

3 体歯車系のフラストレーション、柔らかさ、閾値性

広島大学 大学院理学研究科 粟津暁紀*

はじめに

本小文では、複数の理想的なモデル歯車からなる簡単な玩具を通して、最もシンプルな力学的フラストレーションの一例と、それによって生じる閾値的な挙動を眺めていく。特に歯車の頑強さ(柔らかさ)が系全体へ及ぼす影響に着目し、相互作用によるフラストレーションや要素の柔らかさ等といったミクロな性質と、系全体のマクロな運動、物性との関係を、少しずつ浮き彫りにしていく。

「歯車」と聞いて我々がすぐイメージするのは、身近な工学機械の中で主に動力伝達、変換の面で活躍している、あの部品であろう。そのような歯車は、一般に硬く頑丈な材料から作られており、その組合せの工夫次第で、実に様々な機能が実現される [1]。

歯車は通常その使用の際に、3つ以上のものが同時に接触しないよう配慮がなされる(図1(a)(b))。その理由はすぐ分かる。例えば3つの歯車があり、各々が別の2つと常に相互作用している状況で、何れか一つにトルクを掛けるとする(図1(b))。この場合残り2つの歯車それぞれに、相反する2つの方向へのトルクが働くことになるため(フラストレートした状況)、この2つは回転できない。更にその事が、トルクの掛かっている歯車の回転をも阻害するため、結局3つとも(容易に)回転出来ない。つまりこのような状況では、歯車本来の機能が実現されないのである。これは機械工学の、というよりは生活の上での常識であり、そうならないよう配慮することは機械設計の基本中の基本であろう。

ここで少し視点をずらし、物質の構成要素スケールの世界を眺めてみる。そのような世界でも歯車様のものは、多々思い浮かべられるだろう。例えば表面のごつごつした岩石や砂、もう少し細かい様々な粉体は、その典型である。また星(ヒトデ)状のコロイド粒子や枝わかれた polymer 等など、いわゆるソフトマター系と呼ばれるシステムを構成する主役たる要素の多くで、形の異方性や凹凸がよく見られる。一般にこれらの系では、要素同士が複数同時に相互作用するので、例えば複数の歯車が噛み合ったかのような、様々な形の「絡み合い」が、内部に現れる。そしてそのようなミクロな性質、構造が、マクロな物性に大きな影響を及ぼすようである [2, 3, 4, 5, 6, 7]。

よって歯車の絡み合いを、物質系のミクロな絡み合いのメタモデルとして捉え直す事で、様々な系の大雑把な性質を幾らか捉えられるのでは、と期待できる(図1(c)にイメージ)。しかしこのような系の構成要素には、当然、その物性が頑丈な歯車で例えられそうなものもあれば、それと大きく異なる、例えば非常に柔らかく大変形する、というものまである。またこのような個々の要素の物性(硬さ等)は、一般に溶媒中の低分子やイオン等の修飾によっても、大きく変化し得る。

そこでこのような物質系の挙動を考えるには、硬く頑丈なものから柔らかく変形し易い物まで、系統的に考察する必要がある。そこで今回、変形し易さを簡単に制御できるような理想的な歯車のモデルを提案し、そのような歯車の結合系の動的、統計的性質について議論してみる。そして

*E-mail: awa@hiroshima-u.ac.jp

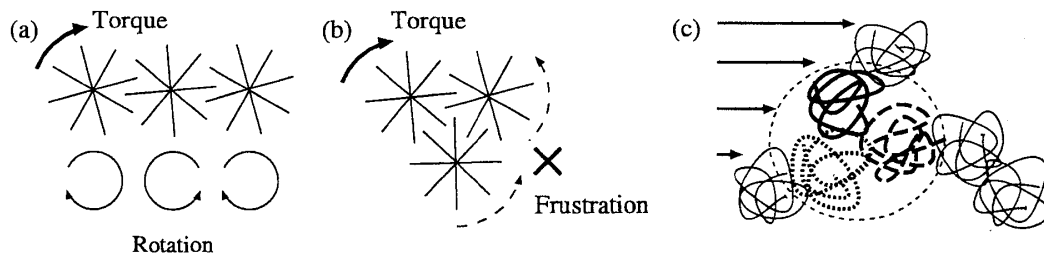


図 1: 歯車使用の際の (a) 正しい配置 と、(b) フラストレーションが生じる配置。(c) 高分子混合溶液系のマイクロ描像。

実際に、個々の歯車が硬く頑丈である場合と、歯車が柔らかく大きく変形するような場合で、歯車間の絡まり、フラストレーションはどのように影響し、どのように系全体の (マクロな) 物性、挙動を変化させるのか、という疑問について考えてみる。

モデル

理想的なモデル歯車の結合系を、以下のように構築する (図 2 (a) を参照)。まず、ある一端が回転軸に繋がれ、もう一端に斥力相互作用をする粒子を付けた、2次元空間中を回転する長さ 1 の剛体棒を用意する (図 2 (a) 左)。ここで一つの回転軸を幾つかの棒で共有させると、各棒の粒子同士の斥力により、図 2 (a) のような歯車状の構造を一つ構成できる (図 2 (a) 右)。これを一つの歯車と見做す。この歯車を複数構成し、各回転軸を空間に固定することで、結合歯車系が構成される。ここで各棒の先端にいる粒子の運動は、以下の方程式に従うとする。

$$\dot{\mathbf{r}}_j^i = -\nabla \left[\sum_{(i'=i, j'>j) \text{ or } (i'>i)} C_{j,j'}^{i,i'} V(|\mathbf{r}_j^i - \mathbf{r}_{j'}^{i'}|) \right] + \mathbf{F}_j^i \quad (1)$$

$$V(r) = \frac{1}{2\pi r} \quad (2)$$

ここで i, i' を歯車の番号、 j, j' を各歯車に属する粒子の番号とし、 \mathbf{r}_j^i を各粒子の位置、 \mathbf{F}_j^i を各粒子に掛かる外場とする。この小文で念頭においている対象は、高分子溶液系、コロイド溶液系などであるので、各粒子は過減衰型の力学に従うとした。今回は粒子間斥力として、式 (2) のような形を用い¹、各粒子間斥力の強さ $C_{j,j'}^{i,i'}$ を、 $C_{j,j'}^{i,i'} = A$ ($i = i'$)、 $C_{j,j'}^{i,i'} = 1$ ($i \neq i'$) とした。この系では、粒子の運動が歯車の各歯の運動を表し、同一の歯車に属する粒子間の斥力の強さ A を変えることで、個々の歯車の硬さを連続的に変化させることができる。また各歯車の中心間の距離 L を、歯車の直径に対し適度に小さくすることで、歯車同士の噛み合いを十分強くする。以下本小文では、1つ当たり3つの歯を持つ歯車が、 $L = 1.8$ として複数結合された場合を例に、考察を進める。

まずこのモデルが、通常我々が目にする歯車と同様の挙動を示すことを確認するため、十分硬い歯車が2つ結合しているような、「正しい使い方」をした場合の系の動きを見る。図 2 (b) は、十分硬い歯車 ($A = 70$) が2つ結合している状況で、一つの歯車に、時間的に一定の時計回りの外

¹ 棒の先端に磁石がはめ込まれたこのような玩具が、実際に市販されている。

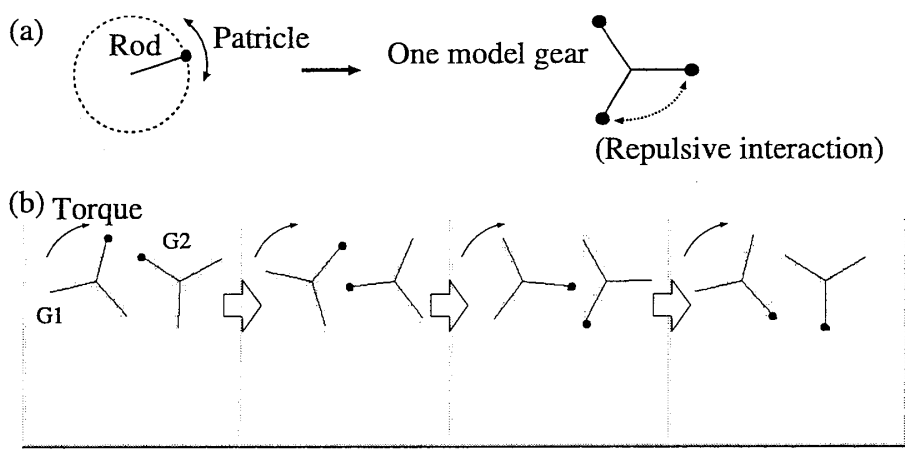


図 2: (a) 歯車モデルの概要図。(b) 硬い歯車が2つ結合した系の典型的な時間発展。●は目印。

部トルクを掛けた際に見られる、系の典型的な時間発展を示したものである。この図より、外部トルクの掛けられた歯車(図2 (b) 左)の時計回り方向への回転に伴い、もう片方の歯車(図2 (b) 右)が反時計回りに回転する様子が分かる。この場合、このような回転運動は周期的に繰り返される。よって片方からもう片方への回転動力の伝達、という歯車本来の機能が実現される。

結合歯車系の挙動

理想的な歯車モデルが構成できたので、その歯車を3体結合し、それぞれが互いに絡み合った状況で現れる挙動を議論する。特にここでは、性質の様な3つの歯車を、各々が他の2つと常に十分影響しあえるよう正三角形状に配置し、その上で、一つの歯車に時間的に一定の外部トルクを掛けた際に現れる、系の振舞いを眺めていく。以下、外部トルクの掛けられている歯車をG1、掛けられていない他の歯車を、その配置の時計回り順にG2、G3と呼ぶ(2体歯車系ではG1、G2のみ)。ちなみにこのモデル系は、時間的に一定の外部トルクが掛けられた場合、歯車の個数や配置や硬さに依らず、静止もしくは周期運動のみを示す。

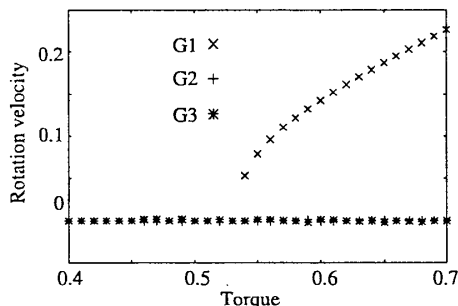


図 3: 硬い歯車が3体結合した系での外部トルク - 平均回転速度 関係。

まず図3は、硬い歯車 ($A = 70$) が3体結合した場合に見られる、外部トルクと各歯車の平均回

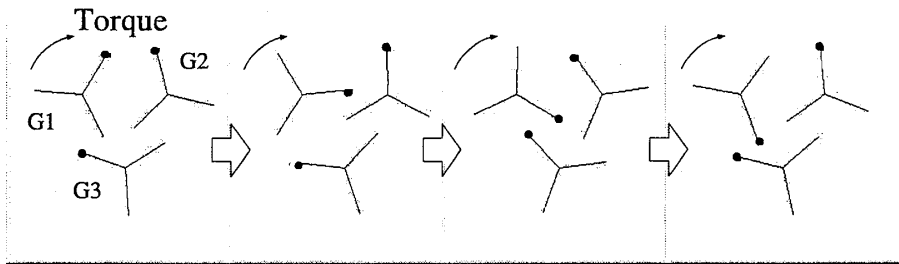


図 4: 硬い歯車が3つ結合した系の典型的な時間発展。

転速度の関係を示したものである (時計回り方向を+としている)。まずトルクが小さい場合、各歯車の平均速度は0になる。これは、小文の初めの方での予想通り、硬い歯車が3つ同時に接触すると、その相互作用によるフラストレーションによって、何れの歯車も回転できなくなることを意味している。しかし歯車が硬いとはいえその硬さが有限である場合、微小ながら変形が可能である。よって十分大きな外力下では、何れかの歯車が回転可能であるかもしれない。実際ある閾値より大きな外部トルクが掛かると、そのトルクの掛かっている歯車は回転を始める。しかし他の2つの歯車には、相変わらずそれぞれ相反する方向へのトルクが働いたため、多少振動する程度で回転はできない。図4に、それぞれの歯車が動いている時の時間発展を示す。外部トルクの掛かっている歯車 (G1) のみが、空回りしているのが分かる。

次に、歯車がある程度柔らかく、大きく変形出来るとした場合の系の挙動を眺めてみる。まず図5 (a) は、柔らかい歯車 ($A = 7$) が二つ結合した状況で、片方の歯車 (G1) に外部トルクを掛けた時の典型的な時間発展である。大方予想されていたと思われるが、柔らかい歯車は互いに斥け合い変形するため、噛み合いが不十分になる。よって、回転動力の伝達という歯車本来の機能が実現できない。では、そのような柔らかい歯車が3体同時に相互作用するような状況では、どのような挙動が現れるのだろうか。

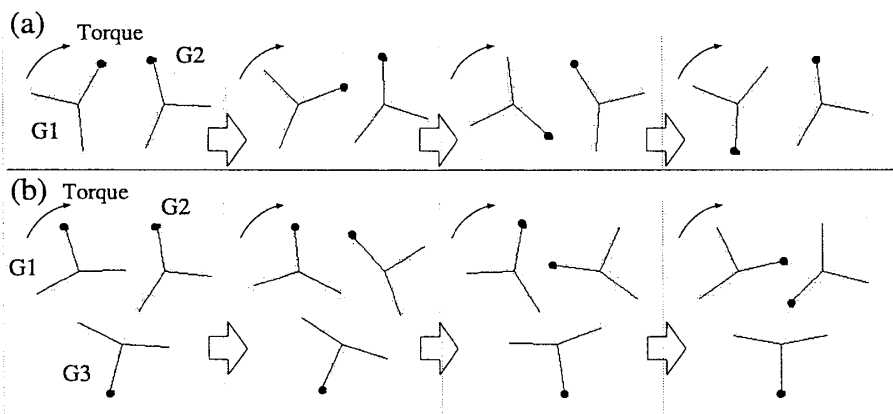


図 5: (a) 柔らかい歯車が2つ結合した系の典型的な時間発展。(b) 柔らかい歯車が3つ結合した系の典型的な時間発展。

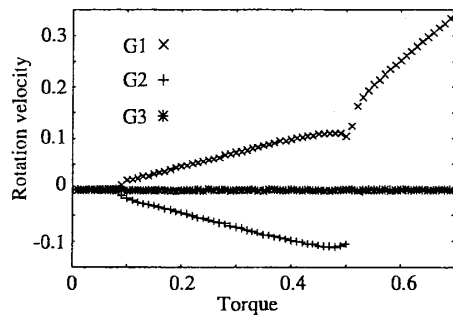


図 6: 柔らかい歯車が 3 体結合した系での外部トルク - 平均回転速度 関係.

図 5 (b) は、柔らかい歯車 ($A = 7$) が 3 体結合した状況で、一つの歯車 ($G 1$) に時計回りの外部トルクが掛かったときの典型的な時間発展を示したものである。この図から、 $G 1$ が時計回りに回転するのに伴い、 $G 2$ が反時計回りに回転している様子が伺える²。このように柔らかい歯車系では、硬い歯車系と異なり、3 体同時に相互作用するような場合に、ある歯車から他への回転の伝達が起こる。系の対称性から、 $G 1$ に反時計回りのトルクが掛かれば、 $G 3$ が時計回りに回転する。また歯車の配置が正三角形から少しずれた場合でも、定性的に同じ事は起こる。

図 6 は柔らかい 3 体歯車系において、 $G 1$ に時計回り方向へ一定の外部トルクを掛けた場合の、トルクと各歯車の平均回転速度の関係を示したものである (時計回り方向を+としている)。まず硬い 3 体歯車系同様、系に何らかの回転が生じるには、ある閾値以上のトルクを掛ける必要があることが分かる。そしてその閾値以上ではあるが、あまり強くないトルクが掛かっている場合、 $G 1$ と $G 2$ がそれぞれ時計回り、反時計回りに回転することが分かる。ここでこの 2 つの平均回転速度は等しく、またトルクに対し単調に増加する。しかし $G 1$ に掛けられたトルクが更に強くなり、ある閾値を越えると、 $G 2$ は回転しなくなり、 $G 1$ のみが空回りするようになる。このとき、それまで $G 1$ と $G 2$ に分配されていたトルクが $G 1$ のみに集中するため、外部トルクに対する $G 1$ の回転速度、及びその増加率が増大する³。

このように柔らかい 3 体歯車系では、回転しない状態、トルクが (系の奥へ) 伝達し 2 体の歯車が協同的に回転する状態、トルクを受けた歯車だけが空回る状態、の 3 つの状態が現れる。

力の伝達と動きの様子

ここで、硬い 3 体歯車系と柔らかい 3 体歯車系の動きの違いを、それぞれの内部での力の伝わり方から考える。図 7 はそれぞれ、(a) 十分硬い歯車系、(b) 柔らかい歯車系、において、一つの歯車 ($G 1$) に時計回り方向のトルクを掛けた場合の、各歯車間に働く力の方向を示したものである。まず歯車が十分硬い場合、時計回りのトルクを受けた $G 1$ は、 $G 2$ 、 $G 3$ をそれぞれ反時計回りに回す方向へ力を及ぼす。しかし図 7 (a) が示すように、 $G 2$ の $G 3$ 近傍の歯と、 $G 3$ の $G 2$ 近傍の歯 (図 7 (a) の 1、2) の間では、これらの歯の回転と相反する方向に (近い向きの) 力が働

² あまり柔らか過ぎると、このような事はおこらない。程々の柔らかさであることが必要 [8]。

³ 本小文では触れないが、Shear-Thinning 等との関係は、考えてみたい問題である。また、この 2 つめの閾値近傍に、 $G 1$ の平均回転速度が外部トルクの減少関数になる部分がある。これも非線形応答現象 (Shear-Thickening 等?) として何か意味を考えるべきものかも知れない。

く。よってG2、G3はともに回転できない。

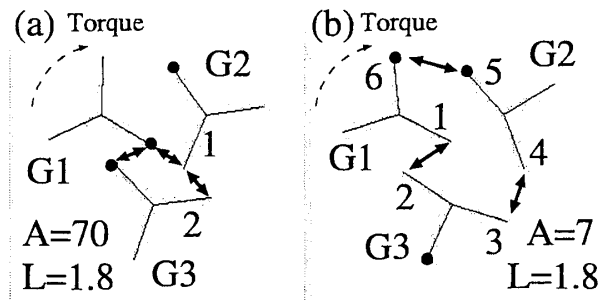


図 7: 3体の歯車のうち、一つ(G1)だけにトルクが掛かっている場合の力の及ぶ方向関係。(a) 硬い歯車系。(b) 柔らかい歯車系。

それに対し歯車が柔らかく大きく変形出来る場合は、事情が異なる。まずそれぞれの歯車が互いに斥けあうため、3体の歯車が構成する三角形の縁近傍で、図7(b)で示されているような相互作用関係が現れる。この結果次のような形で、G1の回転動力がG2に伝搬する。まずG1の三角形中心付近の歯(図7(b) 1)が、G3のG1近傍にある歯(同 2)を三角形の外側向きに押す。その結果、G3に反時計回りのトルクが掛かる。ここでG3に掛かるトルクに伴い、G3のG2近傍にある歯(3)が、G2のG3近傍にある歯(4)を三角形の外側向きに押す。その結果、G2に反時計回りのトルクが掛かり、G2のG1近傍にある歯(5)は三角形の中心へ向かう力を受ける。またこの時、外部トルクによってG1のG2近傍にある歯(6)も、三角形の中心へ向かう力を受けている。しかしこのG1の歯(6)は、G2の歯(5)との相互作用により、外部トルクと相反する方向の力も同時に受けるため、回転が妨げられる。よって、まずG2のG1近傍にある歯(5)が先に三角形中心へ向かい、その後G1のG2近傍にある歯(6)が、外部トルクに従って回転する。この際これらの歯の回転によって、G3の回転は妨げられる。

このように、G1に掛けられた時計回りのトルクは、G3を介して、G2に伝達されていく。系の対称性から、G1に反時計回りのトルクが掛かれば、G3が時計回りに回転する。また、G1以外の歯車にトルクが掛かった場合でも同様である(図8)。このように、同じように設計された系においても、各歯車の硬さというマイクロな違いが、系全体の運動、外力に対する応答性に大きな変化をもたらすことが分かる。

温度勾配下にある柔らかい3体歯車系の挙動

ここで少し視点を変えて、柔らかい3体歯車系を温度勾配下に置いた際に現れる、やや非自明な共同的回転運動について紹介する。簡単な場合として、G1に温度Tの熱浴が、G2及びG3に温度0の熱浴が接触している場合を考える(図9(a))。

図9(b)と(c)は、与えられた温度勾配下における、各歯車の回転数の典型的な時間変化を示したものである。ここで回転数は、時計回り方向を+としている。まずこれらの図がおおよそ示す

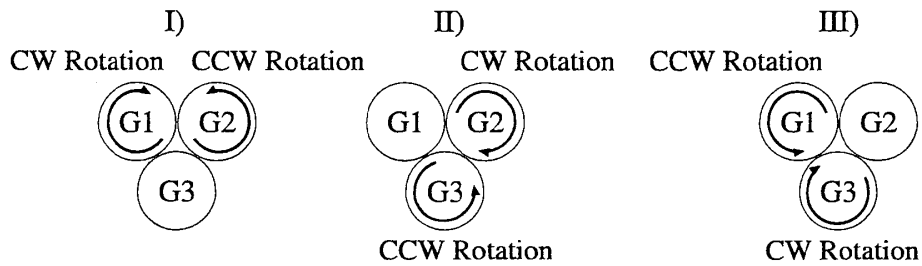


図 8: 柔らかい3体歯車系で可能になる、2つの歯車の協同的な回転。

ように、G1は常に平均回転数0のブラウン運動をする。それに対しG2、G3は、まずTがあまり大きく無い場合、図9(b)で見られるように平均して、それぞれ反時計回り、時計回りに回転する。それに対しTがやや大きくなった場合、G2、G3は図9(c)で見られるように、平均してそれぞれ時計回り、反時計回りに回転するようになる。図9(d)に、G2、G3の平均的な回転速度のT依存性を示す。このように柔らかい3体歯車系では、温度勾配によって2つの歯車に一方方向性の回転が生じ、またそれぞれの回転方向が、温度によって変化することが分かる^{4 5}。

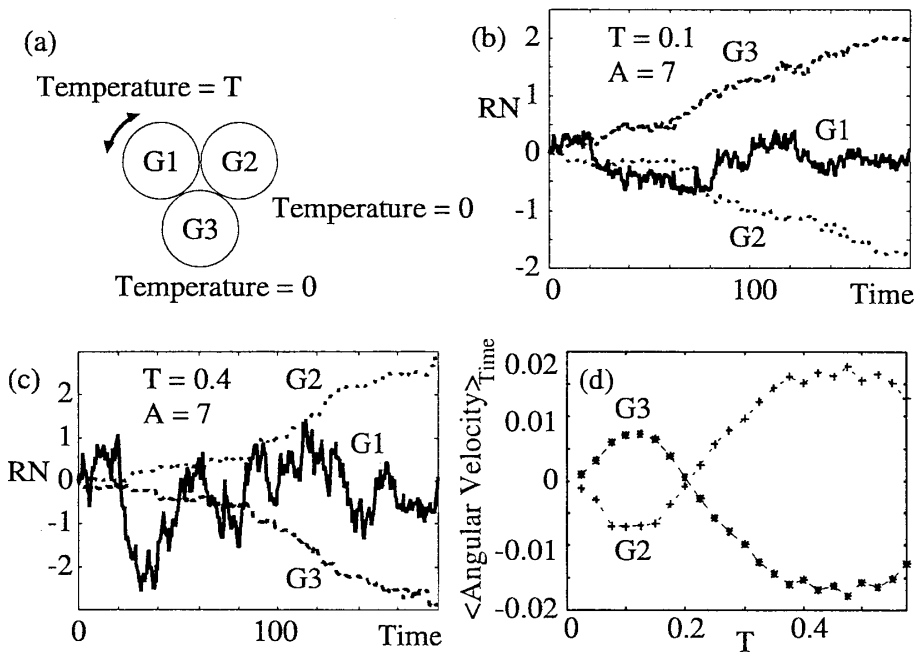


図 9: (a) 温度勾配下にある柔らかい3体歯車系。(b)(c) 柔らかい3体歯車系に温度勾配を与えたときの挙動、(b)T=0.1 (c) T=0.4。(d) G2、G3の平均回転速度のT依存性。

このような回転の発生と、回転方向のT依存性について、以下定性的な説明を試みる。まず全ての歯車が同じ温度の熱浴に接している場合、図8に示されている3種類の共同的回転の特徴的

⁴ オンサーガー係数の符号が逆転する。

⁵ 図9では示し切れていないが、Tを更に大きくするとG2、G3の平均回転速度は0まで減少していく。

速さは、全て等しい。それに対しG 2、G 3が温度0の熱浴に接している場合、これらに働く平均のトルクは、G 1に働くものに比べ弱くなる。そこでG 1の接している熱浴の温度Tがあまり大きくなく、常に(空回りを起こさない)適度な大きさのトルクがG 1に作用する場合、図8のI)、III)で示されている「G 1時計回り、G 2反時計回り」回転、及び「G 1反時計回り、G 3時計回り」回転の特徴的速さは、II)で示されている「G 2時計回り、G 3反時計回り」回転に比べ、大きくなる。そのためG 2、G 3は、平均的にそれぞれ反時計回り、時計回りに回転する。

次にTが大きく、G 1-G 2間、G 1-G 3間で頻繁に空回りが生じる程大きなトルクが、G 1に作用する場合を考える。このような場合その空回りのため、図8のI)及びIII)で示されている回転の頻度が減少する。またTが増加した場合、G 2、G 3に働くトルクの平均的な強さが増加するため、II)で示されている回転の特徴的速さは大きくなる。よってある適当なTでは、I)及びIII)で示されている回転に比べ、II)で示されている回転の方が、系の運動により強く寄与する。このことから、G 2、G 3の平均的な回転は、それぞれ時計回り、反時計回りになる。

ここで更にTを増大させていくと、やがてG 2-G 3間においても空回りが生じるため、これらの回転は小さくなっていくと考えられる。

このように、絡み合いと柔らかさによって生じる力学的な閾値性によって、熱的な作用に対しても閾値的な応答が現れる。

最後に

本小文では、硬い歯車、柔らかい歯車の3体結合系が示す、フラストレーションや歯車の変形によってもたらされる、運動の閾値性や変化について紹介した。最後に本小文で扱った系と、様々な物質系、特に近年ソフトマター系と括られる、高分子、コロイド混合溶液系や、粉体系の変形、流動との関連を、少し考える。

現実の物質系でのフラストレーションや、それによる閾値的な性質の原因は、構成要素の内部の不均一性、例えば電荷分布の非一様性や形の異方性、等に伴う動的な「絡まり」であると考えられる。よってこの「絡まり」が引き起こしうる諸過程の理解が、現実にかかる多様なレオロジー特性、非線形な粘弾性や遅い緩和を理解する上で、重要かつ基礎となる部分であろう。今回扱った結合歯車系は、簡単な玩具ながら多体相互作用によるフラストレーションや、それによる閾値的な性質が、自然な形で実現している。よって、このような玩具遊びも、ソフトマター系の様々な側面の理解に対し、「絡まり」という入口から一つの道を広げているのでは、と楽観している⁶。

本小文では、同時に接触している歯車の数が2つや3つと、相互作用が疎な状況のみを考えきた。当然、物質系を系統的に考察するには、このようなケースのみからの議論では事足りない。しかし幾つかの系の局所的な状況に関しては、今回考察したような系と似た性質を持つ可能性がある。例えば希釈コロイド溶液では、コロイド粒子同士が不均一なネットワーク構造を形成することが、実験、シミュレーションで知られている。そしてこのようなネットワークは、今回考えたような少数の要素が疎に絡み合った構造をモチーフに、構成されているように見える [12, 11]。またランダムにパッキングされた粉体で応力伝達経路を可視化してみると、そのネットワークは疎なものであり、各粒子は、実質的に少数の粒子としか相互作用していないように見える [13]。

⁶ 箱に球を2つ入れただけ、周期ポテンシャル中に2つ粒子をおいただけの玩具でも、流動の閾値性や遅い拡散、非線形粘性などが自然に現れる [9, 10]。

よって上記のようなケースについては、今回の得られた知見の幾らかが、すぐに活用出来るかもしれない。しかしやはり足りない部分は多く、熱の効果、各要素の重心運動と回転運動とのカップリング効果、密度効果、など系統的に議論すべき所は山程ある。本研究はまだ入口を掘ったに過ぎず、今後様々な方向から掘り進められることを期待する。

本研究に至るきっかけとなった片岡直人氏(とその作品)に感謝します。またこの研究は、日本学術振興会特別研究員奨励費(1610039)の支援を受けたものである。

参考文献

- [1] 伊藤茂, 「メカニズムの事典」(理工学社 1983)
- [2] O. V. Borisov, J. Phys. II France **6** (1996) 1.
- [3] P. C. Holdsworth, M. J. P. Gingras, B. Bergersen and E. P. Chan, J. Phys. Cond. Mat. **3** (1991) 6679.
- [4] C. Renner, H. Löwen and L. Barrat, H. W. Muller, Phys. Rev. **E52** (1995) 5091.
- [5] A. Engel and P. Reimann, Phys. Rev. **E70** (2004) 051107.
- [6] K. C. Tam, R. D. Jenkins, M. A. Winnik and D. R. Bassett, Macromolecules **31** (1998) 4149.
- [7] T. Koga and F. Tanaka Euro. Phys. J. **E17** (2005) 115
- [8] A. Awazu, Prog. Theo. Phys. Sup, **161** (2006) 161; A. Awazu, preprint
- [9] 粟津暁紀, 「箱の中の2剛体球系での相転移的現象と輸送 — 少数粒子系で実現する固-液転移と静止-動摩擦間変化 —」 物性研究 (2001 - 11) 278 等
- [10] A. Awazu, Physica **A 373** (2007) 425
- [11] H. Tanaka, J. phys. Condens. Matter **12** (2000) R207.
- [12] T. Araki and H. Tanaka, Phys. Rev. Lett. **85** (2000) 1338.
- [13] D. Howell, R. P. Behringer, and C. Veje, Phys. Rev. Lett. **82** (1999) 5241.