

粉粒体と統計力学

東京大学 工学系研究科 伊藤伸泰

弾性体粒子・剛体粒子の統計力学的な性質を使って、粉粒体の運動を記述することを提案する。この方法から、粉粒体の流動は密度や多分散性により流体・固体相転移を起こす混相流とする描像へと導かれる。

1 粉粒体

土砂や石、地盤がどのような振舞いをするのかは土木・建築技術の文字道理の土台である。粉状の化学物質・食品などを加工する際には、粉状の物質の輸送・混合が主要な問題となる。穀物・豆のような作物の集荷・輸送の際にも類似の問題があらわれる。鉱業においても掘り出した原石の処理の場合も同様である。こういった問題は工学の様々な分野で研究が進められており、実験や現象論を通して実用に耐える記述の開発がなされている。

こうした問題は物理学の対象としても興味深いものである。通常の流体などとは一味違った振舞いが現われ、そうした運動の物理的な研究は多体现象の課題として恰好のものである。

さて「こういった問題」の共通項は、「ゴツゴツした」あるいは「ザラザラした」粒子からなる系の運動である。つまり、静止摩擦や動摩擦によるエネルギーなどの散逸が無視できない粒子系である。この点で熱力学的あるいは統計力学的な系とは異質な系であり、一括りにして「粉粒体」とか“granular material”とか呼ばれている。こうした系の振舞いを粒子ひとつひとつから構成することは計算機シミュレーション以外では困難である。このため、現象論的な研究から脱皮して現代の理論物理学の立場からの研究が試みられるためには計算機シミュレーション技術の普及が不可欠であった。1990年代に入ってから、粉粒体の運動は計算機シミュレーションや多体系の研究を行なっていた多くの物理研究者の興味を引くものとなった。

粉粒体は、接触型（あるいは近距離）の相互作用をする粒子からなる系としてモデル化される。統計力学的なモデルと異なる点は、静止摩擦や動摩擦といった散逸が不可欠な所である。外部からのエネルギーの注入が途絶えると系は急速に緩和して運動がとまってしまう。系の運動には外部からのエネルギーを受けとって散逸させるという側面と、系のほかの部分にエネルギーを伝えるという側面とがある。粉粒体は自律的にこの2つのバランスをとって運動するのである。では、このバランスはどのようにして決められているのであろうか？この疑問に答える事が粉粒体運動の物理の最初の一步である。

2 剛体球系の熱力学的性質

散逸がないとした場合、粉粒体はどのような振舞いをするのであろうか？粒子がすべて同じ大きさの剛体球からなる系の熱平衡状態については1950年代以来、計算機シミュレーション他による研究がなされており、密度を上げてゆくとあるところで流体から固体に1次相転移することが明らかとなっている[1]。さらに、相互作用が剛体よりも多少軟らかい弾性体になっても、基本的には剛体の場合と同様の振舞いをするとも知られている。

剛体粒子からなる系は、相図が温度に依存しないという特徴がある。粒子の座標を $\{q\}$ 、運動量を $\{p\}$ 、エネルギーを $H(\{p\}, \{q\})$ とすると、分配関数

$$Z = \int e^{-\beta H(\{p\}, \{q\})} dp dq \quad (1)$$

は、

$$Z_K = \int e^{-\beta K(\{p\})} dp \quad \text{および} \quad Z_V = \int e^{-\beta V(\{q\})} dq \quad (2)$$

とにおいて、

$$Z = Z_K \cdot Z_V \quad (3)$$

と書ける。 $K(\{p\})$ は運動エネルギーを、 $V(\{q\})$ はポテンシャルエネルギーを表す。また、 $\beta = 1/k_B T$ である。いま、ポテンシャルが剛体型（あるいは運動エネルギーに比べて十分固い）とすると、 V は0または ∞ の値をとるので、 Z_V は温度に依存しなくなる。密度（あるいは密度に代わる変数1つ。例えば、体積）だけの関数となる。運動エネルギーの寄与 Z_K は相に依存しない。相を決めているのはポテンシャルによる Z_V の部分である。このため、剛体粒子（あるいは十分に固い粒子）からなる系が流相にいるか固相にいるかは温度には依存せず、密度によって制御されているのである。

粉粒体の場合は非弾性衝突によるエネルギー散逸があるため、上記のような統計力学的な取り扱いはできない。しかし、剛体系の熱力学的状態が密度だけで決まり、温度によらないことから、エネルギー散逸がある粉粒体の場合も粒子の運動は熱平衡状態の性質により大きく影響されると考えられる¹。すなわち、密度が低く流体相の部分は流体のように振舞い、密度が高く固体相の部分はその部分が一つの固体の様に振舞うと考えるのである。密度によって流体と固体とが相転移をすることが粉粒体の巨視的な運動の本質であると考えるのである。

この描像の検証に進む前に、散逸を無視した粉粒体で重要となる多分散性の系の熱力学的性質を紹介する。

3 多分散性

実際の粉粒体は大きさの同じ球（単分散）ということは稀で、大きさや形状が分布している場合（多分散）が普通である。よって剛体系の熱力学／統計力学を応用して粉粒体の運動を考えようとする場合には、多分散系の熱力学的／統計力学的性質が必要となる。

筆者らにより計算機シミュレーションにより2次元の大きさに分散のある剛体球（円盤）の熱平衡状態を調べ、相図を明らかにした[2]。粒径の分散を0から増やして行くと、流体と固体の共存状態がだんだん高密度側になり、また、共存する密度の幅も小さくなる。そして、ある分散を越えると共存状態がなくなる（図1参照）。この臨界分散は平均粒径を1として、0.004（標準偏差でいうと、平均粒径の6.6%）である。この値以下では相や相転移の様子は分散に敏感であるのに対し、この値以上では鈍感である。

この臨界分散は、粉粒体の分散としては小さいものである。このため、単分散モデルで行なった粉粒体の理論解析は実際の運動とは異なった性質を示す可能性がある。

4 おわりに

粉粒体の運動を密度により固体－流体転移をする流れとする描像は、基本的な現象と整合し、さらに基本的な問題を解く糸口を与えられると思われる。例えばホッパーからの粉の落下では、出口で粉が詰まるか否かが問題となるが、粉が詰まるのは出口の部分の密度が大きく固体となってしまうためであると考えられる。パイプの中の落下では、密度の波が生じることが知られているが、これは密度が大きく流動性が悪い部分の上には上からの粉が積もり、下の表面からは粒子が自由落下して密度の大きい部分から剥がれ落ちて行くためと解釈できる。パイプ中の疎密波との類似が指摘されている現象に交通渋滞がある。車の密度により流動性が著しく変化することは車を運転する人ならば誰もが実感しているであろう。

¹これは動摩擦によるエネルギー散逸だけの場合。静止摩擦もある場合は、相対的に静止している複数の粒子を1つの粒子とみなすかどうかを平均エネルギーで決める必要があるだろう。

現在、ここで議論した粉粒体の描像の妥当性の検証を、計算機シミュレーションを使って進めており、粉体振動層の場合については肯定的な結果も得られつつある [3]。

最後に、この描像に基づいて粉粒体の運動を調べようとする際に、多分散なあるいは複雑な形状をした粒子系の熱力学的な相図が必要となることを強調しておきたい。高分子他の複雑流体の新しい視点となることをも期待したい。

本研究にあたって、青木圭子（静大工）、西森拓（茨大理）両氏との粉粒体の運動に関する議論は有益でした。また、本研究はネスレ科学振興会からの研究助成も受けています。

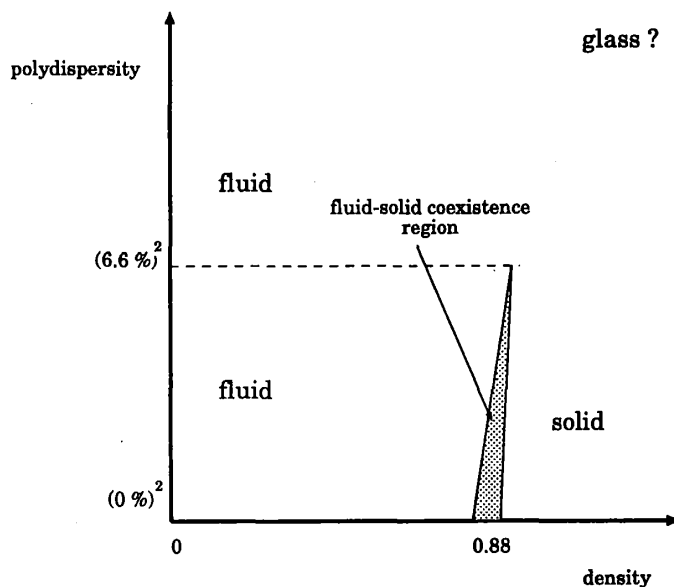


図 1: 2次元剛体円盤系の密度-粒径分散面での相図。横軸は密度で、粒子のない場合が0、単分散粒子が正方格子状に並んだ密度が1となるように粒子で覆われている面積を線形にスケールした単位をとっている。縦軸は粒子半径の分布関数の分散を、平均粒子半径の百分率の二乗を単位として表している。

参考文献

- [1] W. W. Wood and J. D. Jacobson, J. Chem. Phys. **27**, 1207 (1957); B. J. Alder and T. E. Wainwright, J. Chem. Phys. **27**, 1208 (1957); J. A. Zollweg and G. V. Chester, Phys. Rev. **B46**, 11186 (1992); J. Lee and J. J. Strandburg, Phys. Rev. **B46**, 11190 (1992); W. Vermöhlen and N. Ito, Intern. J. Mod. Phys. **5**, 1021 (1994).
- [2] W. Vermöhlen and N. Ito, Phys. Rev. **E51**, 4325 (1995).
- [3] K. M. Aoki and N. Ito, in preparation.