

平成21年 5 月 26 日現在

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2006～2008

課題番号：18540371

研究課題名（和文） 非平衡統計力学への運動論的アプローチ

研究課題名（英文） Kinetic approach to nonequilibrium statistical mechanics

研究代表者

早川 尚男 (HAYAKAWA HISAO)

京都大学・基礎物理学研究所・教授

研究者番号：90222223

研究成果の概要：

非平衡系の統計力学を運動論的方程式から解析し、特にモード結合理論をせん断粉体系に適用して時間相関関数のロングタイムテールがどのように変化するか、同時刻長距離相関がどうなるかを明らかにした。更に揺動散逸関係式を充たす場の理論を液体系に適用し、モード結合理論の基礎付けを行った。またせん断粉体系のジャミング転移の臨界指数を明らかにした。またナノクラスターの衝突では熱揺らぎの重要性を明らかにし、その結果反発係数が1を超えることがあることを明示した。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	1,600,000	0	1,600,000
2007年度	800,000	240,000	1,040,000
2008年度	600,000	180,000	780,000
年度			
年度			
総計	3,000,000	420,000	3,420,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学、数理物理・物性基礎

キーワード：運動論、相関、粉体、衝突、ジャミング、ガラス転移、液体論

1. 研究開始当初の背景

非平衡環境下での気体分子運動論が、粉体等の散逸のある系でも有効であることが分かってきた。また、高密度系の相関効果等を含む液体論的アプローチやガラス転移やジャミング転移等の非平衡相転移についての統一的理解が進んでいない状態であった。更にナノスケールでの衝突現象では熱の効果の重要性が認識されつつある段階であった。またゆらぎの定理等の非平衡輸送論の一般論が整備されつつある段階であ

った。

2. 研究の目的

非平衡環境下での多体系の統計力学を運動論に基き解析し、汎用性のある理論を構築することを目的とする。対象はせん断粉体系や、熱勾配やせん断のある濃厚気体系、量子系を含めた電気伝導、更にナノスケールのクラスターの衝突現象であり、これらの背景にある統一的数理構造を抽出することを目的とする。

その中で着目する量は空間並びに時間相関関数である。また一様状態の不安定性にも言及し、非線形領域での空間構造の特徴づけにも言及する。更に微小系での熱の効果に着目し、ゆらぎの定理の適用範囲を衝突等の強い非平衡系に拡張することを目的とする。

3. 研究の方法

結果として古典系のみならず成果があったので、古典系について方法論を説明しよう。方法論の機軸は(1)液体論の拡張、(2)分子動力学シミュレーション、(3)現象論である。

- (1) 液体論は、気体論の自然な拡張であり、有限濃度効果を取り入れた結果として相関関数を扱う理論的手法になる。特に、各種の自由度が複雑に絡み合った系を扱うために広い意味のモード結合理論が中心になる。

特にガラス転移等ではモード結合理論の限界も明らかになっているので、その基礎付けや拡張をするためにも揺動散逸関係式を満たす非平衡場の理論も用いている。

また従来の平衡液体論ではハミルトニアンがあり、エネルギーが良い物理変数であるが、粉体のような局所詳細つりあひも成り立っていない系へ液体論を拡張する。

更にゆらぎの定理等の一般論との関係も調べる。

- (2) 分子動力学法は古典粒子系の運動方程式を直接数値的に解く確立したシミュレーション法である。研究代表者はこの手法を積極的に採用し、大規模シミュレーションによって解析的理論の正否を調べると共に、新たな現象を発見する。
- (3) 現象論は系統的な理論とは言えないが、従来の理論の組み合わせや、細かな点を考慮せず本質を抽出した取り扱いによる簡単な理論である。その簡単さ故に、理論の結果が明示的に与えられ、分子動力学法等で現象論の妥当性を確認できる。

4. 研究成果

最近の研究から順に遡って研究成果を説明する。まずナノクラスターの衝突における熱揺らぎの効果や弾性力、(閉じたハミルトン系でありながら)粘性力の効果から現象論的に反発係数を定める理論の妥当性等を論じた研究を行った。またその研究によって、ナノクラスターの反発係数が有限の確率で1を超えることや広義のゆらぎの定理を充たすことを明らかにした(論文1,6,8)。この研究は *Physical Review Focus* (v23, st10), *Science News*(May 9th., vol.175, #10, p.13

(2009)), *Nature Nanotechnology* (vol.4 April 17, 2009), 中日新聞、東京新聞(何れも4月28日朝刊)等の各種メディアに取り上げられる等の大きな反響があった。論文8は会議録であるが単なる招待講演ではなく、プレナリー講演として位置付けられるものであった。また、2次元弾性体の接触と衝突に弾性論と準静的理論が有効であることを示した。(論文13)。より以前の研究と併せてマクロ物体の非弾性衝突について日本物理学会誌に解説を書いている。

次にせん断粉体系のジャミング転移の研究を説明する。外場を与えないと密度がある程度低い粉体系では容器壁に圧力を与えないが、臨界値を超すと有限の圧力を与える。またせん断系ではせん断速度ゼロ極限での降伏応力の発生をジャミング転移と捉えることが出来る。本研究では、ジャミング転移が2次相転移と同様な連続転移であり、その臨界指数が空間次元に依存せず局所的な相互作用で決まることと臨界指数の決定を行った(論文2)。これに伴い共同研究者の大槻道夫氏は学会のシンポジウム講演、*Japan-France bilateral joint seminar*等の各種招待講演の機会に恵まれた。

更にせん断粉体系と定温せん断液体系に同じ同時刻長距離相関が存在することを明らかにした。これらの相関は速度相関のみならず密度相関でも有効で、更に密度相関は液体論で予言される短距離相関からの補正として、長距離相関があることを示した(論文3)。これらの内容で *Granular Gas 2008* の招待講演等多数の講演を行った。

また同様のことは同時刻相関関数のロングタイムテールにも現れることを明らかにした(論文5)。尚、せん断系のロングタイムテールについてはプレプリントがある。自由冷却粉体ガスにおいてもロングタイムテールがどうなるかも明らかにした。(論文10)。更に重力で流した粉体流ではロングテールがあると報告された論文は誤りで、ロングテールはないことを示した(論文4)。

境界に駆動されたせん断粉体系に関しては、気体分子運動論によって導かれた流体力学の有効性をはっきりさせた論文(論文11)も重要な成果と言える。

またせん断粉体系にガラス転移等で用いられるモード結合理論が有効であることを示した論文(論文9)も注目されており、今も更に整備を進めている。この内容で *Unified concepts in glass transition* という会議での招待講演を行った。

外力のないコロイド系等のガラス転移についても揺らぎのある流体モデルを基礎方程式として、揺動散逸関係式を充たす場の理論を用いて密度相関のみが遅い変数である場合には良く知られたモード結合理論が導

かれることも明らかにした。更にエルゴード性の回復のためにどのような条件が必要であるかを明らかにした。(論文7)。この内容でJapan-France bilateral joint seminarの招待講演を行った。

その他、単純排他過程と呼ばれる格子系において粒子出入りがあるときに粒子が詰まった領域と薄い領域を隔てる界面が出入りのサイトに引き付けられることを明らかにした(論文12)。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 13 件)

1. Hiroto Kuninaka and Hisao Hayakawa, Simulation of cohesive head-on collisions of thermally activated nanoclusters, Phys. Rev. E **79**, 031309 (2009) 1-9. 査読有.
2. Michio Otsuki and Hisao Hayakawa, Universal Scaling for the Jamming Transition, Prog. Theor. Phys. **121**, 647-655 (2009). 査読有.
3. Michio Otsuki and Hisao Hayakawa, Spatial correlations in sheared isothermal liquids: From elastic particles to granular particles, Phys. Rev. E **79**, 021502 (2009) 1-16. 査読有.
4. Hisao Hayakawa and Michio Otsuki, Are There Long-Time Tails in Granular Flows?, Progress of Theoretical Physics, Supplement **178**, 49-54 (2009). 査読有.
5. Michio Otsuki and Hisao Hayakawa, Time Correlation Function of the Shear Stress in Sheared Particle Systems, Progress of Theoretical Physics, Supplement **178**, 56-63 (2009). 査読有.
6. Hiroto Kuninaka and Hisao Hayakawa, Super-Elastic Collisions in a Thermally Activated System, Progress of Theoretical Physics, Supplement **178**, 157-162 (2009). 査読有.
7. Taka H. Nishino and Hisao Hayakawa, Fluctuation-dissipation-preserving field theory of the glass transition in terms of fluctuating hydrodynamics, Phys. Rev. E **78**, 061502 (2008) 1-11. 査読有.
8. Hisao Hayakawa and Hiroto Kuninaka, Super-elastic collisions of thermal activated nanoclusters, in the Proceeding of the Summer

School of Advanced Problems in Mechanics 2008 as an invited paper (pp. 306-317). 査読有.

9. Hisao Hayakawa and Michio Otsuki, Mode-Coupling Theory of Sheared Dense Granular Liquids, Prog. Theor. Phys. **119**, 381-402 (2008). 査読有.
10. Hisao Hayakawa and Michio Otsuki, Long-time tails in freely cooling granular gases, Phys. Rev. E **76**, 051304 (2007) 1-14. 査読有.
11. Kuniyasu Saitoh and Hisao Hayakawa, Rheology of a granular gas under a plane shear, Phys. Rev. E **75**, 021302 (2007) 1-11. 査読有.
12. Tetsuya Mitsudo and Hisao Hayakawa, The effect of detachment and attachment to a kink motion in the asymmetric simple exclusion process, J. Phys. A: Math. And Gen. **39**, 15073-15082 (2006). 査読有.
13. Hiroto Kuninaka and Hisao Hayakawa, Contact and Quasi-Static Impact of a Dissipationless Mechanical Model, J. Phys. Soc. Jpn. **75** (2006) 074001, 1-5. 査読有.

[学会発表] (計 15 件)

1. 早川尚男、大槻道夫、鄭誠虎、駆動粉体系の液体論とMCT, 日本物理学会第64回年次大会, 2009.3.28, 於立教大学
2. Hisao Hayakawa and Michio Otsuki, Can we use mode-coupling theory for sheared granular fluids?, Unifying Concept in Glassy Physics 2008, 2008.11.26, 於京都芝蘭会館
3. Hisao Hayakawa and Taka H. Nishino, FDR preserving field theory of fluctuating hydrodynamics in describing glass transition, Japan-France Bilateral Joint Seminar 2008 "Frontiers of Glassy Physics", 2008.11.20, 於京大基研.
4. Hisao Hayakawa and Michio Otsuki, Spatial correlations in sheared moderate dense granular gases, Granular Gas 2008, 2008.9.11, 於Schloss Thurnau
5. Hisao Hayakawa and Hiroto Kuninaka, Super-elastic collisions of thermally activated nanoclusters, International Summer School-Conference: Advanced Problems in Mechanics 2008, 2008.7.8, 於St. Petersburg.
6. 早川尚男, Mode-coupling theory of sheared dense granular liquids, 日本

- 物理学会第 63 回年次大会, 2008. 03. 26, 近畿大学
7. Hisao Hayakawa and Michio Otsuki, The long-time tails in granular fluids, 50th anniversary of the Alder transition, 2007. 11. 29, ウェルシテイ金沢.
 8. Hisao Hayakawa, Universal description of jamming and glass transition, Unified concepts in glass transition, 2007. 11. 23, 九州大学.
 9. 早川尚男、大槻道夫, 自由冷却粉体ガスのロングタイムテール, 日本物理学第62回年次大会, 2007. 09. 24, 北海道大学.
 10. Hisao Hayakawa and Michio Otsuki, The long-time tails in granular fluids, STATPHYS23, 2007. 07. 12, Genova.
 11. Hisao Hayakawa and Michio Otsuki, The long-time tails in granular fluids, STATICS AND DYNAMICS OF GRANULAR MEDIA AND COLLOIDAL SUSPENSIONS, 2007. 07. 04, Naple.
 12. 早川尚男、粉体ガスにおける剪断流と自由冷却の関係及び相関効果, 日本物理学会春期大会, 2007. 3. 21, 鹿児島大学
 13. 早川尚男、粉体ガス研究の現状と問題点、粉体物理の現状と展望、2006. 12. 25, 京大基研.
 14. Hisao Hayakawa and Kuniyasu Saitoh, Kinetic Approach to the Rheology of Granular Fluids, 2006. 10. 26, 於国際高等研究所.
 15. Hisao Hayakawa, Rheology of a granular shear flow, Tamura Symposium, 2006. 5. 23, 東京大学.

[図書] (計 2 件)

1. 早川尚男、非平衡統計力学、サイエンス社、(臨時別冊数理科学 SGC ライブラリ 54), 2007, 159 頁.
2. 生井澤寛編著、堂寺知成、伏見譲、早川尚男、今田正俊著、複雑システム科学、財団法人放送大学教育振興会、pp. 137-177 (総頁数 268).

[その他]

1. 報道関連情報：東京新聞、中日新聞 2009 年 4 月 28 日朝刊に記事。Science News (May 9th., vol. 175, #10, p. 13, 2009), Physical Review Focus (v23, st10, April 3, 2009), Nature Nanotechnology (vol. 4, April 17, 2009) 等で研究紹介記事が出た。
2. Hisao Hayakawa, JPSJ News and Comments

- 42(2008) で New Scaling Laws for the Jamming Transition を著し、T. Hatano: J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008) 123002. の紹介を行った。また物理学会誌に書評、学会関係等の記事をこの 3 年で多数著す。
3. 日本物理学会理事(2006 年 9 月から 2008 年 8 月) に就任、特に大会担当理事、領域委員会委員長として物理学会の運営を担い、物理学会若手奨励賞の設立、レビューセッションの設置等、各種新機軸を出した。2008 年アメリカ物理学会 (ニュー・オーリーズ) にも参加し、日本物理学会の活動の広報に務めた。
 4. 学術誌 Progress of Theoretical Physics のエディター兼理論物理学刊行会理事 (2008 年 4 月より) として学術論文誌の運営の一翼を担う。PTP のインパクトファクターについての文章を物理学会誌に著す。
 5. 国際会議: Japan-France Bilateral Joint Seminar 2008 “Frontiers of Glassy Physics” (Nov. 19-22, 2008), 於京大基研を主催する。他に国内研究会「粉体物理の原状と展望」(於京大基研) も主催して研究者の便宜を図る。また 2006 年物理学会でシンポジウム「レオロジー研究の新展開」を企画する。(「はじめに」を講演)。更に日本物理学界第 64 回年回 (2009 年 3 月) においてもシンポジウム「ジャミング転移」を企画、立案して研究者への便宜を図った。
 6. 研究に関連した日本語の解説として、日本物理学会誌 61 巻 428 (2006) 「マクロ物体の非弾性衝突—はねかえり係数には危険が一杯—」がある。
 7. ホームページ <http://www2.yukawa.kyoto-u.ac.jp/~hisao/> にある。

6. 研究組織

(1) 研究代表者

早川 尚男 (HAYAKAWA HISAO)、京都大学・基礎物理学研究所・教授、(研究者番号 90222223) .

(2) 研究分担者

なし。

(3) 連携研究者

なし。