散系の音波と粒子運動の階層性</p> <p>冪的な粒径分布に従う多分散粒子系の分子動力学シミュレーションにより、音波の担い手である「応力鎖」に特異性が見出された。応力鎖は大きな粒子にのみ支えられており、ボイド中を自由に運動する小さな粒子との違い(つまり階層性)が音波に大きな影響を与える。</p>
<p>今後の課題</p>	<p>★新しい音波モードの散乱理論の構築</p> <p>摩擦のあるランダムな粉粒体に特徴的な擬・光学モードの散乱過程を説明する理論モデルは未だ見つかっていない。古典的なレイリー散乱の理論が媒質中の剛性率の空間的不均一性に基いているという点から、擬・光学モードに関しても回転運動を妨げるような抵抗力の空間的不均一性を仮定し、回転自由度を取り入れた波動方程式を基に新しい散乱過程を理論的に説明することが必要である。</p> <p>★ダイナミカル・マトリックスを用いた多分散系の分散関係の解析</p> <p>分子動力学シミュレーションで用いた多分散系の粒子配置を使ってダイナミカル・マトリックスを計算し、理想的なセットアップから音波の分散関係を調べる必要がある。この時、ダイナミカル・マトリックスの固有値解析で得られる状態密度の解析も必要で、粒子運動の階層性が音速や散乱係数に与える影響を網羅的に調べるのが今後の課題である。</p>

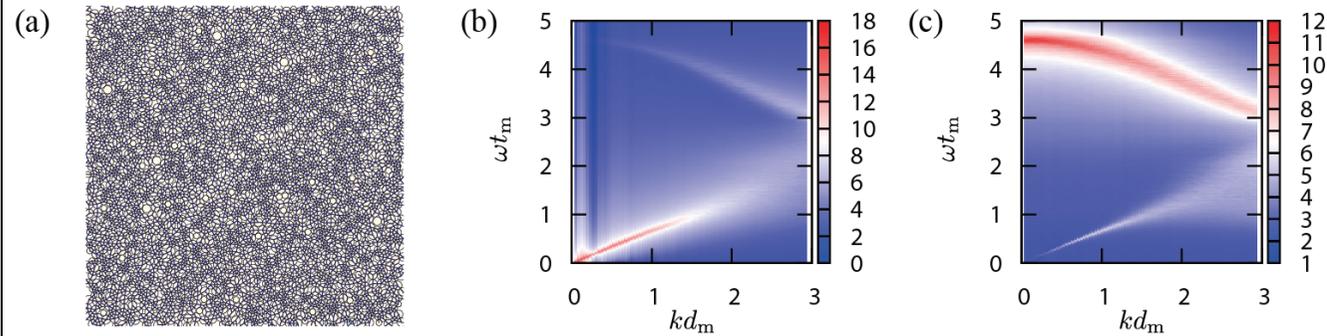


図1:(a) MD で用いるダイナミカル・マトリックスを計算するためのコンタクト・ネットワーク(実線)。(b) 粒子速度の横波成分のスペクトルから得られた分散関係。(c) 粒子の回転速度のスペクトルから得られた分散関係。

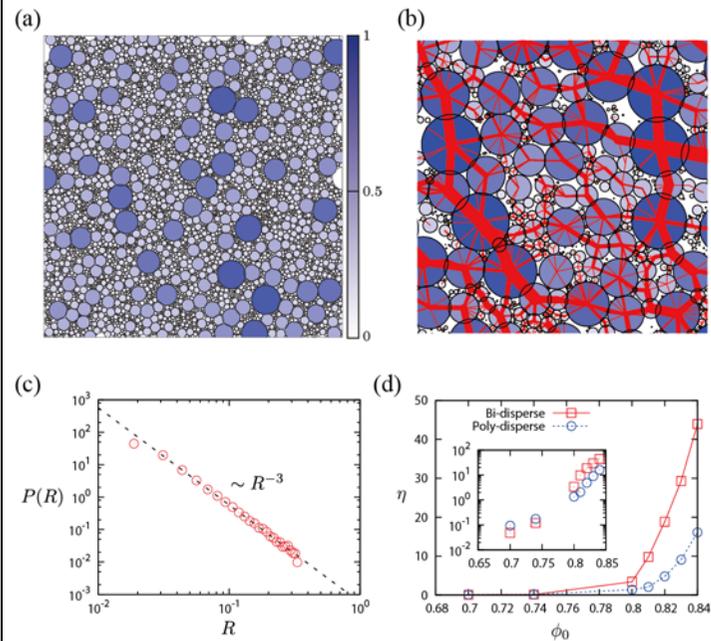


図2:(a) 多分散系の MD。(b) 音波の担い手である異方的な応力鎖(赤色の実線)。(c) 多分散系の冪的な粒径分布。(d) 多分散系と二分分散系の粘性率の比較。

(注:フローチャート図, ブロック図, 構成図, 写真, データ表, グラフ等 研究内容の補足説明にご使用下さい。)