

様 式 C - 1 9、F - 1 9 - 1、Z - 1 9 （共通）

## 科学研究費助成事業

## 研究成果報告書



令和 5 年 6 月 1 6 日現在

機関番号：3 2 6 0 6

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2021 ~ 2022

課題番号：2 1 K 2 0 3 5 5

研究課題名（和文）ジャミング転移における摩擦の影響の理論的研究

研究課題名（英文）Effects of friction on jamming transition

研究代表者

池田 晴國（Ikeda, Harukuni）

学習院大学・理学部・助教

研究者番号：3 0 9 1 1 7 6 3

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,200,000 円

研究成果の概要（和文）：砂粒や、穀物、ビー玉、M&Mキャンディー等の、マクロな構成粒子からなる粒の集まりを粉体と呼ぶ。粉体を圧縮していくと、ある密度で突然、有限の剛性を持ち固体のように振る舞い始める。これがジャミング転移と呼ばれる現象である。ジャミング転移は、粉体系を圧縮した際に普遍的に見られる現象であり、非平衡系における相転移の代表例として広く注目を集めている。ジャミング転移点近傍では、圧力や剛性率などがべき的な振る舞いを示し、転移点直上では相関長や緩和時間が発散することが知られている。我々は、これらのジャミング転移の臨界的な側面に関する理解を深めるため、数値シミュレーションと平均場理論を用いて研究を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

砂や、穀物を始めとして、我々の身の回りには、数多くの粉体が存在する。ジャミング転移は、この粉体を圧縮していった際に見られる普遍的な現象であり、粉体の粘弾性を理解する上で重要な役割を果たすことが期待される。また、粉体の流動化という点において、ジャミング転移は、雪崩や地震等とも類似した現象であり、これらの現象を理解する礎になる可能性がある。

研究成果の概要（英文）：A collection of macro particles, such as sands, grains, M&M candies, and so on, is referred to as a granular material. When a granular material is compressed, at a certain density, it suddenly begins to exhibit finite rigidity and behaves like a solid. This is the so-called jamming transition. The jamming transition is a universal phenomenon observed when granular systems are compressed, and it has been attracting a lot of attention as a representative example of phase transitions in non-equilibrium systems consisting of macroscopic particles. Near the jamming transition point, several physical quantities, such as pressure and stiffness, show power-law behavior, and at the transition point, correlation lengths and relaxation times diverge. In this work, we performed numerical simulation and mean-field calculations to deepen our understanding of these critical aspects of the jamming transition.

研究分野：粉体物理学

キーワード：非平衡 相転移 粉体 ジャミング転移 レプリカ法

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

## 1. 研究開始当初の背景

砂粒や、穀物、ビー玉等の、短距離相互作用するマクロな粒子の集まりを粉体と呼ぶ。密度の小さな粉体は流体的に振る舞うが、圧縮していくと、ある密度で突然固体のように振る舞い始める。これがジャミング転移と呼ばれる現象である。ジャミング転移は、粉体のレオロジーを理解する上で重要であるだけでなく、非平衡系における相転移の代表例として、統計物理学の分野でも活発に研究されている。

ジャミング転移を示す最も簡単なモデルは、摩擦が無い球形粒子からなる系である。近年、ノーベル賞受賞者である G. Parisi 氏とその共同研究者によって、摩擦が無い球形粒子のジャミング転移についての平均場理論が確立された。驚くべきことに、平均場理論によって計算される臨界指数は、三次元の数値シミュレーションや、実験で観測される値と誤差の範囲で厳密に一致することが報告された。

## 2. 研究の目的

本研究の目的は、G. Parisi 氏等の平均場理論をもとに、ジャミング転移についての物理的理解を押し進めることである。具体的には、以下の4つの研究を行った。

(1) 二点相関関数に関わる臨界指数の決定：イジング模型などの臨界点では、2点相関関数がべき的な振る舞いを示す。このべきの値は、臨界指数と呼ばれ、系の対称性や次元にのみ依存し、系の微視的詳細には依存しない普遍的な値を取ることから、臨界現象を理解し分類するために重要な役割を果たしてきた。興味深いことに、先行研究で、ジャミング転移においても、転移点直上における2点の密度相関関数がべきな振る舞いを示すことが報告されていた。しかしながら、関連する臨界指数の具体的な値については、小規模なシミュレーションの結果があるのみで、有限サイズ効果を含めた系統的な研究は行われて来なかった。本研究では、大規模数値シミュレーションによって、ジャミング転移点直上における2点相関関数に関する臨界指数を正確に計算した。

(2) 非球形粒子のジャミング転移：ジャミング転移を示す最も簡単なモデルは、摩擦が無い球形粒子からなる系である。この系については、これまで、平均場理論や数値シミュレーションによる数多くの研究が行われてきた。一方で、現実の粉体は、当然完全な球ではなく、より複雑な形状を持っている。このような非球形粒子でも、球形粒子と同じ臨界的な振る舞いがみられるのだろうか？我々は、この疑問を数値シミュレーションによって検討した。

(3) ジャミング転移点近傍での振動状態密度：低温の固体の物性を特徴づける上で、重要な物理量の1つは、振動状態密度である。完全な結晶では、低周波数の振動モードは、フォノンであり、したがって、振動状態密度は、デバイ則に従う。一方で、ジャミングした系のようなアモルファス固体では、低周波数で、多数の非フォノンモードが励起することが報告されている。これらの非フォノンモードによって、振動状態密度に表れるピークは、ボゾンピークと呼ばれ、アモルファス固体の物性を理解する上で重要な役割を果たすことが期待されている。特にジャミング転移点近傍では、振動状態密度に、プラトー領域が表れることが知られており、これが、転移点近傍における剛性率や緩和時間等を支配すると考えられている。

したがって、振動状態密度を理論的に正確に計算することは、ジャミング転移を記述する理論

を構築する上で、必要不可欠な重要なステップである。本研究では、摩擦が無い球形粒子からなる系のジャミング転移点近傍における振動状態密度を第一原理的に計算し、数値シミュレーションの結果と比較した。

(4) ジャミング転移点近傍でのゆらぎ：イジング模型などの臨界点に近づいていくと、物理量のゆらぎの相関長が増大し、転移点直上では、ゆらぎが発散することが知られている。むしろ、ゆらぎの発散こそが臨界現象を特徴づけると言っても過言でない。一方で、ジャミング転移の場合には、これまで、物理量の平均値が示す臨界的な振る舞いについては、数多くの研究が行われてきたものの、そのゆらぎについての系統的な研究はほとんど行われて来なかった。本研究では、数値シミュレーションによって、ジャミング転移点近傍における、物理量のゆらぎの定性的・定量的な振る舞いを明らかにした。

### 3．研究の方法

(1) 二点相関関数に関わる臨界指数の決定：本研究では、数値シミュレーションによって、臨界指数の計算を行う。臨界指数を数値的に精度良く調べるための方法の1つは、有限サイズスケーリングを行うことである。ジャミング転移においては、剛性率や圧力などの物理量の平均値についての有限サイズスケーリングは、すでに、確立されている。しかし、今興味がある、2点相関関数については、どのように有限サイズスケーリングを行うべきか明らかになっていなかった。本研究では、まず、ジャミング転移の平均場理論を用いて、転移点近傍で、2点相関関数が満たすべきスケーリング則を導いた。その後、そのスケーリング則に基づいて、数値シミュレーションの結果を解析し、臨界指数を決定した。

(2) 非球形粒子のジャミング転移：非球形粒子としては、楕円体や、立方体を始めとして無数の形状を考えることが出来る。従って、それら全ての形について系統的な数値シミュレーションを行うのは現実的では無い。この問題を解決するために、我々は、粒子の形が球に近い場合に限定して数値シミュレーションを行うことにした。この場合には、粒子の形を完全な球から接道展開し、結果をフーリエ級数を用いて表すことが出来る。フーリエ展開して現れた係数を系統的に変化させることで、粒子形状が球からずれることによる影響を系統的に調べることが可能になる。

(3) ジャミング転移点近傍での振動状態密度：振動状態密度を計算するためには、相互作用ポテンシャルの二回微分から定義されるヘシアン行列を対角化し固有値を求める必要がある。このために、我々は、ヘシアン行列をランダム行列を用いて近似する手法を提案した。この手法を用いると、固有値分布と、さらに、転移点近傍における、粒子間の接触数を第一原理的に計算することが可能になる。

(4) ジャミング転移点近傍でのゆらぎ：粉体などのマクロな構成粒子からなる系は、熱ゆらぎの影響が無視できる、絶対零度の系である。そのため、物理量のゆらぎをどのように定義するかは非自明な問題である。そこで、我々は、異なる初期条件から出発し、絶対零度に急冷することで多数のサンプルを用意し、そのサンプル間の物理量の分散を測定することにした。また、コントロールパラメーターとしては、数値シミュレーションで良く用いられる密度に加えて、より実験の設定に近い圧力も用いて、計算を行った。

### 4．研究成果

(1) 二点相関関数に関わる臨界指数の決定：大規模数値シミュレーションによって、ジャミング転移における二点相関関数を計算し、関連する臨界指数を決定した。3次元では、臨界指数の値は、平均場理論が予想する値と一致した。一方で、2次元では、平均場理論の予想に対数補正が表れることが明らかになった。この結果は、ジャミング転移における、上部臨界次元が、2次元であることを強く示唆している。

(2) 非球形粒子のジャミング転移：二次元の数値シミュレーションの結果、粒子の形が球からわずかにでもずれると、球形粒子とは定性的に異なる振る舞いが観測された。特に、非球形粒子の場合には、2点相関関数は、ジャミング転移点でも、べき的な振る舞いを示さないことが明らかになった。これらの結果は、我々が以前発展させた、非球形粒子のジャミング転移の平均場理論と整合することが分かった。

(3) ジャミング転移点近傍での振動状態密度：摩擦が無い球形粒子の場合に、転移点近傍における、振動状態密度を理論的に計算した。得られた結果は、先行研究の数値シミュレーションによる結果と、定量的に一致することが分かった。また、理論とシミュレーションの一致は、空間次元を上げるほど改善されることが分かった。この結果は、我々の理論が平均場極限に対応する、高次元極限で厳密になることを示唆している。

(4) ジャミング転移点近傍でのゆらぎ：二次元の摩擦が無い球形粒子についての数値シミュレーションにおいて、転移点近傍における物理量のゆらぎを測定した。その結果、圧力をコントロールした場合には、ゆらぎが発散しないのに対して、密度をコントロールした場合には、ゆらぎが発散することが分かった。つまり、コントロールパラメーターに依存して、ゆらぎの振る舞いが、定性的に変化してしまうのである。また、ゆらぎの有限サイズスケーリングから、ゆらぎの相関長を計算した。この相関長に関連する臨界指数は、平均場の相関長を支配する臨界指数よりも大きな値を取ることが明らかになった。これらの結果は、これまでのジャミング転移の平均場理論では、説明することができない新規な現象であり、今後の理論を構築していく上で重要な知見を与えるものと考えている。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6件／うち国際共著 2件／うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Ikeda Harukuni	4. 巻 158
2. 論文標題 Control parameter dependence of fluctuations near jamming	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 056101 ~ 056101
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1063/5.0127064	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ikeda Harukuni	4. 巻 2023
2. 論文標題 Bose-Einstein-like condensation of deformed random matrix: a replica approach	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment	6. 最初と最後の頁 023302 ~ 023302
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1088/1742-5468/acb7d6	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ikeda Harukuni, Shimada Masanari	4. 巻 106
2. 論文標題 Vibrational density of states of jammed packing at high dimensions: Mean-field theory	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 24904
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevE.106.024904	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Biroli Giulio, Charbonneau Patrick, Hu Yi, Ikeda Harukuni, Szamel Grzegorz, Zamponi Francesco	4. 巻 125
2. 論文標題 Mean-Field Caging in a Random Lorentz Gas	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 6244 ~ 6254
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jpcb.1c02067	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Charbonneau Patrick、Corwin Eric I.、Dennis R. Cameron、D?az Hern?ndez Rojas Rafael、Ikeda Harukuni、Parisi Giorgio、Ricci-Tersenghi Federico	4. 巻 104
2. 論文標題 Finite-size effects in the microscopic critical properties of jammed configurations: A comprehensive study of the effects of different types of disorder	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 14102
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.104.014102	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Ikeda Harukuni	4. 巻 44
2. 論文標題 Testing mean-field theory for jamming of non-spherical particles: contact number, gap distribution, and vibrational density of states	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The European Physical Journal E	6. 最初と最後の頁 1-11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1140/epje/s10189-021-00116-8	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計5件（うち招待講演 4件 / うち国際学会 1件）

1. 発表者名 池田晴國
2. 発表標題 Control parameter dependence of fluctuation near jamming
3. 学会等名 Japan-France joint seminar "Physics of dense and active disordered materials" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 池田晴國
2. 発表標題 ガラス転移とジャミング転移の数値シミュレーションと平均場理論による研究
3. 学会等名 日本物理学会2023年春季大会 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 池田晴國
2. 発表標題 レプリカ液体論によるジャミング臨界現象の解析
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 池田 晴國
2. 発表標題 非球形粒子のジャミング転移
3. 学会等名 KEK IPNS-IMSS-QUP Joint workshop（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 池田 晴國
2. 発表標題 非球形粒子のジャミング転移の数値シミュレーションによる研究
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織			
	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
フランス	高等師範学校			
米国	Duke University	Colorado State University		