

2022年度（第18回）研究助成報告

研究題名	粉体の輸送現象とレオロジー特性における粘着性と多分散性の役割
研究期間	2022年4月1日～2023年3月31日
研究機関・所属	京都産業大学・理学部 物理科学科
研究者名	齊藤 国靖

1. 研究成果の概要

粉体の輸送現象とレオロジー特性に着目し、分子動力学法による数値シミュレーションを用いて、せん断変形下での粉体粒子の拡散と粉体の粘性率の関係、粉体粒子の固有振動とせん断変形下での粉体の応力降下の関係、および粉体粒子間の接線力が音波物性に与える影響について研究成果を挙げた。まず、粉体粒子の拡散は粒子の平均二乗変位を用いて調べることができ、粉体の粘性率は粒子間に働く力からせん断応力を計算することで求めることができる。いずれも粉体の密度やせん断率によって様々に変化するが、拡散係数と粘性率は常に連動し、一対一の関係にあることを見出した。また、粉体粒子の固有振動はダイナミカルマトリックスを計算することで直接知ることができ、せん断変形下での粉体の応力変化を定量的に予測するのに役立つことを見出した。さらに、音速や散乱係数など、粉体の音波物性が粒子間の接線力の強さにどう依存するかを明らかにした。

2. 助成期間内での研究成果の概要

粉体の輸送現象の中でも、質量の輸送（粒子の拡散）に関する研究を行った。マクロな粒子の集まりである粉体はブラウン粒子の様に揺動力によって拡散することはない。その代わり、変形を受けるなど外力によって系が駆動され、個々の粒子が拡散することがある。そこで、分子動力学法による数値シミュレーションを行い、せん断変形下での粉体粒子の拡散について調べた。まず、粉体は密度の高い状態を保ち、バルクで起こる現象を再現するため、Leed-Edwards 周期境界条件を適用した。これにより、粉体の単純せん断流をシミュレートすることができ、個々の粒子の変位や平均二乗変位など、粒子の拡散に関する数値データを得ることができる。平均二乗変位が長時間後に時間に比例することから、長時間後の粒子の運動は通常拡散していることが解った。また、平均二乗変位から拡散係数を計算し、粉体の密度やせん断率の大きさに対する依存性を調べた。その結果、拡散係数は密度の増加およびせん断率の減少に伴って大きくなることが明らかとなり、圧縮された粉体をゆっくりかき混ぜることが粒子を効率良く拡散させるために重要であることが解った。さらに、粒子の拡散の空間的な不均一性を調べるため、動的不均一性に関する数値解析を行い、やはり密度の増加およびせん断率の減少に伴って、拡散の不均一性が増大することが解った。これらの研究成果は、助成期間内に学術論文にまとめて掲載した。

3. 研究発表

● 学術論文（査読あり）

1. Kuniyasu Saitoh and Takeshi Kawasaki, “Relaxation dynamics and long-time tails explain shear-induced diffusion of soft athermal particles near jamming”, submitted (arXiv:2204.07127).
2. Abhinendra Singh and Kuniyasu Saitoh, “Scaling relationships between viscosity and diffusivity in shear-thickening suspensions”, Soft Matter **19**, 6631 (2023).
3. Kuniyasu Saitoh, Kianoosh Taghizadeh, and Stefan Luding, “Sound characteristics of disordered granular disks: effects of contact damping”, Front. Phys. **11**, 1192270 (2023).
4. Daisuke Ishima, Kuniyasu Saitoh, Michio Otsuki, and Hisao Hayakawa, “Theory of rigidity and numerical analysis of density of states of two-dimensional amorphous solids with dispersed frictional grains in the linear response regime”, Phys. Rev. E **107**, 054902 (2023).
5. Daisuke Ishima, Kuniyasu Saitoh, Michio Otsuki, and Hisao Hayakawa, “Eigenvalue analysis of stress-strain curve of two-dimensional amorphous solids of dispersed frictional grains with finite shear strain”, Phys. Rev. E **107**, 034904 (2023).
6. Kuniyasu Saitoh and Takeshi Kawasaki, “Shear-induced diffusion and dynamic heterogeneities in dense granular flows”, Front. Phys. **10**, 992239 (2022).

● 解説記事（査読あり）

1. 齊藤 国靖「粒子の界面を介して働く力のネットワークと非局所性」、『表面と真空』66巻3号, p. 170-175 (2023年3月)
2. 齊藤 国靖[「粉体のマクロな物性に果たす粘性力の役割」、分子シミュレーション学会誌『アンサンブル』25巻2号, p. 125-130 (2023年4月)