

等温弾性球の正面衝突における弾性振動の影響

村上 亮

平成 25 年 12 月 23 日

概要

物体の衝突において内部自由度（弾性振動）がどのような役割を果たすのかについて、弾性体モデルの衝突シミュレーションにより詳細に調べた。物体の衝突を特徴付けるはね返り係数（衝突前後の速度比）は定数、あるいは衝突速度の単調減少関数が、そのような振る舞いを示すのは散逸（固体粘性率）が強く、弾性振動の励起がない場合のみ成り立つ事を明らかにした。また、散逸が弱いときには弾性振動と衝突の共鳴に由来した振動構造が出現することを本論文ではじめて見出した。また、内部振動の初期条件に熱揺らぎを与えた弾性体の衝突シミュレーションも行い、はね返り係数と振動モードの初期位相の間に三角関数的相関が現れ、その結果としてはね返り係数が1を超える「超弾性衝突」が発生することを明らかにした。さらに摂動論による計算でこの関係を再現し、最大圧縮時に膨らむ位相だと超弾性衝突が発生しやすいというメカニズムを明らかにした。更に非弾性衝突に関する拡張されたゆらぎの定理が成り立つ事を数値的に検証した。

目次

第1章	研究背景	3
1.1	粉体の物理	4
1.2	非弾性衝突におけるエネルギーロスのメカニズム	5
1.3	準静理論	6
1.4	はね返り係数	7
1.5	準静理論におけるはね返り係数の計算例	8
1.6	はね返り係数の測定	11
1.7	惑星形成理論の現状	12
1.8	ナノクラスターの研究	12
1.9	ナノクラスター衝突の物理	13
1.10	超弾性衝突	15
1.11	分子動力学法と弾性体モデルの比較	15
1.12	等温弾性球モデルについて	16
1.13	レビュー：2次元弾性円盤モデル	17
1.14	レビュー：ナノクラスターの超弾性衝突	21
1.15	本論文の構成	28
第2章	等温粘弾性球の衝突モデル	30
2.1	2球間に働く相互作用	30
2.2	運動方程式	31
2.3	シミュレーションのセットアップ	33
第3章	初期温度0のシミュレーション	36
3.1	衝突時に働く力	36
3.2	はね返り係数および励起エネルギーの衝突速度依存性：散逸がない場合	38
3.3	はね返り係数の衝突速度依存性：散逸がある場合	39
第4章	衝突シミュレーションにおける初期温度の影響	42
4.1	超弾性衝突の性質	42
4.2	超弾性衝突と振動モードの初期位相の関係	43
4.3	衝突版ゆらぎの定理の検証	45
4.4	衝突による加熱	47

第 5 章 考察	50
5.1 摂動論	50
5.2 モード間遷移	53
5.3 今後の展望	54
第 6 章 結論	57
付 録 A 等温粘弾性球の波動方程式の導出	59
付 録 B 自由端境界条件における波動方程式の解	61
B.1 一般解	61
B.2 分散関係	62
B.3 自由端境界条件における解	63
付 録 C 連続体ダイナミクスにおけるゆらぎ	65
付 録 D 力の明示的表式	67
D.1 一般の場合	67
D.2 軸対称の場合	72
D.3 硬い壁の場合	73
付 録 E 衝突問題におけるゆらぎの定理と熱力学第二法則	74
E.1 セットアップ	74
E.2 ゆらぎの定理	75
E.3 熱力学第二法則	76
付 録 F 断熱圧縮による温度上昇	78
付 録 G 音波の吸収係数	79
付 録 H 等式 (3.6) 第三項の係数について	81
付 録 I 等式 (5.15) の導出	82
付 録 J 接触時間の衝突速度依存性と 4 重極モードの支配性	84
付 録 K はね返り係数の非ガウス性	87
付 録 L 摩擦がある場合におけるスピン球衝突	88
付 録 M 境界条件により接触力を取り扱うモデル	90

第1章 研究背景

物体の衝突はあらゆるところで見られる最も基本的な物理現象の一つであり、身近なところでは野球やゴルフなどのスポーツにおいて目にする。あるいは舞い上がる砂の中では粒子同士が衝突を繰り返している。特に後者の例のような粉や粒などの集まり（と空気などその周りの媒質）は粉体と呼ばれ、科学的にも工学的にも重要な対象となっている。粉体を構成する粒子のサイズは、コピーのトナーのようなサブミクロンスケールから原始惑星系円盤のような宇宙スケールまで対象によって様々であるが、1つ1つの構成粒子自体が巨視的な自由度を有していることが粉体の特徴である。一方、近年注目が集まっているナノクラスター（小さいもので原子数個から成るクラスター）においても衝突は重要な役割を果たし、盛んに研究されているしこのような衝突に伴い、重心の並進の運動エネルギーの一部が熱、内部振動、クラスターの変形、欠陥の形成、音波の放射等に変換され、その衝突は非弾性衝突となる。その非弾性衝突は、衝突後の反発速度と衝突速度の比である反発係数で特徴づけられ、その反発係数が1以下となることが粉体の特徴になっている。

ここではまず1.1節で粉体の研究について紹介する。その後、1.2節では粉体において本質的な非弾性衝突について詳述する。1.3節ではよく知られた衝突理論である準静理論について紹介する。1.4節では衝突を特徴付ける、はね返り係数を導入する。1.5節では粘弾性体および塑性変形が起こる場合の準静理論において、はね返り係数を具体的に計算する。1.6節では、はね返り係数を測定した実験について紹介し、準静理論との整合性について論じる。1.8節では、もう一つの大きな背景としてナノクラスターの研究について紹介する。1.9節では特にナノクラスター衝突の物理について紹介する。さらに1.10節ではナノクラスターの分子動力学シミュレーションで見出された「超弾性衝突」という特異な衝突現象について紹介する。1.11節で分子動力学法と弾性体モデルの違いについて言及した後、1.12節で本研究で用いる等温弾性球モデルについて紹介する。さらに1.13節では直接の先行研究である2次元弾性円盤モデルの結果についてまとめる。本論文の構成は1.15節にまとめる。

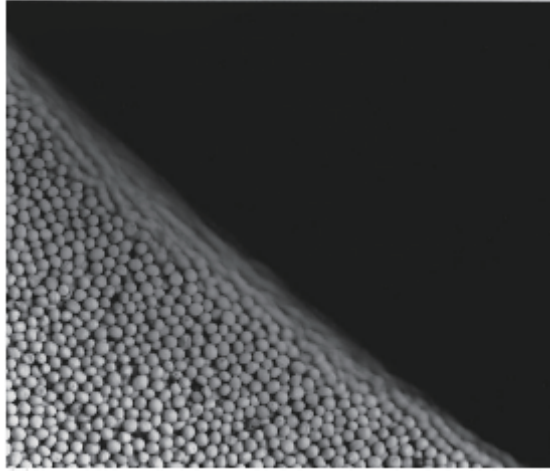


図 1.1: マスタードの種で作られた斜面の様子を文献 [28] より転載. 雪崩が起き, 山の表面には流れがあるが, 山の内側は固まって動かない.

1.1 粉体の物理

粉体はありとあらゆるところで見られる. 例えば普段食べているものの多くは粉体の形態をしている. また, 地すべりや侵食からプレートテクトニクスまで地球規模の地質作用は粉体の運動ととらえられる. 地球 [1,2] に限らず火星 [3] や月 [4] など他の惑星や衛星においても粉体は観測される. 惑星リングや原始惑星系円盤などもまた粉体であり, その形成過程が盛んに研究されている [5–11].

粉体は鉱業, 建設業から農業, 製菓業, 食品加工業まであらゆるところで取り扱われており, 工学や産業においても重要な位置付けにある [12–16]. それにも関わらず, 工業プラントの容積の 40%が粉体の輸送に関する問題で無駄になっているとの概算があるほど [17,18], 粉体の振舞いに対する理解は乏しい. 粉体の基本的な振る舞いの理解が進めば産業界へのインパクトは計り知れない.

粉体は物理の対象としても大変興味をもたれている [19–27]. 空気や水などと同様に, 砂や粉などは普段気に止めることのない大変ありふれた存在であるが, 物質の相転移がそうであるように, 粉体の挙動はまったく自明でない. 例えば砂場に作られた砂山は固体のようにその場にそびえ立つ一方, 風に巻き上げられた砂はあたかも気体の如く振る舞う. ビンに詰められたコピーのトナーを振ってみると, 液体にしか見えない. このように一見すると粉体もまた物質の三態に分類できるように思えるが, 実際には粉体は水や空気とはまったく異なる振る舞いを示す.

図 1.1 は山積みされたマスタードの種が雪崩を起こしている様子をとらえた写真である [28]. 流れは山の表面部分だけにとどまり, 内部はまったく動いていないのがわかる. 雪崩もやがて少し裾野の広げた山を形成したところで止まってしまおう. 濡れて広がっていく液体とはまったく振舞いが異なる.

粉体では構成粒子自体が巨視的な自由度を有するため, 衝突の際にエネルギー

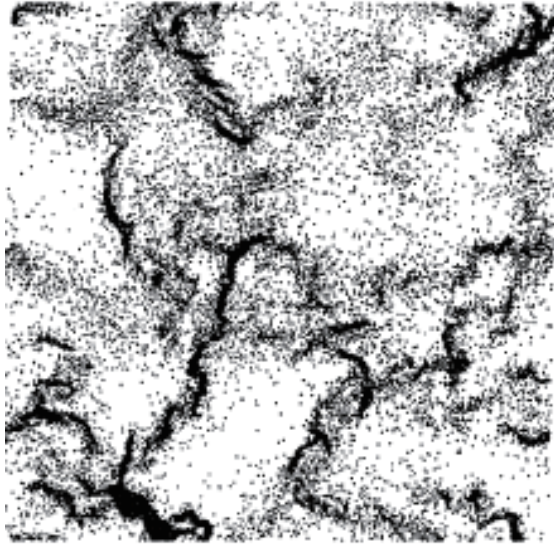


図 1.2: 粉体のシミュレーションの様子を文献 [37] より転載. 初期に一様状態の各粒子にランダムな速度を与え, 外力は加えずに時間発展させる. 粒子数は 40000 である. 散逸ははね返り係数 (1.4 節参照) によって導入している. 値は 0.6 である. 図は一粒子あたり 500 回衝突した時間に相当する瞬間の様子である. クラスタが形成されていることがうかがえる.

散逸が生じる. ここが原子や分子で構成される通常物質との根本的な違いである. マスタードの種が重力下であるにも関わらず流れていかないのは散逸が原因である. 粉体と通常物質が類似している [23, 29–36] と思うのはすべて動的な現象を見ているときであることに注意されたい. たとえ散逸するとしても外からエネルギーを注入し続けて駆動していれば, その存在があまり目立たないからである.

しかし, 動的な現象においても散逸の存在はときに粉体とニュートン流体の間に劇的な違いをもたらす. その最たる例がクラスタ形成である [37–50]. 図 1.2 はシミュレーションの様子である [37]. 粒子間で非弾性衝突 (散逸を伴う衝突) を絶えず繰り返すこと (非弾性崩壊 [51]) で相対速度を失い, クラスタを形成するのである. このように非弾性衝突は粉体において本質的であり, その過程を詳細に理解することが粉体の多様で魅力的な振る舞いを理解するうえで重要となる.

1.2 非弾性衝突におけるエネルギーロスのメカニズム

非弾性衝突におけるエネルギーロスには次のメカニズムが知られている:

1. 衝突物体の振動励起
2. 固体粘性によるエネルギー散逸

3. 塑性変形によるエネルギーロス

衝突によって弾かれた物体表面は元の位置に戻ろうと運動するため、物体に弾性振動が生じる。衝突が固体音速に比べて十分低速であれば振動は励起されないが、一般には励起が起こる。これが1番目のメカニズムである。

2番目のメカニズムは、有限速度の変形に関係した散逸過程である。熱力学でよく知られているように、準静的な変形では時々刻々、局所熱平衡状態が保たれる。一方、有限速度での変形では平衡状態から外れるため、平衡状態への緩和が起こる。このとき、力学的エネルギーは最終的に熱へと散逸する。すなわち、流体同様、固体にも粘性が存在する。粘性と弾性を合わせ持つ物体は粘弾性体と称される。欠陥があると有限速度の変形により内部状態が遷移するため、固体粘性は完全結晶でない限り必ず存在する。

さらに高速になり、物体にかかる圧力が臨界値（降伏応力）を超えると、物体は塑性変形を起こし、元の形状に戻らなくなる。このとき、衝突エネルギーは形状変化に使われる。これが3番目のメカニズムである。

その他にも欠陥形成や全体の変形、破砕などによってもエネルギーは失われる。また、媒質中であれば音波放射によるロスも発生する。

1.3 準静理論

非弾性衝突を記述するには前節で述べたエネルギーロスのメカニズムを考慮する必要がある。このうち、1番目の振動励起については無限の内部自由度を考慮する必要があるため、扱いが難しい。そこで、衝突は十分に低速で振動励起は起こらないとする仮定がよく用いられる。この仮定を採用した衝突理論を準静理論という [52–56]。このとき物体の変位 $h(t)$ の運動方程式は

$$M_{\text{eff}}\ddot{h}(t) = F(h(t), \dot{h}(t)) \quad (1.1)$$

であり、物体にかかる力 F は変位とその速度のみで決まる。ここで M_{eff} は換算質量で、2物体の質量を M_1 , M_2 とすると

$$M_{\text{eff}} \equiv \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^{-1} \quad (1.2)$$

である。

弾性変形の場合

準静理論の先駆者であるヘルツは、弾性論に基づいて力を導出した [52]。ヘルツ理論に基づくと半径 R_i , ヤング率 Y_i の2球 $i = 1, 2$ 衝突の場合、力の大きさは

$$F_{\text{H}}(h) = \frac{4Y_{\text{eff}}\sqrt{R_{\text{eff}}}}{3} h^{3/2} \quad (1.3)$$

となる [57]. ここで, Y_{eff} および R_{eff} はそれぞれ, 換算半径および有効ヤング率であり, それぞれ

$$R_{\text{eff}} \equiv \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right)^{-1} \quad (1.4)$$

$$Y_{\text{eff}} \equiv \left(\frac{1 - \nu_1^2}{Y_1} + \frac{1 - \nu_2^2}{Y_2} \right)^{-1} \quad (1.5)$$

である. ここで ν_i は球 i のポアソン比である. このとき, 運動方程式 (1.1) は以下のように解けて, 接触時間 τ_{H} を求めることができる.

力の表式 (1.3) からポテンシャルエネルギー $V(h)$ は

$$V(h) = \frac{8Y_{\text{eff}}\sqrt{R_{\text{eff}}}}{15} h^{5/2} \quad (1.6)$$

となる. したがってエネルギー保存則から

$$\frac{dh}{dt} = \pm \sqrt{\{v_{\text{CM}}(0)\}^2 - \frac{16Y_{\text{eff}}\sqrt{R_{\text{eff}}}}{15M_{\text{eff}}} h^{5/2}} \quad (1.7)$$

が得られる. ここで $v_{\text{CM}}(0)$ は初速度である. (1.7) 式は直ちに積分でき, 接触時間は

$$\begin{aligned} \tau_{\text{H}} &= 2 \int_0^{h^*} dh \left(\{v_{\text{CM}}(0)\}^2 - \frac{16Y_{\text{eff}}\sqrt{R_{\text{eff}}}}{15M_{\text{eff}}} h^{5/2} \right)^{-1/2} \\ &= 2.87 \left(\frac{M_{\text{eff}}^2}{Y_{\text{eff}}^2 R_{\text{eff}} v_{\text{CM}}(0)} \right)^{1/5} \end{aligned} \quad (1.8)$$

となる. ここで, h^* は最大圧縮変位で, エネルギー保存則から

$$h^* = \left(\frac{15M_{\text{eff}}\{v_{\text{CM}}(0)\}^2}{16Y_{\text{eff}}\sqrt{R_{\text{eff}}}} \right)^{2/5} \quad (1.9)$$

である.

1.4 はね返り係数

ヘルツが考慮したのは斥力のみであったが, その後に引力を考慮した理論 [53,58] や, 散逸力を考慮した理論 [54,55,59] などが考案され, 衝突を記述する試みが行われてきた. しかし実際の衝突は有限速度で起こり, 衝突には必ず振動励起を伴う. 本当に準静理論で実際の衝突を記述できるのであろうか. そのことを確かめるには, 衝突における散逸を特徴付けるはね返り係数を調べればよい. はね返り係数 e は

$$e \equiv -\frac{v_{\text{CM}}(t_f)}{v_{\text{CM}}(0)} \quad (1.10)$$

のように衝突前の速度 $v_{\text{CM}}(0)$ と衝突後の速度 $v_{\text{CM}}(t_f)$ の比で定義され、散逸がない弾性衝突の場合には1, 散逸がある非弾性衝突の場合には1より小さい値となる。粉体において散逸は本質的であり、それゆえはね返り係数を知ることが衝突問題の主要な目的となる。

1.5 準静理論におけるはね返り係数の計算例

多くの初等的な力学の教科書に（例えば [60]）はね返り係数は物質定数であると記されているが、実際には衝突速度によって変化する [53–56, 61]。ここで粘弾性体、および塑性変形を考慮した準静理論におけるはね返り係数の計算方法について紹介する。

粘弾性体

まずは粘弾性体の準静理論を解き、はね返り係数を求める。準静理論において、粘弾性体にはヘルツの接触力 (1.3) に加えて散逸力

$$F_{\text{diss}}(h(t), \dot{h}(t)) = -\gamma \frac{d}{dt} F_{\text{H}}(h(t)) = -2\gamma Y_{\text{eff}} \sqrt{R_{\text{eff}} h(t)} \dot{h}(t) \quad (1.11)$$

が働く [54, 55]。ここで、 γ は固体粘性率で時間の単位を持っている。なお、固体粘性率の起源については 2.2 節および付録 H で述べるので、ここでは γ ありきで議論を進める。したがって運動方程式 (1.1) は、力の向きに注意して

$$M_{\text{eff}} \ddot{h} = -\frac{4Y_{\text{eff}} \sqrt{R_{\text{eff}}}}{3} h^{3/2} - 2\gamma Y_{\text{eff}} \sqrt{R_{\text{eff}} h} \dot{h} \quad (1.12)$$

となる。

ここで、固体粘性率 γ が接触時間 (1.8) に比べて十分小さい場合を考え、運動方程式 (1.12) を γ の 1 次までで解く。まず、運動方程式 (1.12) の両辺に \dot{h} をかけて時間について 0 から τ_{H} まで積分すると

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} M_{\text{eff}} \{v_{\text{CM}}(\tau_{\text{H}})\}^2 - \frac{1}{2} M_{\text{eff}} \{v_{\text{CM}}(0)\}^2 &= -4\gamma Y_{\text{eff}} \sqrt{R_{\text{eff}}} \int_0^{\tau_{\text{H}}/2} dt \sqrt{h} \dot{h}^2 \\ &= -4\gamma Y_{\text{eff}} \sqrt{R_{\text{eff}}} \int_0^{h^*} dh \sqrt{h} \dot{h} \\ &\simeq -4\gamma Y_{\text{eff}} \sqrt{R_{\text{eff}}} v_{\text{CM}}(0) (h^*)^{3/2} \int_0^1 dx \sqrt{x(1-x^{5/2})} \\ &= -5.57 M_{\text{eff}} \{v_{\text{CM}}(0)\}^2 \frac{\gamma}{\tau_{\text{H}}} \end{aligned} \quad (1.13)$$

が得られる．ここで，3行目では速度の0次が(1.7)式によって与えられることを用いた．また，最大変位 h^* は(1.9)式により与えられ， $x = h/h^*$ で変数変換した．最終行では

$$\int_0^1 dx \sqrt{x(1-x^{5/2})} = 0.5045 \quad (1.14)$$

であることを用いた．等式(1.13)より，はね返り係数は

$$e = 1 - 5.57 \frac{\gamma}{\tau_H} + O(\gamma^2) \quad (1.15)$$

となる．したがって等式(1.8)より $1 - e \propto \{v_{\text{CM}}(0)\}^{-1/5}$ であり，この振舞いは氷の衝突実験 [61] をよく再現する (1.6節参照)．

塑性変形

ここでは塑性変形を考慮した場合のはね返り係数の計算方法について，文献 [53] に基づいて紹介する．ここでも2球衝突を考える．ここでの議論もまた，準静理論に基づいている．塑性変形は高速衝突の場合に起こるため，準静理論を用いてよいかはまったく非自明であるが，ここで得られるはね返り係数の振舞い $e \propto \{v_{\text{CM}}(0)\}^{-1/4}$ は，鉄球の衝突実験において確認されている [53,62]．このように準静理論で記述できるのは，塑性変形によって弾性波の発生が阻害されるからだと考えられている．

衝突により，運動エネルギーがすべて弾性および塑性変形を起こすための仕事に使われるとする．すなわち，

$$\frac{1}{2} M_{\text{eff}} \{v_{\text{CM}}(0)\}^2 = \int_0^{h_c^*} dh F_c(h) \quad (1.16)$$

であるとする．ここで， h_c^* は最大圧縮変位， F_c は圧縮力である．同様に

$$\frac{1}{2} M_{\text{eff}} \{v_{\text{CM}}(t_f)\}^2 = \int_0^{h_r^*} dh F_r(h) \quad (1.17)$$

であるとする．ここで， h_r^* は復元変位， F_r は復元力である．ただし，復元が起こるのは弾性変形に限られることに注意されたい．塑性により残留変位 $h_c^* - h_r^* > 0$ が発生する．

完全に塑性変形のみが起こっているときの応力分布はほぼ一定とみなすことができる．一方，弾性変形と塑性変形の間領域における圧力分布は非常に複雑である．しかし，ほとんどの金属衝突においてそのような領域は重要ではないため，ここでは全領域で完全な塑性変形であると仮定する．このような塑性変形が現れた状態における接触面の平均圧力を p_d と書くと圧縮力は

$$F_c = \pi a^2 p_d \quad (1.18)$$

で与えられる．ここで a は接触面の半径で，塑性変形においては近似的に

$$a = \sqrt{2R_{\text{eff}}h} \quad (1.19)$$

で与えられる．したがって圧縮力は

$$F_c(h) = 2\pi p_d R_{\text{eff}} h \quad (1.20)$$

であり，衝突前の運動エネルギー (1.16) は

$$\frac{1}{2} M_{\text{eff}} \{v_{\text{CM}}(0)\}^2 = \pi p_d R_{\text{eff}} (h_c^*)^2 \quad (1.21)$$

となる．

一方，復元は弾性変形によるものであるから，その力は (1.3) 式で与えられる．しかし，塑性変形により球の形状が変化しているため，そのまま適用することはできない．形状変化の影響は小さく，換算半径 R_{eff} の変化で表されると仮定すれば，復元力は弾性変形における関係式

$$R_{\text{eff}} = \frac{a^2}{h} \quad (1.22)$$

によって弾性力 (1.3) から R_{eff} を消去した

$$F_r(h) = \frac{4}{3} Y_{\text{eff}} a h \quad (1.23)$$

により与えられる．一方，接触半径 a は等式 (1.18) と同様に

$$a = \sqrt{\frac{F_r}{\pi p_d}} \quad (1.24)$$

で与えられるので，結局

$$F_r(h) = \frac{16Y_{\text{eff}}^2}{9\pi p_d} h^2 \quad (1.25)$$

となる．これより衝突後の運動エネルギー (1.17) は

$$\frac{1}{2} M_{\text{eff}} \{v_{\text{CM}}(t_f)\}^2 = \frac{16Y_{\text{eff}}^2}{27\pi p_d} (h_r^*)^3 \quad (1.26)$$

である．

h_c^* と h_r^* の関係は等式 (1.20) および (1.25) より

$$F^* = 2\pi p_d R_{\text{eff}} h_c^* = \frac{16Y_{\text{eff}}^2}{9\pi p_d} (h_r^*)^2 \quad (1.27)$$

で与えられる．ここで，

$$F^* \equiv F_c(h_c^*) = F_r(h_r^*) \quad (1.28)$$

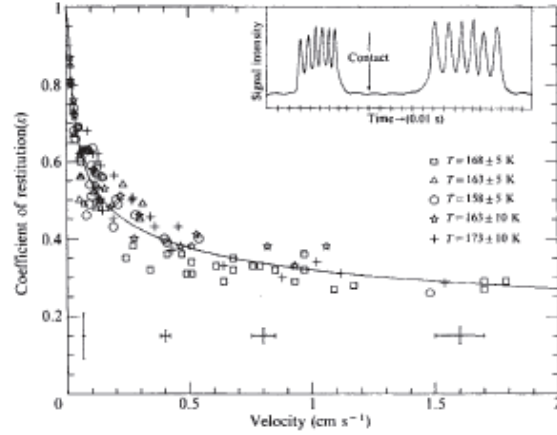


図 1.3: 氷の衝突実験におけるはね返り係数の衝突速度依存性を文献 [61] より転載. はね返り係数が物質定数でないことは明らかである. また, 衝突速度が増すにつれ単調に減少している. Brilliantov らはこの振舞いを準静理論における表式 (1.15) で再現した [55]. 全体的にはね返り係数の値が 1 を大きく下回っていることから氷の散逸が大きいことがうかがえる.

である. したがって運動エネルギー (1.16) および (1.17) から, それぞれ h_c^* および h_r^* を消去して F^* で表せば

$$\frac{1}{2} M_{\text{eff}} \{v_{\text{CM}}(0)\}^2 = \frac{1}{4\pi p_d R_{\text{eff}}} (F^*)^2 \quad (1.29)$$

$$\frac{1}{2} M_{\text{eff}} \{v_{\text{CM}}(t_f)\}^2 = \frac{\sqrt{\pi p_d}}{4Y_{\text{eff}}} (F^*)^{3/2} \quad (1.30)$$

となり, これよりはね返り係数は

$$e^2 = \pi^{3/2} \frac{p_d}{Y_{\text{eff}}} \sqrt{\frac{p_d R_{\text{eff}}^2}{F^*}} \quad (1.31)$$

のように得られる. 等式 (1.29) から $F^* \propto v_{\text{CM}}(0)$ であるから, $e \propto \{v_{\text{CM}}(0)\}^{-1/4}$ であることがわかる. この振舞いは鉄球の衝突実験で確認されている [53, 62].

1.6 はね返り係数の測定

図 1.3 は氷の衝突実験におけるはね返り係数の衝突速度依存性を示したものである. 速度が増加するにつれてはね返り係数が小さくなっていることがわかる. その後, この結果は準静理論における表式 (1.15) でよく再現されることが示された [55].

しかし, なぜ準静理論で記述できるのであろうか. 氷の場合, 鉄やガラスの実験 [54, 63] と比べて, はね返り係数は極端に小さくなる. このことからわかるよ

うに、氷では散逸が非常に大きい。そのため、励起された振動はすぐに散逸し、結果的に準静理論とよく整合したと考えられる。

一方、散逸が小さい場合には弾性振動の影響が何らかの形で現れると期待される。そこで本研究では準静理論を超えて、衝突における弾性振動の影響を明らかにすることを旨とする。

はね返り係数の減少はここで述べた固体粘性率による散逸と振動励起の他に、塑性変形によっても生じるが（等式(1.31)参照）、本研究では弾性変形に限定し、塑性変形については今後の展開（5.3節）で述べるにとどめる。

1.7 惑星形成理論の現状

粉体からの導入を締めくくるにあたって、岩石の非弾性衝突や凝集が重要であると信じられている惑星形成理論の現状について簡単に紹介する。従来の惑星形成理論では、恒星の周りに形成される円盤状の星雲（原始惑星系円盤）の中で微粒子が互いに衝突して付着し、最終的に惑星まで成長するとされている。しかし、このシナリオでは成長過程において密度はほぼ一定のはずであるが、そうするとメートルサイズにまで成長した段階で恒星へ落下することになる。また、ある程度大きく、しかし自己重力は無視できるミリ～キロメートルサイズでは斥力しか働かないため、衝突してもはね返ったり、高速衝突であれば破碎してしまう。このようにキロメートル程度までの成長過程には、未解決の問題が含まれる。

最近、新たなシナリオが提案され注目を集めている [10,11]。まず、ミクロンサイズの微粒子では衝突エネルギーが小さすぎるために圧縮が起らず、その結果、非常に低密度でフラクタル構造を持つ集合体が形成されることが近年明らかになった [64–67]。したがって、この集合体が密な天体へ成長するためには、衝突以外の圧縮過程が必要である。そこで文献 [10] では集合体を周期的に並べ、時々刻々と狭まっていく周期境界条件を用いることで、ガスの動圧による圧縮のシミュレーションを行った。そこから得られた圧縮強度を用い、ガスから受ける動圧と自己重力による密度の成長を求めることで、特に付着しやすい氷の場合に、上述した問題点に抵触することなく成長することを明らかにした [11]。ただし、岩石の場合にはこのシナリオでもうまくいかず、まだ完全に理解できたとは言えない。観測的検証と合わせ、今後の課題である。

1.8 ナノクラスターの研究

近年の技術の発達により、物質をナノスケールで制御・設計することが可能となった [68]。その技術は電子デバイス設計はもちろんのこと、生体分子の標識 [69–71] や制御 [72–74]、薬物輸送 [75–77] など様々な分野へ広がっている。ナノクラスターとは小さいもので原子数個から構成されるクラスターをさし、真空チャンバー中

への断熱膨張 [78–81] やレーザーアブレーション [82], および溶液中での合成 [83] などによる生成法が確立している. その性質は原子ともバルクとも異なり, 熱力学的な性質さえまだよくわかっていないことが多い [84]. 例えば, 金はその輝きが示す通りバルクでは不活性であるが, ナノクラスターになると他では見られない特徴的な触媒機能を発現することが明らかになっている [85–88].

このような特異性の起源を明らかにするために, ナノクラスターの幾何的構造や電子構造を調べ [89], 磁気性質 [90] や光学的性質 [91,92]などを明らかにする研究が盛んに行われている. また最近, 冷却原子気体 [93,94] を生成したのと同様に, レーザーによる冷却および捕捉がナノクラスターにおいても実現された [95]. したがって今後はコヒーレントな量子力学的性質の研究についても盛り上がるのが予想される. 一方, これら静的側面だけでなく, 振動特性 [96] や衝突特性 [97,98] といった動的側面についても盛んに研究されている [99,100].

1.9 ナノクラスター衝突の物理

ナノクラスターの衝突特性を知ることは, 望みの性質を持つクラスターをデザインする上で重要である. また, 電子デバイスや触媒として用いる際にはナノクラスターを基板へ蒸着する必要があるため, ナノクラスターの基板への衝突を調べた研究は数多く存在する [101–109].

ナノクラスター同士の衝突

ナノクラスター同士の衝突については, 主に分子動力学シミュレーションにより盛んに研究されている. アルゴンなどの希ガスクラスターや水クラスター [110,111] のシミュレーションでは粒子間相互作用にレナードジョーンズモデルが用いられる [112,113]. Ming らは様々な入射速度と角度に対して衝突後の状態がどうなるか系統的に調べた [114]. Kalweit・Drikakis は 100 原子程度のクラスターと 1 万原子程度のクラスターの衝突 [115], および 1 万原子程度のクラスター同士の衝突について調べ, マクロな液滴衝突 [116–120] で見られるのと同様の衝突現象 (合体や引きちぎり) を確認した. ただし, はね返りは確認できなかった. その後, Tanaka らは 300 万から 1 億までの巨大なクラスター同士の衝突シミュレーションを行って, クラスターのはね返りを確認した [121].

シリコンクラスターでは Stillinger-Weber モデルポテンシャル [122] が用いられ, 合体の様子が詳細に調べられている [123,124]. Schmidt らは分子動力学法に密度汎関数法を組み合わせ, 融合と反応の断面積を調べた [125]. また, Hawa・Zachariah はサイズの異なるシリコンクラスターの融合について調べた [126]

金クラスターでは原子挿入法 (embedded atom method) [127] や glue ポテンシャル [128,129] が用いられ, 融合, 合着, 破碎, 散乱などについて調べられている.

図 1.4 は白金クラスターの合着を STEM でとらえた様子である [130].

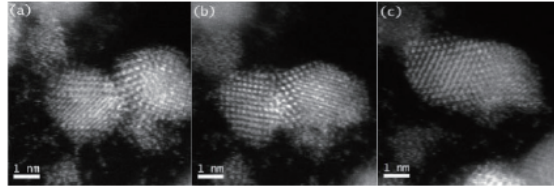


図 1.4: 白金クラスターの合着を STEM でとらえた様子を文献 [130] より転載.

基板への衝突

ナノクラスターが基板に衝突すると、文献 [131–133] の相図に示される通り、速度に強く依存して衝突後は様々な状態となる。もしナノクラスターの1原子あたりの運動エネルギーが十分に大きいならば、ナノクラスターは基板に埋まるか [134, 135], クレーターを形成するか [136, 137], あるいはナノクラスター自体がばらばらになるだろう [138–148]. 反対に十分低速ならば、ナノクラスターは基板に付着するだろう [149–152]. Järvi らは [150] 基板への低速衝突の分子動力学シミュレーションにより、衝突時に生じた熱が付着したクラスターの形状を調整することを明らかにし、エピタキシャル配置となる上限サイズを見出した。

引力の低減

ナノクラスター同士の合着や基板への付着が、たとえ中性であっても引き起こされるのは、原子間に働くファンデルワールス引力のためである。物体がある程度大きいと、ファンデルワールス力は影響しなくなるため、引力はナノクラスター特有の性質である（ただし、天体ぐらい巨大な物体であれば万有引力が影響するようになる）。

その一方で、クラスター間に働く引力はクラスター表面のコーティングによってある程度コントロールすることが可能である。通常、ナノクラスターはフラーレンのような安定構造を除き、結合が不完全で不対電子を残した活性状態にある。不対電子は特に結合の少ない表面に集中し、新たな原子やクラスターと結合して安定になろうとする。そこで、あらかじめ表面の不対電子に水素原子を結合しておくことにより、引力を低減することができる [153]. 実際、拡張 Stillinger-Weber モデルポテンシャル [154] に基づいた分子動力学シミュレーション [155, 156] や、共有結合を表現する Tersoff ポテンシャル [157–159] に基づいた分子動力学シミュレーション [160] により、シリコンクラスターの水素原子コーティングによる効果を検証し、特に後者では [160], 3 万原子程度のコーティングクラスターが反発衝突することを確認した。この引力低減効果を表現するために、Awasthi らは固液間相互作用モデルとして用いられる拡張レナードジョーンズモデル [161] をコーティングクラスター間の相互作用として用いた [162–164]. 最近、齊藤らはこのモデル

ポテンシャルに基づいたクラスター衝突と Tersoff ポテンシャルに基づいたクラスター衝突を定量的に比較し、その妥当性を確認した [165].

1.10 超弾性衝突

引力の低減により、ナノクラスターの反発衝突が調べられるようになった。1.4 節で述べた通り、反発衝突ははね返り係数により特徴付けられる。通常、正面衝突のはね返り係数は 1 以下であると考えられている。ところが最近、熱活性したナノクラスターの分子動力学シミュレーションにおいて、はね返り係数が 1 を超える「超弾性衝突」が見出された [166–168]。超弾性衝突は熱が力学的エネルギーに変換される現象であり、一見すると熱力学第二法則に反しているように見える。

そこで、田崎はゆらぎの定理および Jarzynski タイプの等式 [169–176] を衝突問題の場合に拡張し、衝突における熱力学第二法則

$$\frac{1}{2}M_{\text{eff}}\{v_{\text{CM}}(t_f)\}^2 - \frac{1}{2}M_{\text{eff}}\{v_{\text{CM}}(0)\}^2 \leq O(k_B T) \quad (1.32)$$

を導出した（文献 [177] および付録 E.3 参照）。ここで左辺第一項および第二項はそれぞれ、衝突後および衝突前における物体の運動エネルギーである。熱力学第二法則 (1.32) は速度上昇、すなわち超弾性衝突が起こり得ることを示唆している。一方、超弾性衝突が起こるのは衝突速度が熱速度程度の超低速衝突に限られることもまた示唆される。熱速度は物体の質量の平方根に反比例するため、巨視的な物体でこのような超低速衝突を実現することは極めて困難である（質量 500 g の物体の室温での熱速度はおよそ 10^{-11} m/s である）。したがって超弾性衝突はナノクラスターのような微小な物体においてのみ観測されうる。

國仲・早川は分子動力学シミュレーションにより、超弾性衝突のメカニズムをミクロな構造に着目して調べた [168]。そこで本研究では弾性体モデルにより、超弾性衝突をマクロな観点から調べてメカニズム解明を目指す。

1.11 分子動力学法と弾性体モデルの比較

1.9 節で挙げたとおり、主としてナノクラスターの衝突シミュレーションは分子動力学法を用いて行われる。分子動力学法では結晶の構造変化や欠陥の移動といった原子レベルのミクロな変化をとらえることが可能であり、高エネルギー衝突ではそれらの影響が重要だからである [151]。一方、超弾性衝突のような低エネルギー衝突では、ミクロな変化よりむしろ衝突する球のマクロ変形を含めた弾性振動のような集団モードの励起が重要となる。このような集団モードの励起の影響は連続体モデル（弾性体モデル）でとらえる他ない。分子動力学法に比べて連続体モデルの研究は少ないが、相補的であり、前者では得られない情報を抽出するためにも連続体モデルの解析が重要になってくる。

また、分子動力学シミュレーションは原子数が増えるほど計算コストがかさみ、100 nm 以上のクラスターを扱うことは容易ではない。その点、弾性体モデルの計算コストは本質的にサイズ無依存であり、任意のサイズを扱うことができる。この性質は表面力（サイズ依存する力）を取り入れた上で、なお保持されていることを注意しておく。

1.12 等温弾性球モデルについて

本研究で用いる弾性体モデルは特に等温粘弾性球モデルである。等温粘弾性球とは、線形、等方、等温条件を課した弾性体モデルであり、内部自由度を有する3次元物体のミニマルなモデルである。本モデルは2次元系の円盤モデルとして導入されたもの [178,179] を3次元に拡張したものである。低次元系を実験的に再現するのは非常に困難であるため、この拡張は重要である。また、先行研究 [178,179] は円盤と壁との衝突しか扱っていないが、今回はサイズの異なる球同士の衝突についても調べた。さらに、円盤モデルでは表面の粘着性を考慮していないが、物体はある程度小さいと、電荷的に中性であってもファンデルワールス引力が働く。そこで今回は表面引力を導入し、系のサイズを明確にして、サイズ効果についても調べた。

もう1つの重要な拡張として、固体粘性率の導入がある。固体粘性の起源は以下の通りである。物体の変形において、原子は周りの原子を押しのけながら移動するが、欠陥（空隙）があると、そこに向かって移動する原子には押しつける相手がないため、他の原子より早く動く。そのため局所的な速度差が生じ、それを平均化するような固体粘性が働く。したがって固体粘性は完全結晶でない限り必ず存在する。一般に、欠陥は結晶サイズが大きいほど多く含まれるため、固体粘性の導入はマクロな物体の衝突を理解するうえで非常に重要である。一方、現象のメカニズムを理解するうえで、理想的な状況を考えることもまた重要であるため、本論文では固体粘性率0の状況についても詳しく解析している。特に殆どの固体は多結晶であり、それらの境界は粒界となっている。その粒界での滑りが固体粘性を作り出す主要因になる。更に結晶に含まれる欠陥や転位が振動の局在や音波の吸収を生み、実質的に散逸となっている。大気中での衝突では音波放射が存在するのは言わずもがなであり、それも含めて固体粘性率を導入することで散逸機構をモデル化している。

円盤モデルでは固体粘性率を考慮していないが、現実の物体は完全結晶でない限り必ず固体粘性率を持つ。そこで今回は固体粘性率を導入し、その依存性についても調べた。固体粘性率の導入方法については付録Bを参照されたい。また、付録Gに固体粘性率の測定方法を記した。

文献 [178,179] の2次元モデルでは壁に見立てたソフトポテンシャル $e^{-\alpha r}$ を導入することで衝突によって円盤が受ける力を計算している。ここで r は壁からの距離であり、 α は定数である。その後、Aspelmeier は $\alpha \rightarrow \infty$ とすることでモデル

を3次元系へ拡張した [180]. Aspelmeier のシミュレーションは先駆的ではあったが、接触力がヘルツの接触理論に従わず調和力になるなど、妥当性を欠いているところが散見される。一方、本モデルは文献 [178,179] の自然な拡張版で、これらの問題は解消されている。

1.13 レビュー：2次元弾性円盤モデル

2次元弾性円盤モデル [178,179] は本研究に直結する先行研究であるため、ここでその結果について詳しく述べる。

モデルの定式化

2次元弾性円盤は3次元弾性球とほとんど同様に定式化される (3次元弾性球については次章および付録B参照)。ただし、2次元系ではトロイダルモード解 $\nabla \times \mathbf{x}\Phi$ が存在せず、またヘルムホルツ方程式の一般解が (B.5) 式のかわりに

$$\Phi(\mathbf{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\ell=0}^{\infty} \{A_{n\ell} J_{\ell}(k_{n\ell}r) + B_{n\ell} Y_{\ell}(k_{n\ell}r)\} \{a_{n\ell} \cos(\ell\theta) + b_{n\ell} \sin(\ell\theta)\} \quad (1.33)$$

で与えられる。ここで $J_{\ell}(k_{n\ell}r)$ および $Y_{\ell}(k_{n\ell}r)$ はそれぞれ、第一種および第二種ベッセル関数である。

はね返り係数の衝突速度依存性

図 1.5 は2次元モデルにおけるはね返り係数の衝突速度依存性を表している [178, 179]。 (a) は文献 [178] のもので、 ν はポアソン比 ν_0 により

$$\nu = \frac{\nu_0}{1 - \nu_0} \quad (1.34)$$

で与えられる量である。 $\nu = 0.33$ は亜鉛や氷、 $\nu = 0.9$ は弾性ゴムの物性値に近い。一方、(b) は文献 [179] のもので $\nu = 1/3$ である。ここで、「modelA」とは弾性円盤とは別のモデル (バネモデル) を表しており、ここで詳述することは避ける。

衝突速度が大きいほど弾性振動は強く励起される。そのため、はね返り係数の減少も大きくなっている。この振舞いは一見すると図 1.3 に示した氷の実験と似ているが、氷の実際におけるはね返り係数の減少はほとんど散逸で決まっていると考えられる (1.6 節参照) のに対し、文献 [178] では散逸は導入されておらず、はね返り係数の減少は純粹に振動励起によるものである。実際、図 1.5(a) の横軸の単位 (音速) は $c \sim 1000\text{m/s}$ であるため、衝突速度のスケールが図 1.3 とはまったく異なっている。

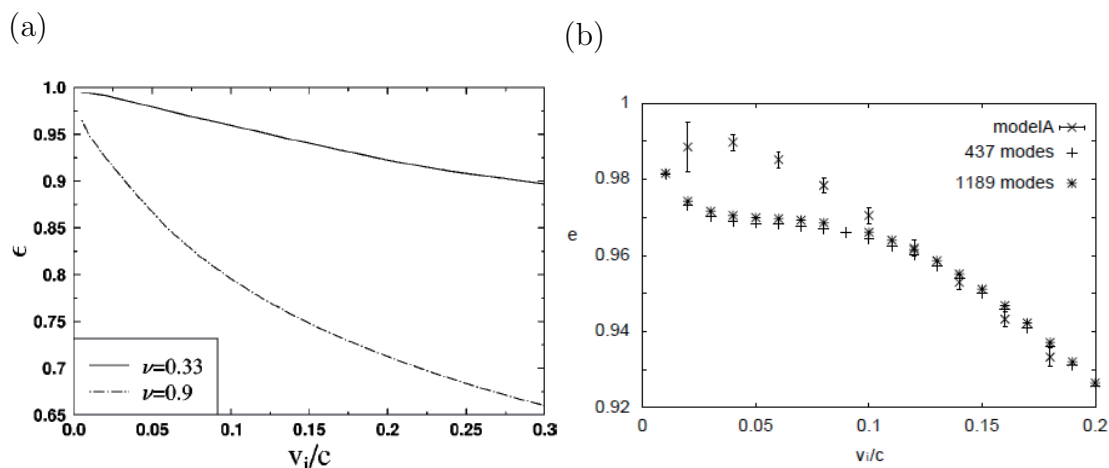


図 1.5: 2次元弾性円盤モデルにおける, はね返り係数の衝突速度依存性. 横軸は音速 c でスケールされている. (a) は文献 [178] のもので, ν はポアソン比 ν_0 を用いて等式 (1.34) により与えられる. (b) は文献 [179] のものである. 「modelA」についてはここでは論じない.

図 1.5(b) では低速領域が平らになっており, 本研究においても同様の振舞いが確認されている (3.2(a) 参照). 文献 [179] ではこの点について論じていないが, 本研究では振動励起を詳細に解析してそのメカニズムを解明した (3.2 節参照).

低速衝突における四重極モードの支配性について

図 1.6 はより低速領域を調べたものである [178]. ひし形のマークがシミュレーションの結果を表している. 実線および破線はそれぞれ, 全モードおよび 4 重極モードの励起エネルギーを表しているが, ここでは計算コストを下げるため, ポテンシャル (2.2) の積分を $\theta = 0$ の一点に置き換えている. 低速領域では四重極モードが支配的であることがわかる. ただし, 近似モデルの導入のため, 支配性が破れる速度などが不明瞭である. そこで, 本研究では近似モデルを用いずに調べ, 斥力系の場合, $v_{CM}(0) < 0.1c^{(t)}$ で 4 重極モードが支配性であることを確認した (付録 J 参照).

文献 [178] では論じていないが, 励起エネルギーに特徴的な振動構造が出現している. これは接触時間と振動モードの周期が共鳴しているためにみられる振舞いである (3.2 節参照).

準静理論との整合性

準静理論との整合性についても調べている. 3次元球におけるヘルツの接触力, 接触時間および最大変位はそれぞれ, 等式 (1.3), (1.8) および (1.9) で与えられる

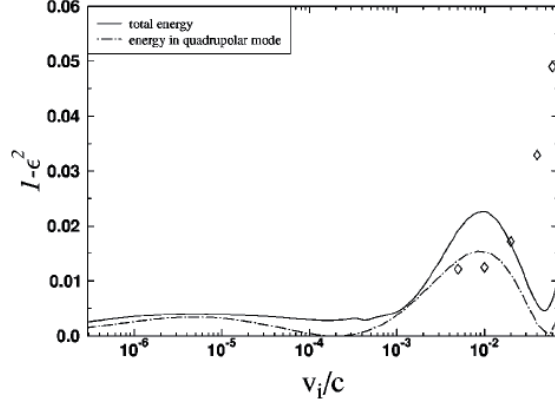


図 1.6: 低速領域における、はね返り係数の衝突速度依存性を文献 [178] より転載. ひし形のマークがシミュレーション結果を表している. 実線および破線はそれぞれ, 全モードおよび4重極モードの励起エネルギーを表しているが, ここでは計算コストを下げるため, ポテンシャル (2.2) の積分を $\theta = 0$ の一点に置き換えている.

が, 2次元弾性円盤の場合,

$$F_{2d}(h) = \pi E \frac{h}{\log 4R} h + O\left(\frac{h \log \log 1/h}{(\log h)^2}\right) \quad (1.35)$$

$$\tau_{2d} \simeq 2 \frac{\delta_{\max}}{v_i} \int_0^1 dx \left[1 + \left\{ 1 + \frac{\log(x^2 - \log 4v_i/c)}{2 \log 4v_i/c} \right\}^{-1} x^2 \right]^{-1/2} \quad (1.36)$$

$$\delta_{\max} \simeq R \frac{v_i}{c} \sqrt{\log \frac{4c}{v_i}} \quad (1.37)$$

となる [178]. ここで, E および R は円盤のヤング率および半径である. また, $F_{2d}(h)$ は単位長さあたりの力, τ_{2d} は接触時間, δ_{\max} は最大変位である. 導出方法は 1.3 節に示した 3次元の場合と同様である. 変位 h や衝突速度 $v_{CM}(0)$ に対する依存性が 3次元の場合とまったく異なることに注意されたい.

図 1.7 は単位長さあたりの力と変位の関係をプロットしたものである. (a) が文献 [178], (b) が文献 [179] のものである. (a) の矢印のついた線がシミュレーションの結果で, 実線が等式 (1.35) をプロットしたものである. 両者は定性的には一致しているが, 定量的な再現性はあまりよくない. (b) でも同様である.

また, 図 1.8 は接触時間と衝突速度の関係をプロットしたものである [178]. ひし形のマークがシミュレーションの結果で, 破線および実線はそれぞれ, 等式 (1.36) および (1.37) を表している. こちらも定性的には一致しているが, 定量的な再現には至っていない.

このように, 2次元弾性円盤 [178, 179] ではヘルツの準静理論との整合性が不明瞭であるが, 本研究では定量的なレベルの再現性を確認している (3.1 節および付録 J 参照).

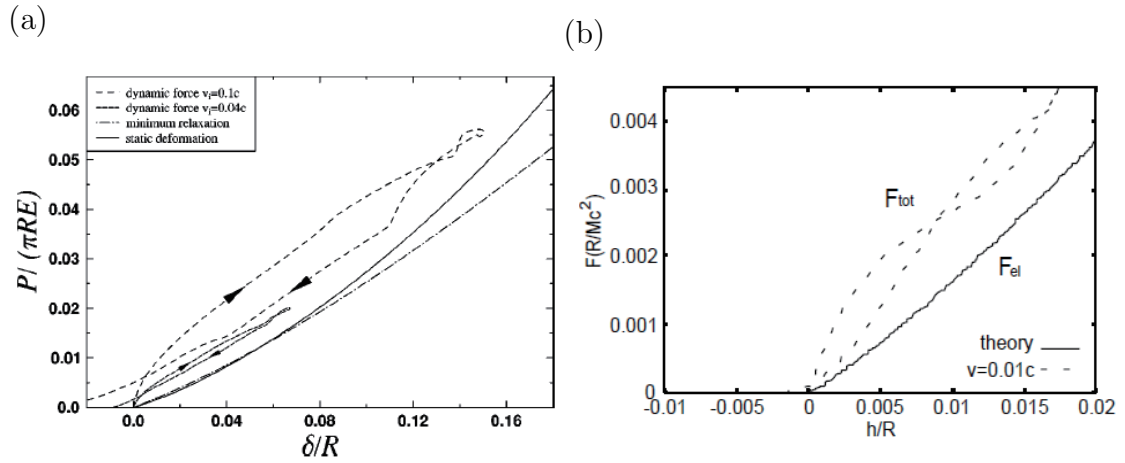


図 1.7: 単位長さあたりの力と変位の関係. (a) は文献 [178] のもので, 矢印のついた線がシミュレーションの結果, 実線が等式 (1.35) を表している. (b) は文献 [179] のものである.

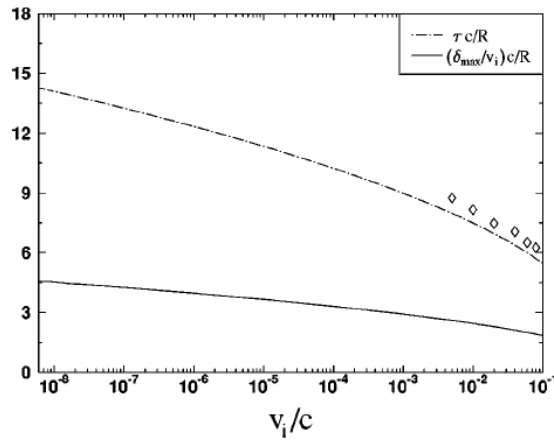


図 1.8: 接触時間の衝突速度依存性を文献 [178] より転載. ひし形のマークがシミュレーション結果を表している. 破線および実線はそれぞれ, 等式 (1.36) および (1.37) を表している.

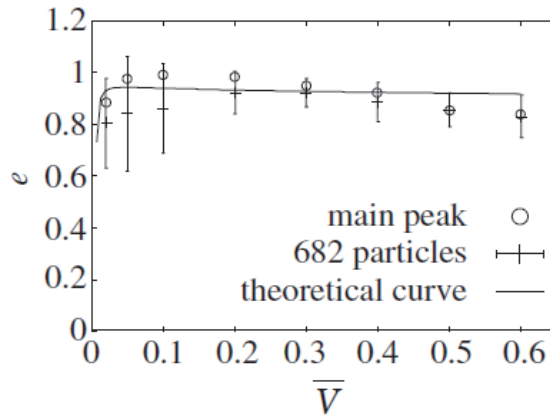


図 1.9: $g = 0.2$ における，はね返り係数の衝突速度依存性を文献 [166] より転載．

1.14 レビュー：ナノクラスターの超弾性衝突

熱活性ナノクラスターにおける超弾性衝突の研究 [166–168, 181] は，有限温度シミュレーション（第 4 章）を行う動機を与えた先行研究である．文献 [167] では原子挿入法，文献 [166, 168, 181] ではレナードジョーンズポテンシャルを用いた分子動力学法により，熱活性ナノクラスターの衝突を調べている．特に，後者の文献では超弾性衝突の性質やメカニズムを詳細に調べているので，ここで詳しく述べる．

[166, 168, 181] では原子数 1000 未満の面心立方構造をもつナノクラスターを 2 つ用意し，初期状態に温度と速度を与えて衝突させている．この際，表面間の原子には拡張レナードジョーンズ相互作用 (2.1) を仮定している．図 1.9 は凝集パラメーター $g = 0.2$ における，はね返り係数 e の衝突速度 V 依存性を示している．ここで， \overline{linex} は物理量 x の無次元量を表す．単位にはレナードジョーンズポテンシャルの井戸の深さ ϵ と斥力核 σ ，および原子質量 m が用いられている．低速衝突でははね返り係数が 1 を超えたサンプルが見つかった．実線で示された理論曲線は準静理論によるもので，詳細については 3.3 節を参照されたい．

はね返り係数の頻度分布を示したのが図 1.10 である．(a) は表面に斥力のみ働く場合 $g = 0$ で，衝突速度は $V = 0.02\sqrt{\epsilon/m}$ としている．実線はガウス分布によるフィッティングを表し，斥力のみの場合にはガウス分布でよく表されることがわかる．

一方，(b) では低減引力の場合 $g = 0.2$ で，衝突速度は $V = 0.1\sqrt{\epsilon/m}$ としている． $e = 0.982$ 付近のメインのピークの外に， $e = 0.448$ および $e = 0.656$ 付近にもピークが現れている．このときのシミュレーション動画を確認すると，後者の場合には衝突後に回転が励起されており，このマクロな回転の励起がはね返り係数の減少に寄与していると述べられている．確かに，回転の励起されない本モデルでは，このようなサブピークは確認されていない．ここで，図 1.9 の「main peak」とは $e = 0.982$ 付近のピーク位置を表している．

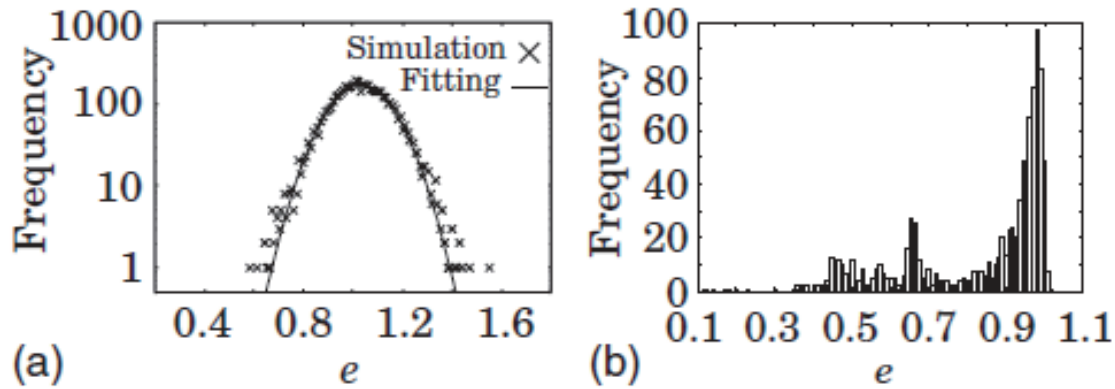


図 1.10: はね返り係数の頻度分布を文献 [166] より転載. (a) は $g = 0$ かつ $V = 0.02\sqrt{\epsilon/m}$, (b) は $g = 0.2$ かつ $V = 0.1\sqrt{\epsilon/m}$ の場合である. (a) の実線はガウス分布によるフィッティングを表す.

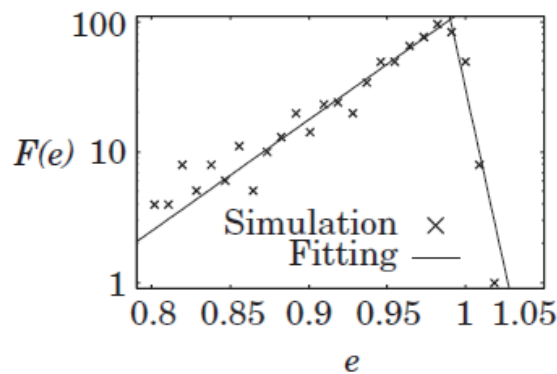


図 1.11: メインピーク付近を拡大したはね返り係数の頻度分布を文献 [166] より転載. 片対数プロットしている. 実線は2重指数関数によるフィッティングを表す.

また、メインピークを片対数グラフで表したのが図1.11である。ここで $F(e)$ は e の頻度を表す。 $e < 1$ の裾が広がった非ガウス分布になっているのがわかる。実線はフィッティング曲線を表し、 $e < 0.982$ では $\log F(e) = (19.6 \pm 1.9)e + (-14.7 \pm 1.8)$, $e > 0.982$ では $\log F(e) = (-127 \pm 28)e + (130 \pm 28)$ である。すなわち、メインピーク付近の分布は2重指数関数で表される。本モデルにおいても、はね返り係数の非ガウス性について調べたが、ここまではっきりとした振舞いは確認されていない (付録 K 参照)。

与えられた凝集パラメーターおよび衝突速度に対し、衝突後にどのような状態がどの程度の割合で生じるかを示したのが図1.12である。ここで、文献 [166] では c は凝集パラメーター、 P は割合を表す。また、領域 (i) は癒合、領域 (ii) は bouncing (ポテンシャル井戸によるトラップ)、領域 (iii) は非弾性衝突、そして領域 (iv) は

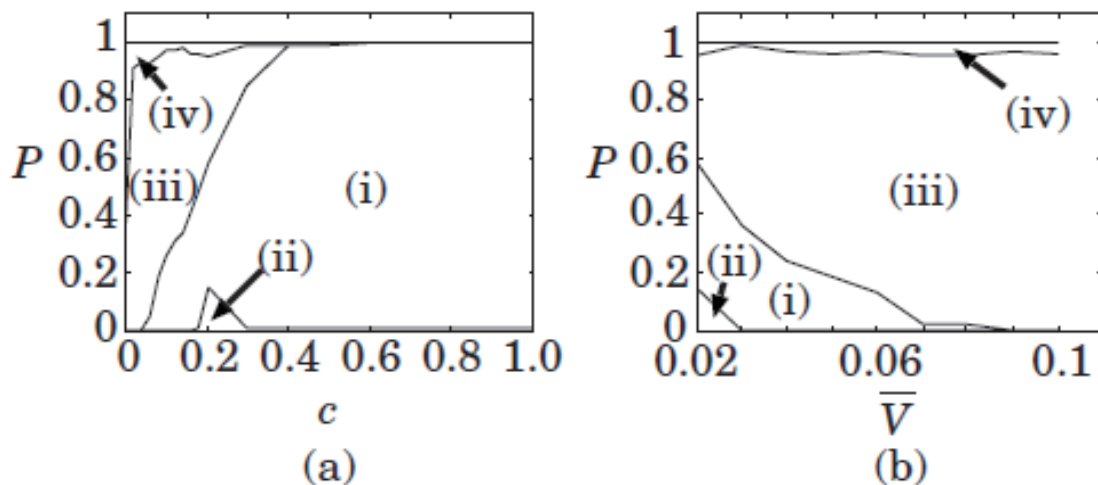


図 1.12: 衝突の相図を文献 [166] より転載. 領域 (i) は癒合, 領域 (ii) は bouncing (ポテンシャル井戸によるトラップ), 領域 (iii) は非弾性衝突, 領域 (iv) は超弾性衝突を表し, P は割合である. (a) では $V = 0.02\sqrt{\epsilon/m}$, (b) では $c = 0.2$ に固定している.

超弾性衝突を表す. (a) では $V = 0.02\sqrt{\epsilon/m}$, (b) では $c = 0.2$ に固定している.

図 1.12(a) から, 引力が強くなるにつれて, 領域 (iii) および (iv) は減少することがわかる. 特に, 引力が強い場合 $c > 0.6$, はね返りモード (ii), (iii), (iv) は見られなくなる. また, 弱引力 $c < 0.4$ では (iv) 超弾性衝突が観測される.

図 1.12(b) から, 衝突速度が増加するにつれて, 領域 (i) および (ii) は減少することがわかる. また, $0.02 \leq V/\sqrt{\epsilon/m} \leq 0.1$ の範囲で超弾性衝突が発生することがわかる. 図 1.12(b) の $V < 0.04\sqrt{\epsilon/m}$ と, 図 1.12(a) の $c < 0.2$ は鏡面对称的であり, 凝集パラメーターが衝突速度の役割を果たすことが示唆される.

ここで, ナノクラスターにおける変位と接触力の関係について触れておく. 弾性論によれば, 変位と接触力の間には等式 (1.3) が成り立つ. もちろん原子スケールで連続体の関係式が成り立つ保証はないが, 文献 [181] ではナノクラスターにおいても等式 (1.3) が成り立つことを示した (図 1.13 参照). ここで, ポアソン比 $\nu = 0.0774$, ヤング率 $Y = 454\epsilon/\sigma^2$ としている. ただし, データの範囲が $0.33 < h/\sigma < 0.43$ と非常に狭く, 等式 (1.3) のような非線形な振舞いが再現されているかは不明瞭である.

衝突板ゆらぎ (4.3) の定理との整合性を示したのが図 1.14 である [181]. 両者には明らかな食い違いが見られる. 衝突板ゆらぎの定理は始状態および終状態において, 重心運動と相対運動が非結合であることを前提に導出されるが (等式 (E.5) および (E.6) 参照), 分子動力学法では衝突がなくても 2 つの運動は混ざるため, 等式 (E.6) は一般に成り立たない. この違いが両者のずれの主要因であると考えられる. 一方, 本モデルは定理と同じセットアップであり, 定理を再現することを確

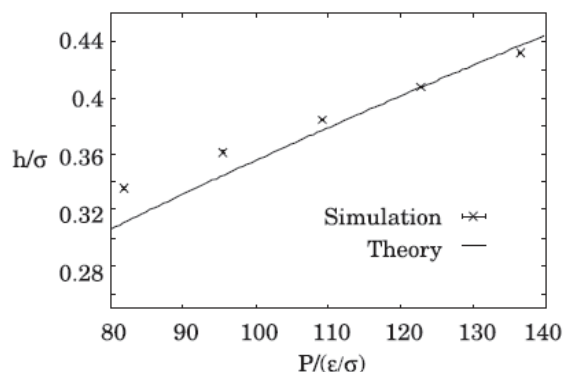


図 1.13: 変位と接触力の関係を文献 [181] より転載. 実線は等式 (1.3) を表す.

かめている (図 4.5 参照). ただし, 本研究と文献 [181] ではデータの取り方が異なる (本研究の手法は 4.3 節を参照されたい). 文献 [181] では衝突後に熱平衡状態を生成し, 並進速度を反転させて再び衝突を引き起こす. これを 5000 回繰り返す. このとき 2 度目の衝突後の速度が, 最初の衝突における初速度 $V = 0.02\sqrt{\epsilon/m}$ と等しい場合のみ採用する. そうして得られた分布が図 1.14(b) である. ここで, W および \bar{W} はそれぞれ, 1 度目および 2 度目のマクロなエネルギー変化である. この分布から $\ln P(W)/P(\bar{W})$ を計算することにより図 1.14(a) が得られる.

超弾性衝突の熱力学的性質を調べたのが図 1.15 および 1.16 である [168]. 図 1.15 は温度の時間発展で, 2 つのクラスターの結果を実線および破線で表している. (a) は非弾性衝突のサンプルのもので, 終状態の温度が上がっているのがわかる. 一方, (b) の超弾性衝突の場合には温度が下がっている.

また, 図 1.16 は超弾性衝突におけるエントロピー変化 ΔS の時間発展で, 2 つのクラスターの結果を実線および破線で表している. (a) は $\bar{t} \leq 15.8$, (b) は $\bar{t} \geq 15.8$ である. (b) から, 最終的に 2 つのクラスターのエントロピーが異なっている. 図 1.16 は 1 サンプルの結果であるため, その初期状態に依存してこのような非対称性が生じていると考えられる. 一方, 全系は閉じているにもかかわらず, 最終的な全エントロピー変化がわずかだが負になっているのは非常に興味深い. 後の議論から, 超弾性衝突における温度およびエントロピーの減少は, 局所構造のポテンシャルエネルギーの減少によるものであることが推察される.

最後に超弾性衝突とナノクラスターの構造変化の関係についてまとめる. 文献 [168] では原子 i に対する時間平均した Steinhardt の結合秩序変数 $Q_\ell(i)$ [182–184] を用いて, 超弾性衝突の特徴を調べている. $Q_\ell(i)$ の定義は以下の通りである. 原子 i のまわりの相互作用範囲内の原子数を $N_b(i)$ とし,

$$q_{\ell m}(i) \equiv \frac{1}{N_b(i)} \sum_{j=1}^{N_b(i)} Y_{\ell m}(r_{ij}) \quad (1.38)$$

を定義する. ここで r_{ij} は原子 i と j の距離であり, $Y_{\ell m}$ は球面調和関数である. こ

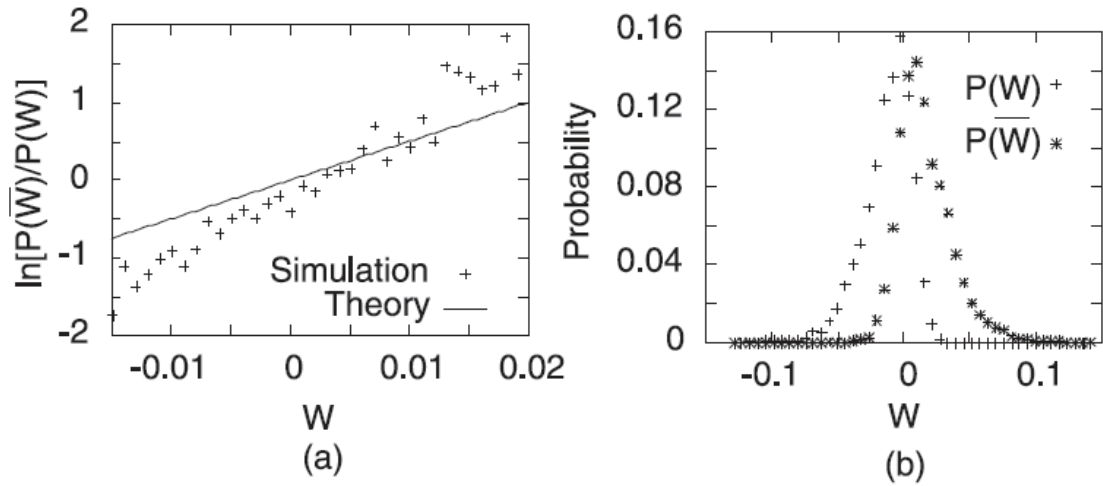


図 1.14: (a) $\ln P(\bar{W})/P(W)$ の W 依存性, および (b) 分布 $P(W)$ と $P(\bar{W})$ を文献 [181] より転載. (a) の実線は等式 (4.3) を表す.

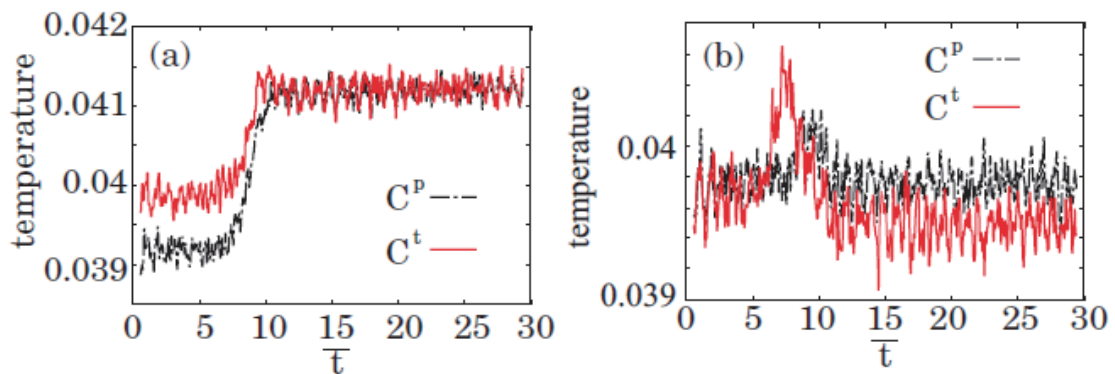


図 1.15: 温度の時間発展を文献 [168] より転載. 2つのクラスターの結果を実線および破線で示している. (a) は非弾性衝突, (b) は超弾性衝突のサンプルである.

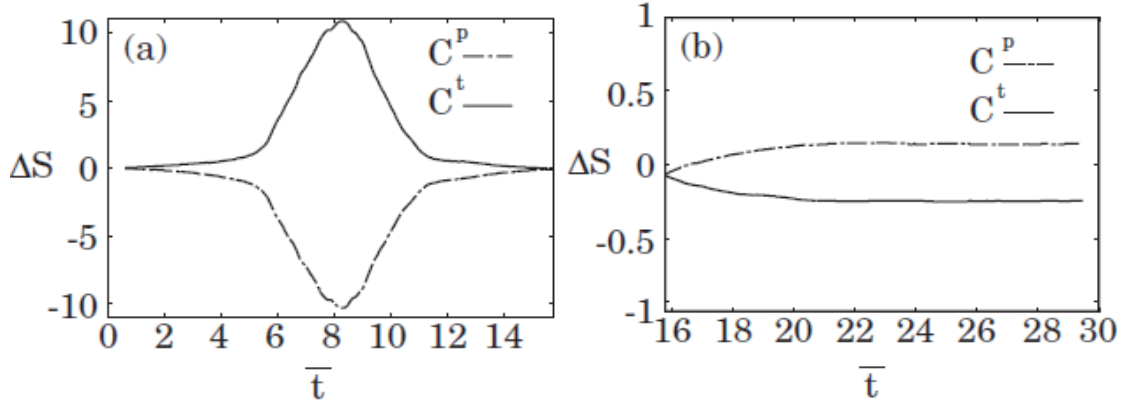


図 1.16: 超弾性衝突におけるエントロピー変化の時間発展を文献 [168] より転載. 2つのクラスターの結果を実線および破線で示している. (a) は $\bar{t} \leq 15.8$, (b) は $\bar{t} \geq 15.8$ である.

れより

$$q_\ell(i) \equiv \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} |q_{\ell m}(i)|^2} \quad (1.39)$$

を定義し, その時間平均として $Q_\ell(i)$ は定義される:

$$Q_\ell(i) \equiv \frac{1}{\tau_\alpha} \int_{t_0}^{t_0+\tau_\alpha} dt q_\ell(i) \quad (1.40)$$

ここで τ_α は時間間隔である. $Q_\ell(i)$ を調べることにより, 面心立方格子を成す原子数が非弾性衝突では減少するのに対し, 超弾性衝突では増加することを明らかにした.

文献 [168] では (1.38) で定義される $|q_{6m}|^2$ についても調べている. 始状態における $|q_{64}|^2$ の頻度分布を示したのが図 1.17(a) である. 実線は非弾性衝突, 破線は超弾性衝突の結果を表す. 両者にはずれが見られる. このずれを検出するために

$$\gamma_m^2(k) \equiv \frac{\{O_m(k) - S_m(k)\}^2}{O_m(k) + S_m(k)} \quad (1.41)$$

を導入する. ここで $O_m(k)$ および $S_m(k)$ はそれぞれ, 非弾性衝突および超弾性衝突に対する k 番目のビンにおける $|q_{6m}|^2$ の頻度である. γ_m^2 をプロットしたのが図 1.17(b) である. $|q_{64}|^2 \leq 0.02$ で特にずれていることがわかる.

また,

$$\chi_m^2 \equiv \sum_k \gamma_m^2(k) \quad (1.42)$$

により χ_m^2 を導入し, その m 依存性を示したのが図 1.18 である. $m=4$ が他と比べて大きなずれを示すことがわかる.

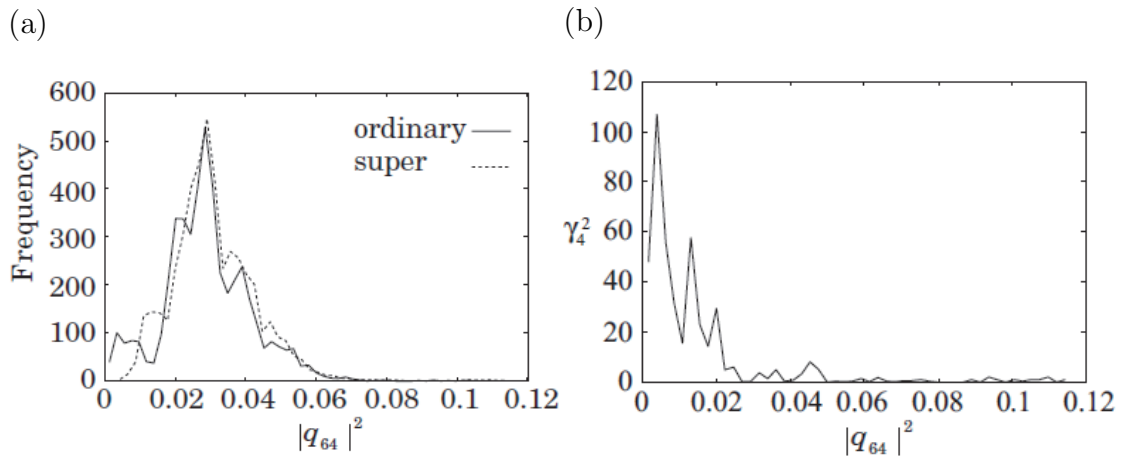


図 1.17: (a) $|q_{64}|^2$ の頻度分布を文献 [168] より転載. 実線は非弾性衝突, 破線は超弾性衝突の結果を表す. 等式 1.41 によって定義される, 非弾性衝突と超弾性衝突の頻度差 γ_4^2 をプロットしたのが (b) である.

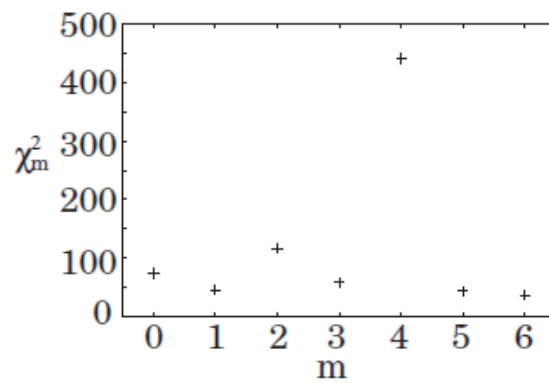


図 1.18: χ_m^2 の m 依存性を文献 [168] より転載.

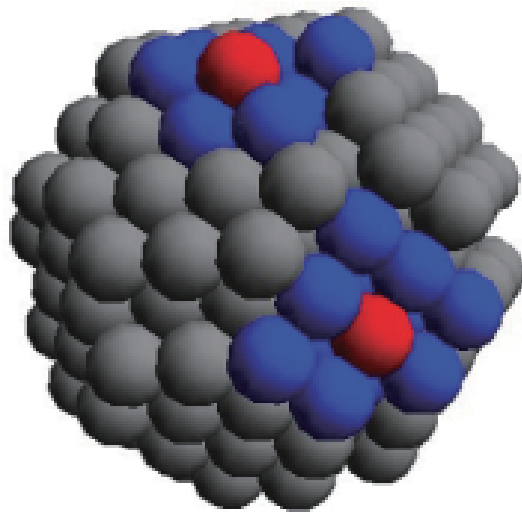


図 1.19: 超弾性衝突の 1 サンプルにおける局所構造の位置について文献 [168] より転載. 図 1.17(b) の 2 つ目のピーク付近の秩序変数 $|q_{64}|^2$ を持つ原子を赤で示し, その周り 1.6σ の範囲内にある隣接原子を青で示している.

文献 [168] では, 図 1.17(b) の 2 つ目のピーク付近の秩序変数 $|q_{64}|^2$ を持つ原子に着目し, その原子に隣接する原子から構成される局所構造の位置とポテンシャルエネルギーについても調べている. 図 1.19 はその局所構造の位置を, 超弾性衝突の 1 サンプルについて示したものである. この図から, 局所構造は表面に位置し, 不揃いな配向のために不安定であるように見える. 実際, 局所構造のポテンシャルエネルギーは, $\gamma_4^2 = 0$ 付近の局所構造に比べて大きいことが確かめられている. したがって, 準安定な局所構造の存在が超弾性衝突を引き起こす要因であると結論される. これより, 超弾性衝突ではこの高いポテンシャルエネルギーが並進エネルギーに変換されること, さらには温度やエントロピーの減少はポテンシャルエネルギーの減少によるものであることが推察される.

ここでは局所構造に着目した超弾性衝突のメカニズムについて文献 [168] に基づいて論じた. 一方, 超弾性衝突におけるマクロな変形の役割を明らかにすることも重要であり, それについては第 4 章で詳細に論じる.

1.15 本論文の構成

次章以降については公表論文 [185] を基に構成されている. ただし, 付録 J, 付録 K, L および M には未発表の結果やモデルを記した.

まず, 次章で衝突モデルとシミュレーションのセットアップを導入する. 第 3 章では温度 0 でのシミュレーション結果について述べる. まず, 3.1 節で斥力のみ働く場合において, ヘルツの接触理論が再現されることを確認する. また, 引力が

働く場合においても、対応する接触理論との相違について調べる。3.2節では、はね返り係数の衝突速度依存性を散逸がない場合について調べ、準静理論では見られない特徴的な振動構造の存在を示す。さらにその構造が振動と衝突の共鳴に由来するものであることを示す。3.3節では散逸を導入し、散逸が大きくなるにつれて振動構造が消失し、準静理論における振る舞いに落ち着くことを示す。第4章では有限温度の場合のシミュレーション結果について述べる。4.1節では低減引力を用いることで、本弾性体モデルにおいても超弾性衝突が起こることを示す。また、衝突速度ごとに合着、非弾性衝突、および超弾性衝突の発生確率を調べ、その相図を示す。さらに、超弾性衝突と散逸の関係についても調べる。4.2節では、はね返り係数と振動モードの関係を調べて、超弾性衝突のメカニズムに迫る。4.3節では田崎が導出した衝突版ゆらぎの定理 [177] を本シミュレーションにより数値的に確かめる。4.4節では衝突による加熱が十分に小さく、等温条件の適用が妥当であることを確かめる。第5章ではシミュレーションの結果について考察する。5.1節では摂動論によって、4.2節で得られたような結果を低速衝突の場合に再現し、超弾性衝突のメカニズムを明らかにする。ここまでは重心運動と衝突モードの間のエネルギー遷移に焦点が当てられてきた。そこで5.2節では、振動モード間の遷移について調べる。5.3節では今後の展望について述べる。最後に第6章で本研究の結論についてまとめる。付録Aでは固体粘性率を有する等温粘弾性球の波動方程式の導出について説明する。付録Bでは自由端境界条件下での波動方程式の解の導出についてまとめる。付録Cでは連続体ダイナミクスにおけるランダム力の役割について説明する。また、固体粘性率に由来する緩和時間が接触時間と同程度になる固体粘性率の臨界値を評価する。付録Dでは力の明示的表式を与える。付録Eでは文献 [177] に基づき、衝突問題に対するゆらぎの定理や熱力学第二法則を導出する。付録Fでは物体の断熱圧縮による温度上昇を与える表式を導出する。付録Gでは音波の吸収係数に対する表式を導き、固体粘性率の測定方法について述べる。付録HおよびIには、本文で省略した計算の詳細を示す。付録Jでは接触時間の衝突速度依存性、および4重極モードの支配性について示す。付録Kで引力の影響によるはね返り係数の非ガウス性について調べる。付録Lではクーロン摩擦を導入し、スピン球の衝突について調べる。付録Mでは、第2章とは異なるフレームワークに基づいたモデルを提示する。

第2章 等温粘弾性球の衝突モデル

この章では等温粘弾性球の衝突モデルを導入する。衝突を考慮しない場合の等温粘弾性球の運動方程式（波動方程式）の導出については付録 A に示す。そこへ 2 球の表面間に働く相互作用 V を導入することで衝突を取り扱う。ここではまず 2.1 節で相互作用を導入した後、2.2 節で運動方程式について詳述する。最後に 2.3 節でシミュレーションのセットアップについてまとめる。

2.1 2 球間に働く相互作用

2 球 $i = 1, 2$ の表面にそれぞれ半径 d_i の粒子が分布し、異なる球の粒子の間にはレナードジョーンズ相互作用

$$\phi(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - g \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (2.1)$$

が働くと仮定する。ここで r は粒子間距離、 ϵ および σ はそれぞれポテンシャル井戸の深さおよび斥力核の直径である。また $0 \leq g \leq 1$ は凝集パラメータで、引力の低減効果を表す [163]。本研究では基本的に $g = 1$ の、通常のレナードジョーンズ相互作用を用いるが、3.1 および 5.1 節では $g = 0$ 、4.1、4.2 および 4.3 節では $g = 0.2$ の場合についても調べる。なお、計算コスト削減のため、 $r > 5\sigma$ で $\phi(r) = 0$ とする。

$\phi(r)$ を球表面で積分することにより、2 球間に働く相互作用 V が

$$V(z_{\text{CM}}, \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) = 4\epsilon \frac{R_1^2 R_2^2}{d_1^2 d_2^2} \int_0^{\pi/2} d\theta_1 \sin \theta_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{\pi/2} d\theta_2 \sin \theta_2 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \phi(r(z_{\text{CM}}, \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2)) \quad (2.2)$$

のように得られる。このとき粒子間距離 r は

$$r(z_{\text{CM}}, \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) = \left| \{ \mathbf{G}_2 + R_2 \mathbf{e}_{r_2}(\theta_2, \varphi_2) + \mathbf{u}_2(R_2, \theta_2, \varphi_2) \} - \{ \mathbf{G}_1 + R_1 \mathbf{e}_{r_1}(\theta_1, \varphi_1) + \mathbf{u}_1(R_1, \theta_1, \varphi_1) \} \right| \quad (2.3)$$

のように、2 球の重心間の距離 z_{CM} のみならず、2 球 $i = 1, 2$ の変位 \mathbf{u}_i にも依存することに注意されたい。ここで、 \mathbf{G}_i および \mathbf{e}_{r_i} はそれぞれ球 i の重心位置および動径方向の単位ベクトルである（図 2.1 参照）。衝突前に球が振動していなければ、

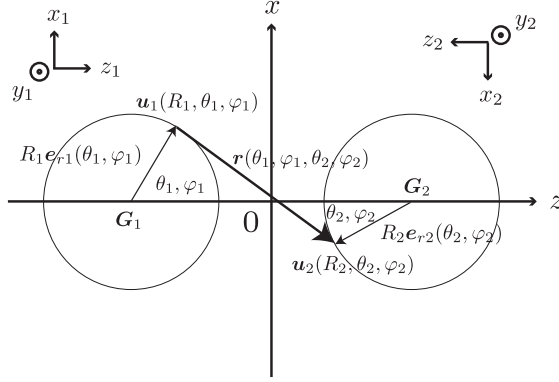


図 2.1: 座標系. ここで, $\mathbf{u}_i(R_i, \theta_i, \varphi_i)$ は球 i の表面の変位を表す.

系は軸対称であり, このとき粒子間距離 $r(\theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2)$ は θ_1, θ_2 および $\varphi_1 + \varphi_2$ のみに依存し, 等式 (2.2) の φ_1 および φ_2 に関する積分は解析的に実行することができる (付録 D.2 参照). 一方, 球が振動していて変位 \mathbf{u}_i が φ_i 依存する場合には, このような積分を行うことはできない.

2.2 運動方程式

前節で導入した相互作用 $V(z_{\text{CM}}, \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2)$ により, 2 球 $i = 1, 2$ の重心および振動の運動方程式は

$$M_{\text{eff}} \ddot{z}_{\text{CM}} = - \frac{\partial V(z_{\text{CM}}, \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2)}{\partial z_{\text{CM}}} \quad (2.4)$$

$$\rho_i \frac{\partial^2 \mathbf{u}_i}{\partial t^2} = \rho_i \left(1 + \gamma_i \frac{\partial}{\partial t} \right) \left\{ \left(c_i^{(\ell)} \right)^2 \nabla \nabla \cdot \mathbf{u}_i - \left(c_i^{(t)} \right)^2 \nabla \times (\nabla \times \mathbf{u}_i) \right\} - \frac{\partial V(z_{\text{CM}}, \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2)}{\partial \mathbf{u}_i} \quad (2.5)$$

と表される¹. ここで半径, 密度, 質量をそれぞれ $R_i, \rho_i, M_i \equiv \rho_i 4\pi R_i^3/3$ としていて, $M_{\text{eff}} \equiv (1/M_1 + 1/M_2)^{-1}$ は換算質量である. また, $c_i^{(\ell)}$ および $c_i^{(t)}$ はそれぞれ縦波および横波音速, γ_i は固体粘性率である. ここで, 固体粘性率による散逸に付随して揺動散逸関係式を満たすようなランダム力が発生することを注意しておく. (連続体ダイナミクスにおけるゆらぎについては付録 C を参照されたい.) しかしながら, 今回扱う状況のほとんどにおいて, 接触時間は γ_i による緩和時間に比べて十分短いため, γ_i が大きくない限りそのようなゆらぎは重要ではないと考えられる (付録 C 参照). それゆえ, 本研究ではランダム力を単純に無視する. こ

¹厳密には変形に伴い密度は変化するはずである (それによって重心位置もずれる). しかし微小変形を議論している今の場合において, この変化は高次微小量であるため影響しない (文献 [57] の 8 ページ脚注参照).

ここでは速度場 $\mathbf{v}(t; \mathbf{x})$ は単に変位場の時間微分 $\mathbf{v}(t; \mathbf{x}) = \partial \mathbf{u}(t; \mathbf{x}) / \partial t$ であると仮定している。このフレームワークにおいて、縦波の固体粘性率と横波の固体粘性率は独立ではない（等式 (B.10) 参照）。

変位場の運動方程式 (2.5) は時間のみならず空間の積分まで実行する必要がある、直接扱おうと計算コストがかさんでしまう。そこで、自由境界条件下の解の一つであるスフェロイダルモード関数 $\tilde{\mathbf{u}}_{i,n\ell m}^{(S)}(\mathbf{x})$ （等式 (B.20) 参照）を用いて運動方程式 (2.5) を展開する。まず、変位場 $\mathbf{u}_i(t; \mathbf{x})$ の展開を

$$\mathbf{u}_i(t; \mathbf{x}) = \sum_{n\ell m} Q_{i,n\ell m}(t) \frac{\tilde{\mathbf{u}}_{i,n\ell m}^{(S)}(\mathbf{x})}{R_i} \quad (2.6)$$

のように表す。ここで、 n ($n = 0, 1, 2, \dots$)、 ℓ ($\ell = 0, 1, 2, \dots$) および m ($-\ell \leq m \leq \ell$) はそれぞれ動径、余緯度および方位角方向についてのモード数である。このとき運動方程式 (2.5) は

$$M_i \ddot{Q}_{i,n\ell m} = -M_i \omega_{i,n\ell}^2 (Q_{i,n\ell m} + \gamma_i \dot{Q}_{i,n\ell m}) - \frac{\partial V(z_{\text{CM}}, \{Q_{i',n'\ell'm'}\})}{\partial Q_{i,n\ell m}}, \quad (2.7)$$

のように係数 $Q_{i,n\ell m}(t)$ の運動方程式に書き直すことができる。ここで $\omega_{i,n\ell}$ は球 i の固有周波数である（付録 B 参照）。

自由端境界条件解による展開について

相互作用が働いているにも関わらず、自由端境界条件下の解を用いることを論理的に正当化することは難しい。したがって、ここでは係数の運動方程式 (2.7) および展開の表式 (2.6) でもって衝突モデルを定義し、これにより等温粘弾性球の衝突を擬似的に表現しているとみるべきである。自由端境界条件下の解を用いることによる最大の問題はスフェロイダルモードとトロイダルモードを同時に扱えないことであり（自由端境界条件下ではスフェロイダルモードとトロイダルモードは直交している）、本研究ではトロイダルモードを無視している。このことは正面衝突では問題にならないが、ななめ衝突のようにトロイダルモードが励起される場合を正しく記述できない。そのような場合を扱うには、相互作用を考慮した境界条件の下で波動方程式 (A.8) を解く必要がある（付録 M 参照）。

励起エネルギーの導入

等式 (2.7) は外力、散逸下での調和振動子の運動方程式である。そこで、調和振動子のハミルトニアン

$$H_{i,n\ell m}(t) = \frac{1}{2} M_i \{\dot{Q}_{i,n\ell m}(t)\}^2 + \frac{1}{2} M_i \omega_{i,n\ell}^2 \{Q_{i,n\ell m}(t)\}^2 \quad (2.8)$$

から励起エネルギー

$$\Delta H_{i,nlm} \equiv H_{i,nlm}(t_f) - H_{i,nlm}(0) \quad (2.9)$$

を定義する．ここで t_f は衝突後の時刻を表す．散逸がない場合，エネルギー保存則により励起エネルギーははね返り係数と

$$e = \sqrt{1 - \sum_{i,nlm} \frac{\Delta H_{i,nlm}}{H_{CM}(0)}} \quad (2.10)$$

のように結び付く．ここで $H_{CM}(t) = M_{\text{eff}}\{\dot{z}_{CM}(t)\}^2/2$ は時刻 t における 2 重心の相対運動の運動エネルギーである．散逸がないと，準静理論では必ず $e = 1$ となるが，本モデルでは等式 (2.10) に従って決定される．その結果，はね返り係数は振動励起を反映した興味深い振舞いを示す (3.2 節参照)．

2.3 シミュレーションのセットアップ

この節では本シミュレーションのセットアップ (初期条件，ターゲット粒子について，数値積分法，パラメーター値，カットオフ周波数) についてまとめる．

初期条件

初期条件は，重心位置は相互作用の範囲外に固定し，重心速度は $0.001c^{(t)}$ から $0.4c^{(t)}$ まで変えて，その依存性を調べる．振動モードについては第 3 章では $Q_{i,nlm}(0) = \dot{Q}_{i,nlm}(0) = 0$ ，第 4 章ではカノニカル分布

$$p_{\text{can}}(Q_{i,nlm}(0)) = \sqrt{\frac{M_i \omega_{i,nl}^2}{2\pi k_B T}} \exp\left[-\frac{1}{k_B T} \frac{1}{2} M_i \omega_{i,nl}^2 \{Q_{i,nlm}(0)\}^2\right], \quad (2.11)$$

$$p_{\text{can}}(\dot{Q}_{i,nlm}(0)) = \sqrt{\frac{M_i}{2\pi k_B T}} \exp\left[-\frac{1}{k_B T} \frac{1}{2} M_i \{\dot{Q}_{i,nlm}(0)\}^2\right], \quad (2.12)$$

になるよう，正規乱数により初期値を与える．これにより初期温度 T を導入する．また，5.2 節では単一モード励起状態を用いる (5.2 節参照)．

ターゲット粒子について

ターゲット粒子として，本研究では主に硬い壁の極限 (表 2.1 参照) を適用した場合について解析するが，3.1 節では球同士の衝突についても扱い，ターゲット粒子の違いによる影響を調べている．ただし，球同士の衝突においても，同質 (表 2.1 参照) の場合に限る．そのため，以下では $c^{(t)}$ ， $c^{(\ell)}$ ， ρ および γ の添字 i を省略する．

表 2.1: ターゲット粒子の設定について.

硬い壁	$c_2^{(t)} \rightarrow \infty$	$c_2^{(\ell)} \rightarrow \infty$	$(R_2 \rightarrow \infty)$	
同質球	$c_2^{(t)} = c_1^{(t)}$	$c_2^{(\ell)} = c_1^{(\ell)}$	$\rho_2 = \rho_1$	$\gamma_2 = \gamma_1$

表 2.2: 銅の文献値.

$c^{(t)}$	ρ	ポアソン比	ϵ	σ	d
2270 m/s	8960 kg/m ³	0.343	0.415 eV	0.2277 nm	0.256 nm

数値積分法

運動方程式 (2.4), (2.7) の数値積分は適応型ルンゲクッタ法により行う. エネルギー保存系 $\gamma = 0$ において, 全エネルギー $H_{\text{tot}}(t) = H_{\text{CM}}(t) + H_{1,\text{vib}}(t) + H_{2,\text{vib}}(t) + V(z_{\text{CM}}(t), \{Q_{1,n'\ell'm'}(t)\}, \{Q_{2,n'\ell'm'}(t)\})$ の変化率 $|H_{\text{tot}}(t) - H_{\text{tot}}(0)| / H_{\text{tot}}(0)$ が 10^{-5} 以内に収まるように, ステップ毎の推計局所誤差の許容値を設定している.

また, (2.2) 式に含まれる積分については, 軸対称の場合には θ_1 および θ_2 をそれぞれ積分するだけでいいため, 単純な台形公式を用いている. 一方, 軸対称でない場合には θ_1 と φ_1 , および θ_2 と φ_2 をそれぞれ積分する必要がある. これを実行するために, 本研究では Lebedev 求積公式 [186] を用いた. Lebedev 求積公式は球面積分におけるガウス求積公式に相当する公式であり, 任意の多項式関数 $f(x, y, z)$ の次数 ($x^{a_x}y^{a_y}z^{a_z}$ と書いたときの $a_x + a_y + a_z$) が p の項まで正確に積分することができる. ここでは $p = 131$ の公式 [187] を用いている.

シミュレーションに用いるパラメータ値

非物理的な状況を議論してしまうことを避けるために, シミュレーションに必要な諸パラメータの値には銅の文献値 [188] を用いる (表 2.3 参照). また, 本研究では主に半径 10nm の微小球を取り扱う. サイズ依存性については 3.2 節で調べる.

図 2.2 は衝突速度 $v_{\text{CM}}(0) = 0.3c^{(t)}$ における, 同一球 ($R_2 = R_1$) 衝突のスナップショットである. 温度, 散逸は 0 である. 真ん中は最大圧縮の瞬間で, 20%程圧縮されている.

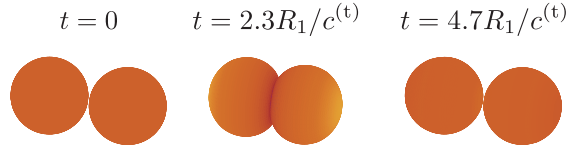


図 2.2: 衝突速度 $v_{CM}(0) = 0.3c^{(t)}$ における同一球 $R_2 = R_1$ 衝突のスナップショット. 温度, 散逸は 0 である. 真ん中は最大圧縮の瞬間で, 20%程圧縮されている.

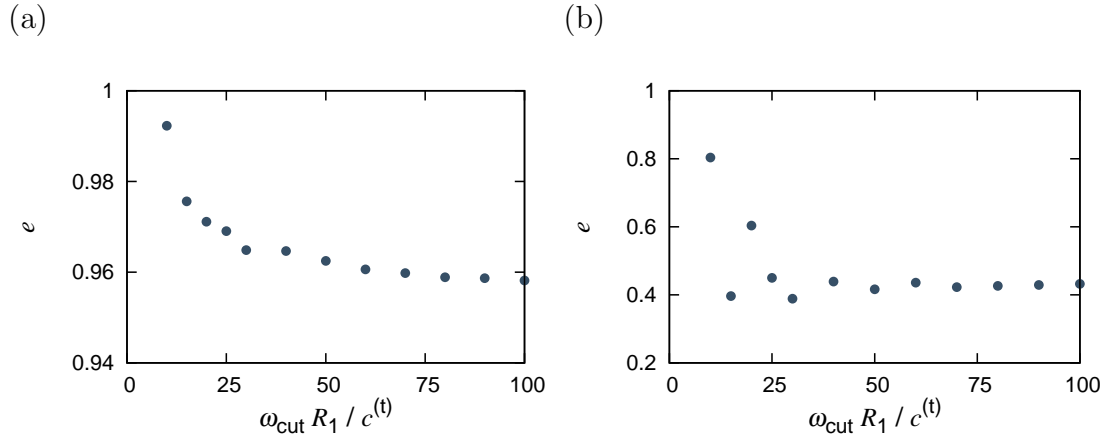


図 2.3: はね返り係数のカットオフ周波数 ω_{cut} 依存性. 温度, 散逸はともに 0 としている. (a) は高速衝突 $v_{CM}(0) = 0.1c^{(t)}$ の場合であり, (b) は低速衝突 $v_{CM}(0) = 0.01c^{(t)}$ の場合である. 高速衝突 (a) では $\omega_{cut} = 100c^{(t)}/R_1$ までに, 低速衝突 (b) においては $\omega_{cut} = 25c^{(t)}/R_1$ までに収束していることがわかる.

カットオフ周波数によるモード有限化とその影響について

カットオフ周波数 ω_{cut} を導入してモードを有限化している. このとき動径モード数 n の最高次は余緯度モード数 l によって異なる (図 B.1 参照). また, 余緯度モード数 l の最高次はおよそ $\omega_{cut} R_1 / c^{(t)}$ に一致する. 初期温度を考慮する第 4 章では $\omega_{cut} = 25c^{(t)}/R_1$, その他では $\omega_{cut} = 100c^{(t)}/R_1$ としている. モード総数はおおよそ 1500 である. 図 2.3 ははね返り係数のカットオフ周波数依存性を示したものである. 温度, 散逸は 0 としている. (a) 高速衝突 $v_{CM}(0) = 0.1c^{(t)}$ においては $\omega_{cut} = 100c^{(t)}/R_1$, (b) 低速衝突 $v_{CM}(0) = 0.01c^{(t)}$ においては $\omega_{cut} = 25c^{(t)}/R_1$ までに収束していることがわかる. なお第 4 章で扱うのは低速衝突の範囲である.

第3章 初期温度0のシミュレーション

ここでは初期温度0シミュレーションにより，衝突時に働く力や，振動の影響について調べる．初期温度の影響については次節を参照されたい．まず3.1節で衝突時に働く力を調べて，接触理論との比較を行う．次に3.2節で散逸がない場合におけるはね返り係数および励起エネルギーの衝突速度依存性について調べる．3.3節では散逸がある場合について調べ，特に散逸が強いときに準静理論との比較を行う．

3.1 衝突時に働く力

ここではまずシミュレーションの妥当性の確認も兼ねて，振動励起が重要でない低速衝突 $v_{\text{CM}}(0) = 0.01c^{(t)}$ において，衝突時に働く力 $F_z \equiv -\partial V/\partial z_{\text{CM}}$ を調べ，従来理論（接触理論）との比較を行う．散逸は0としている．

斥力のみの場合 $g = 0$: ヘルツの接触理論との比較

図3.1(a)は斥力のみの場合 $g = 0$ について示している．縦軸にはスケールした力 $F_z/Y_{\text{eff}}R_{\text{eff}}^2$ をとっている．ここで

$$R_{\text{eff}} \equiv \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right)^{-1} \quad (3.1)$$

$$Y_{\text{eff}} \equiv \left(\frac{1 - \nu_1^2}{Y_1} + \frac{1 - \nu_2^2}{Y_2} \right)^{-1} \quad (3.2)$$

はそれぞれ換算半径および有効ヤング率である．横軸 $(R_1 + R_2 - z_{\text{CM}})/R_{\text{eff}}$ （硬い壁の場合には $R_1 - z_{\text{CM}}$ ）は変位である．本研究では硬い壁との衝突を主に調べるが，ここでは同質粒子（ $R_2 = R_1$ および $R_2 = 2R_1$ の場合）についても調べている．これらのデータがすべてヘルツの接触理論 [52,57]

$$\frac{F_z}{Y_{\text{eff}}R_{\text{eff}}^2} = \frac{4}{3} \left(\frac{h_z}{R_{\text{eff}}} \right)^{3/2} \quad (3.3)$$

で表される一つの普遍曲線にのっていることがわかる．ここで h_z は変位である．ソフトポテンシャルの影響により力の立ち上がりが負値になるため，データ全体

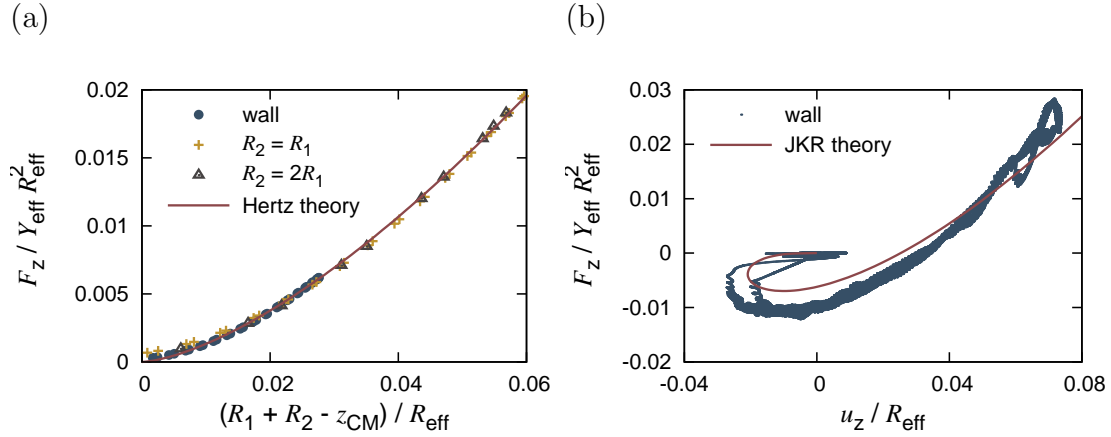


図 3.1: 散逸なし, 低速衝突 $v_{\text{CM}}(0) = 0.01c^{(t)}$ におけるスケールした力 $F_z/Y_{\text{eff}}R_{\text{eff}}^2$ と変位の関係. (a) は斥力のみの場合 $g = 0$ であり, 変位として $(R_1 + R_2 - z_{\text{CM}})/R_{\text{eff}}$ (硬い壁の場合には $R_1 - z_{\text{CM}}$) を用いている. ターゲット粒子として硬い壁の他に同質粒子 ($R_2 = R_1$ および $R_2 = 2R_1$ の場合) についても調べている. それらの結果がすべて (3.3) 式で与えられる普遍曲線にのっており, 本シミュレーションがヘルツの接触理論を完全に再現するモデルであることがわかる. (b) は引力がある場合 $g = 1$ の結果であり, 変位としては局所的な変形を反映する $u_z(R_1, 0, 0)$ を用いている. 実曲線は JKR 理論 (3.5) を表しており, データと理論は定性的にはよく一致している. ただしデータには分子動力学シミュレーション同様 [121], 原点近傍に「吸着効果」に由来するヒステリシスがみられる.

を平行移動していることに注意されたい. その他にはフィッティングなどを一切行っていない. したがって, 本モデルはヘルツの接触力を完全に再現する.

引力がある場合 $g = 1$: JKR 理論との比較

図 3.1(b) は引力がある場合 $g = 1$ の結果を示している. ここでは引力による局所的な変形をとらえるために, 横軸の変位には $u_z(R_1, 0, 0)$ を採用している. データにみられる分散は引力に誘起された振動によるものである. 実曲線は JKR 理論 [53, 58]

$$\frac{h_z(a)}{R_{\text{eff}}} = \left(\frac{a}{R_{\text{eff}}}\right)^2 - \sqrt{\frac{2\pi G}{Y_{\text{eff}}R_{\text{eff}}}} \left(\frac{a}{R_{\text{eff}}}\right)^{1/2} \quad (3.4)$$

$$\frac{F_z(a)}{Y_{\text{eff}}R_{\text{eff}}^2} = \frac{4}{3} \left(\frac{a}{R_{\text{eff}}}\right)^3 - 2\sqrt{\frac{2\pi G}{Y_{\text{eff}}R_{\text{eff}}}} \left(\frac{a}{R_{\text{eff}}}\right)^{3/2} \quad (3.5)$$

を表す. ここで a は接触半径 (変形によって生じる平たい円形の半径) であり, ここではこれを媒介変数にプロットしている. また G は表面張力で, 今の場合 $G = 25\pi\epsilon\sigma^4/24d^6$ である [166, 189]. データと理論は定性的にはよく一致している.

一方、データの原点付近にはヒステリシスが見られる。このヒステリシスは引力によって2物体の表面が張り付き、離れる際には余分な力が働く「吸着効果」によるものである。同様のヒステリシスは分子動力学シミュレーションにおいても確認されている [121].

3.2 はね返り係数および励起エネルギーの衝突速度依存性：散逸がない場合

次に衝突問題において一番の興味の対象である、はね返り係数の衝突速度依存性について調べる。振動励起の影響を明らかにするために、ここでは散逸がない場合に注目する。(2.10)式に示した通り、散逸がない場合においても振動励起のためはね返り係数は1とは限らない。

はね返り係数の衝突速度依存性およびサイズ効果

図 3.2(a) は、はね返り係数の衝突速度依存性を球の半径 R_1 が 10nm, 100nm, 1 μ m の場合についてプロットしたものである。ただし、球の半径 R_1 はシミュレーションの単位にしているため、実際に変更しているのは長さスケールを含むその他のパラメーターである (例えば斥力核径は $R_1 = 10\text{nm}$ では $\sigma = 0.02277R_1$, $R_1 = 100\text{nm}$ では $\sigma = 0.002277R_1$ としている)。図 3.2(a) は 1.6 節で紹介した氷の実験や準静理論のような単調減少とはまったく違う特徴的な振る舞いを示している。ここで、低速領域においてはね返り係数が急激に減少しているのは、引力によってはね返りが抑制されるためである。サイズ効果は主に引力に関係して現れる。小さな球ほど衝突エネルギー (あるいは体積) に対する表面引力の比率が大きくなるため、低速衝突におけるはね返り係数の減少が顕著となる。一方、高速領域で $R_1 = 100\text{nm}$ と $R_1 = 1\mu\text{m}$ の結果が一致しているのは、ここでは引力が重要ではないためである。

励起エネルギーの衝突速度および接触時間依存性と共鳴

散逸がない場合、はね返り係数の値は励起エネルギーで決まるので、各モードの励起エネルギーの衝突速度依存性についても調べることで、図 3.2(a) に示されたはね返り係数の特徴的な振る舞いについて理解できることが期待される。なお、ここでは半径 $R_1 = 10\text{nm}$ とし、モードは最も強く励起される基本モード ($n = 0$) に絞って解析を行う。図 3.2(b) は例として、4重極モード ($l = 2$) と8重極モード ($l = 3$) についてプロットしたものである。励起エネルギーが衝突速度に応じて振動している。

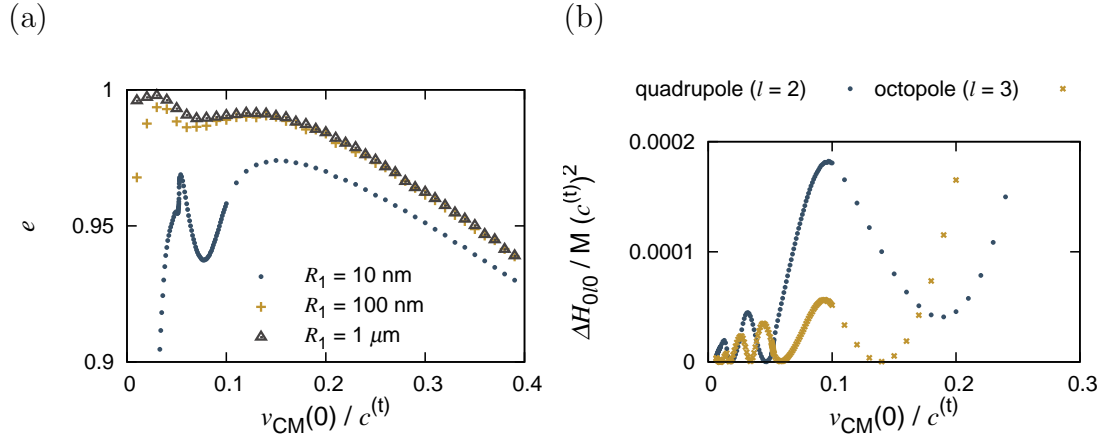


図 3.2: 散逸がない場合に対する (a) はね返り係数, (b) 励起エネルギーの衝突速度依存性. (a) では半径 10nm, 100nm, 1 μ m の場合について調べており, 小さいほど引力の影響を強く受け, 低速衝突においてはね返り係数が小さい. また, 引力が重要でない高速衝突では $R_1 = 100\text{nm}$ と $R_1 = 1\mu\text{m}$ の結果が一致している. (b) では $R_1 = 10\text{nm}$ とし, 4重極モード ($l = 2$) と 8重極モード ($l = 3$) についてプロットしている. 振動的な振る舞いから共鳴が起きていることが示唆される.

さらに, 図 3.3(a) に励起エネルギーの接触時間 τ 依存性を示す. τ の導入方法については J 節を参照されたい. 励起エネルギーが一定周期で振動していることがわかる. また, その周期は 4重極モードと 8重極モードで異なっている. 共鳴しているのであれば, これらの周期がそれぞれの固有周波数 (の逆数) となるはずである.

それを調べたのが図 3.3(b) である. 縦軸は励起エネルギーの極小値の間隔 $\Delta\tau_{0\ell 0}$ を現れるすべてについて平均した $\langle\Delta\tau_{0\ell 0}\rangle$ で, 横軸は余緯度モード数 ℓ である. 実線は $2\pi/\omega_{0\ell}$ の逆数を表し, $\ell(\geq 30)$ 以上の高次モードを除いて $\langle\Delta\tau_{0\ell 0}\rangle$ とよく一致している. 高次モードにおいてデータ値 $\langle\Delta\tau_{0\ell 0}\rangle$ が飽和しているのはデータの解像度がおよそ $0.1R_1/c^{(t)}$ 程度であること (3.3(a) 参照) が原因だと考えられる. 一方, その他のモードについては非常によく一致していることから, 衝突時に振動モードの共鳴が起こることが結論される. また, はね返り係数の特徴的な振る舞いは共鳴に起因することが明らかとなった.

3.3 はね返り係数の衝突速度依存性 : 散逸がある場合

ここでは散逸 γ を導入した場合に, 前節で示した特徴的なはね返り係数の衝突速度依存性がどのように変化するか調べる. 図 3.4(a) は $\gamma = 0.01R_1/c^{(t)}$ の場合の結果であり, 散逸がない場合ほど謙虚ではないが, まだ振動的な振る舞いを確認することができる. しかし散逸を $\gamma = 0.1R_1/c^{(t)}$ と大きくすると, 図 3.4(b) に示す通り振動構造は完全になくなる. 図 3.4(b) では半径 10nm のデータをプロット

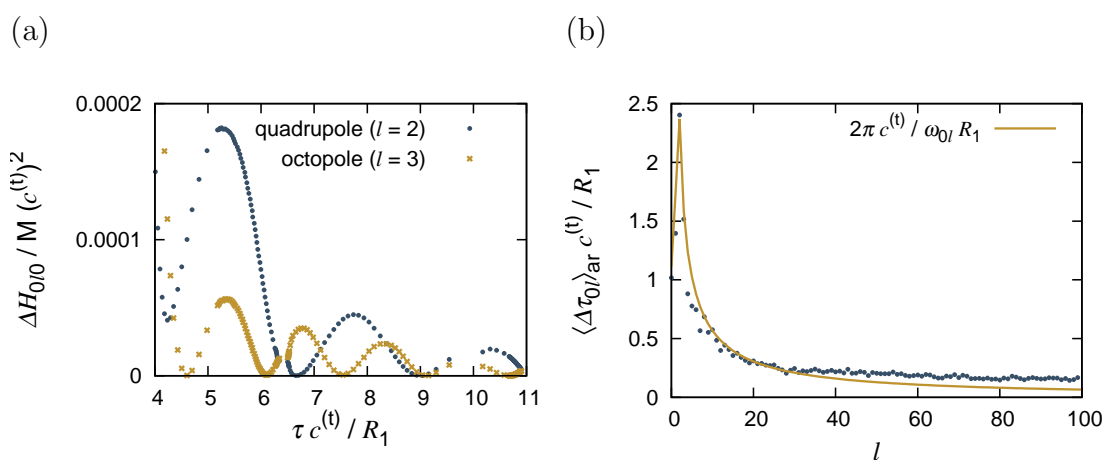


図 3.3: (a)4重極モード ($l=2$) と 8重極モード ($l=3$) の励起エネルギーの接触時間依存性. 周期的な振る舞いをしており, 4重極モードと8重極モードでその周期が異なる. 共鳴しているのであれば, これらの周期がそれぞれの固有周波数 (の逆数) となるはずである. そこで, (b) では励起エネルギーの極小値の間隔 $\Delta\tau_{0l0}$ を現れるすべてについて平均した $\langle \Delta\tau_{0l0} \rangle$ をすべてのモード l についてプロットし, 実線で表される固有周波数の逆数 $2\pi/\omega_{0l}$ と比較している. 両者は $l(\geq 30)$ 以上の高次モードを除いてよく一致しており, 共鳴が起きていることが結論される. 高次モードにおいてデータ $\langle \Delta\tau_{0l0} \rangle$ が飽和しているのは解像度が $0.1R_1/c^{(t)}$ 程度であることが原因と考えられる.

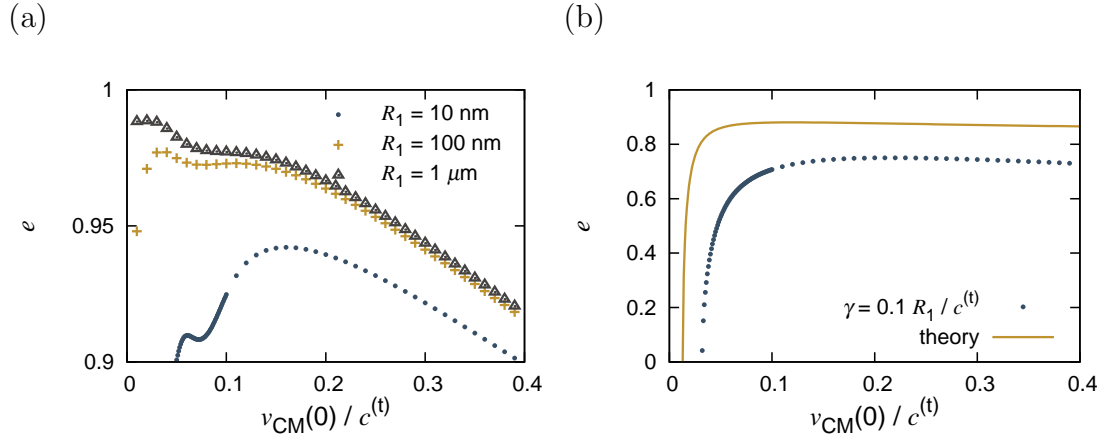


図 3.4: (a) $\gamma = 0.01R_1/c^{(t)}$ および (b) $\gamma = 0.1R_1/c^{(t)}$ における、はね返り係数の衝突速度依存性. 散逸が大きくなるにつれて振動構造が消失する. (b) では半径 10nm の場合に、準静理論 (実線) と比較している. 両者は定性的にはよく一致している.

している. ここで、実線は準静理論 [59] による結果を示している. この準静理論は斥力と引力を扱う JKR 理論 (3.5) に散逸力

$$F_{\text{diss}}(a, \dot{a}) = \gamma \dot{a} \frac{\partial}{\partial a} F(a, \dot{a}), \quad (3.6)$$

に追加したものである. ここで、散逸力 $F_{\text{diss}}(a, \dot{a})$ の係数が γ であることに注意されたい (文献 [59] と本モデルの関係は付録 H 参照).

実線はこれらの力を基にルンゲクッタ法により運動方程式を数値的に解いてプロットしたものである. データと理論は定性的にはよく一致している. 全領域で準静理論のはね返り係数の方が大きいのは、準静理論では振動励起が無視されているためだと考えられる. また、 $\gamma = 0.1R_1/c^{(t)}$ での緩和時間は接触時間とくらべて短く (付録 C 参照), ランダム力が影響しうる領域であるため、それを無視していることも関係していると考えられる.

第4章 衝突シミュレーションにおける初期温度の影響

この章では初期温度 $T = 2.14 \times 10^{-8} M(c^{(t)})^2/k_B$ (300K 相当) を導入したシミュレーションを行い、その影響について調べる。ここでは熱ゆらぎが顕著となる微小球 ($R_1 = 10$ nm) に着目し、また基本的には散逸がない場合を解析する。まず 4.1 節で低減引力化において超弾性衝突が発生すること、および発生確率や散逸依存性を明らかにする。次に 4.2 節で超弾性衝突と振動モードの初期位相の関係を調べ、そのメカニズムにせまる。4.3 節では衝突板ゆらぎの定理 [177] を数値的に確認する。最後に 4.4 節で衝突による加熱について調べる。

4.1 超弾性衝突の性質

ここではまず超弾性衝突を確認し、衝突の相図を明らかにする。また、超弾性衝突と散逸の関係について調べる。

超弾性衝突の確認

初期温度を導入すると、はね返り係数にゆらぎが生じる。図 4.1 ははね返り係数と衝突速度の関係を示している。各速度につき 1000 回試行し、結果をすべてプロットしている。(a) の通常の引力 $g = 1$ の場合には、非弾性衝突 $e < 1$ しかみられない。一方、(b) の低減引力 $g = 0.2$ の場合には、超弾性衝突 $e > 1$ が発生する。

衝突の相図

$g = 0.2$ の場合に、どのような衝突がどのぐらいの頻度で発生するか詳しくみていく。図 4.2 は各速度ごと 1000 回試行し、(1) 吸着、(2) 非弾性衝突、(3) 超弾性衝突が起こる確率をプロットしたものである（領域の幅が発生確率の大きさを表す）。 $v_{CM}(0) = 0.013c^{(t)}$ より低速になるにしたがって、超弾性衝突の領域 (3) が成長しはじめるものの、 $v_{CM}(0) = 0.009c^{(t)}$ より一旦縮小し、 $v_{CM}(0) = 0.007c^{(t)}$ から再び成長しはじめる。このような振る舞いは 3.2 節でみたはね返り係数の振動構造

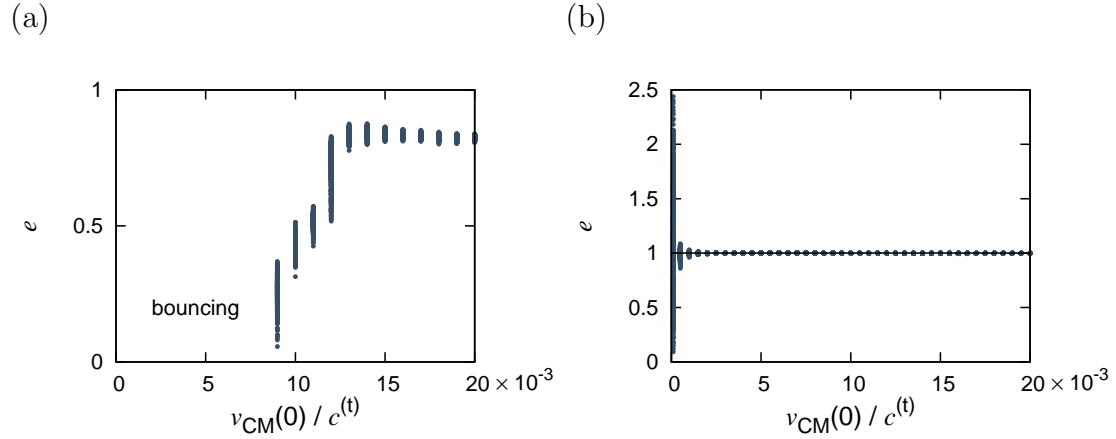


図 4.1: 温度 $T = 2.14 \times 10^{-8} M(c^{(t)})^2/k_B$ (300K 相当) におけるはね返り係数と衝突速度の関係. 各速度につき 1000 回試行し, 結果をすべてプロットしている. (a) は通常の引力 $g = 1$ の場合で, (b) は低減引力 $g = 0.2$ の場合である. 低減引力化では超弾性衝突が発生する.

を反映したものであると考えられる. さらに低速になると吸着領域 (1) が成長しはじめ, 超弾性衝突領域 (3) の成長は抑制される.

超弾性衝突と散逸の関係

ここで, 散逸があると超弾性衝突がどうなるかみておく. 図 4.3 は衝突速度を $v_{CM}(0) = 0.009c^{(t)}$ に固定し, はね返り係数の散逸依存性を調べたものである. 散逸が大きくなるにしたがって超弾性衝突イベントは減少し, $\gamma > 6 \times 10^{-4} R_1/c^{(t)}$ で消失する.

4.2 超弾性衝突と振動モードの初期位相の関係

この節では超弾性衝突のメカニズムを明らかにするべく, はね返り係数と振動モードの関係性に着目する. 具体的には超弾性衝突と振動モードの初期位相の関係を調べる. 初期位相とは振動モードの初期値 $Q_{nlm}(0)$ と $\dot{Q}_{nlm}(0)$ を

$$Q_{nlm}(0) = \frac{1}{\omega_{nl}} \sqrt{\frac{2H_{nlm}(0)}{M}} \sin \alpha_{nlm}(0), \quad (4.1)$$

$$\dot{Q}_{nlm}(0) = \sqrt{\frac{2H_{nlm}(0)}{M}} \cos \alpha_{nlm}(0). \quad (4.2)$$

のように振幅と位相に書き直したときの $\alpha_{nlm}(0)$ のことである. 図 4.4(a) は超弾性衝突の発生確率が極小となる衝突速度 $v_{CM}(0) = 0.007c^{(t)}$ (図 4.2 参照) における

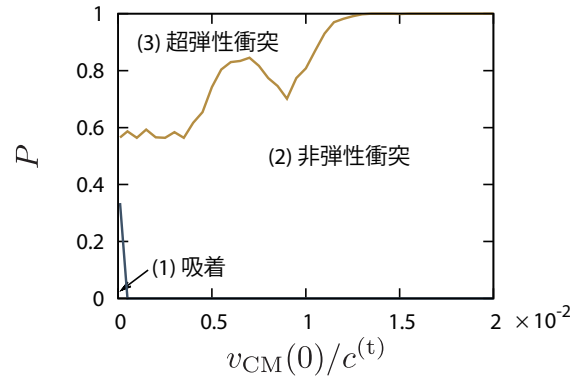


図 4.2: 低減引力 $g = 0.2$ における衝突の相図. 各速度ごとに 1000 回試行し, (1) 吸着, (2) 非弾性衝突, (3) 超弾性衝突が起こる確率をそれぞれ求めて領域で示している (領域の幅が発生確率に対応する).

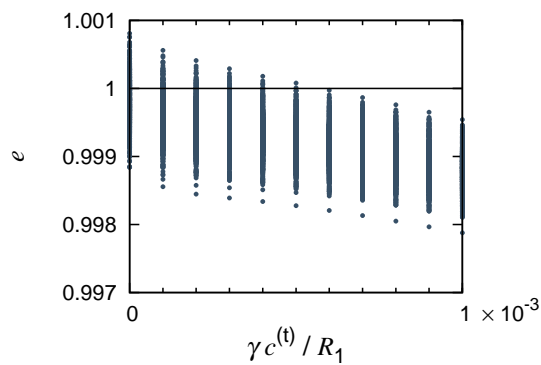


図 4.3: 衝突速度 $v_{CM}(0) = 0.009c^{(t)}$ における, はね返り係数の散逸依存性. 散逸が大きくなるにしたがって超弾性衝突イベントは減少し, $\gamma > 6 \times 10^{-4} R_1 / c^{(t)}$ で消失する.

はね返り係数と4重極モード($l=2$)の初期位相の関係を示したものである。三角関数的な相関がはっきりとみられる。これは超弾性衝突は4重極モードの初期位相、あるいは衝突時の位相がある値のときに発生しやすいことを表しており、超弾性衝突のメカニズムに深く関わる結果である。一方、横軸を16重極モード($l=4$)の初期位相にとった(b)では相関はみられない。このときの励起エネルギーを調べると、4重極モードが他のモードと比べて非常に強く励起されているのがわかり(図4.4(c)参照)、励起エネルギーと相関の強さが関係していることが示唆される。そこで、別の衝突速度 $v_{\text{CM}}(0) = 0.007c^{(t)}$ (超弾性衝突の発生確率が極大となる速度)において、同様の相関をプロットすると、今度は16重極モードにおいても相関が現れる(図4.4(a')および(b')参照)。このとき16重極の励起が最も強く(図4.4(c')参照)、やはり励起エネルギーと相関の強さの関連性が示唆される。5.1節で摂動論を構築し、ここで得られた三角関数依存性と、その振幅と励起エネルギーの関係、および超弾性衝突が発生する位相の意味を明らかにする。

4.3 衝突版ゆらぎの定理の検証

ゆらぎの定理は正のエントロピー生成確率と負のエントロピー生成確率の比が指数関数則により表されることを示したものである [169,190]。田崎は衝突問題に対するゆらぎの定理

$$\frac{P(X_0 \rightarrow X_1)}{P(\bar{X}_1 \rightarrow \bar{X}_0)} = e^{-W(X_0 \rightarrow X_1)/k_B T} \quad (4.3)$$

を導出した(文献 [177] および付録 E.2 参照)。ここで $X_0 \equiv (z_{\text{CM}}(0), v_{\text{CM}}(0))$ と $X_1 \equiv (z_{\text{CM}}(t_f), v_{\text{CM}}(t_f))$ はそれぞれ初期および終状態におけるマクロ変数(重心座標と速度)であり、一方 $\bar{X}_0 = (z_{\text{CM}}(0), -v_{\text{CM}}(0))$ と $\bar{X}_1 = (z_{\text{CM}}(t_f), -v_{\text{CM}}(t_f))$ はそれぞれ X_0 と X_1 の時間反転を表す。また、 $P(X_0 \rightarrow X_1)$ は X_0 から X_1 への遷移確率、 $P(\bar{X}_1 \rightarrow \bar{X}_0)$ は \bar{X}_1 から \bar{X}_0 への遷移確率を表す。 $W(X_0 \rightarrow X_1) \equiv M[\{v_{\text{CM}}(t_f)\}^2 - \{v_{\text{CM}}(0)\}^2]/2$ は X_0 から X_1 へ遷移するときのマクロなエネルギー変化である。もし $W(X_0 \rightarrow X_1) > 0$ ならば、 $P(X_0 \rightarrow X_1)$ は超弾性衝突の発生確率であり、その大きさは対応する非弾性衝突の発生確率 $P(\bar{X}_1 \rightarrow \bar{X}_0)$ と比べて指数関数的に小さいことを意味している。

國仲・早川は分子動力学シミュレーションにより、衝突版ゆらぎの定理(4.3)を数値的に検証したものの、両者は整合しなかった [181]。衝突版ゆらぎの定理(4.3)では、衝突していないとき重心運動と相対運動は非結合であることを仮定しているが、分子動力学法では衝突していなくても重心運動と相対運動は結合しており、この違いが不整合性の原因であると考えられる。一方、本モデルは衝突版ゆらぎの定理(4.3)と同じセットアップであるため、整合することが期待される。そこで、衝突版ゆらぎの定理(4.3)を本モデルにおいて数値的に検証する。それには $P(X_0 \rightarrow X_1)$ を数値的に求めればよいが、 X_0 からある一点 X_1 へ遷移する確率を

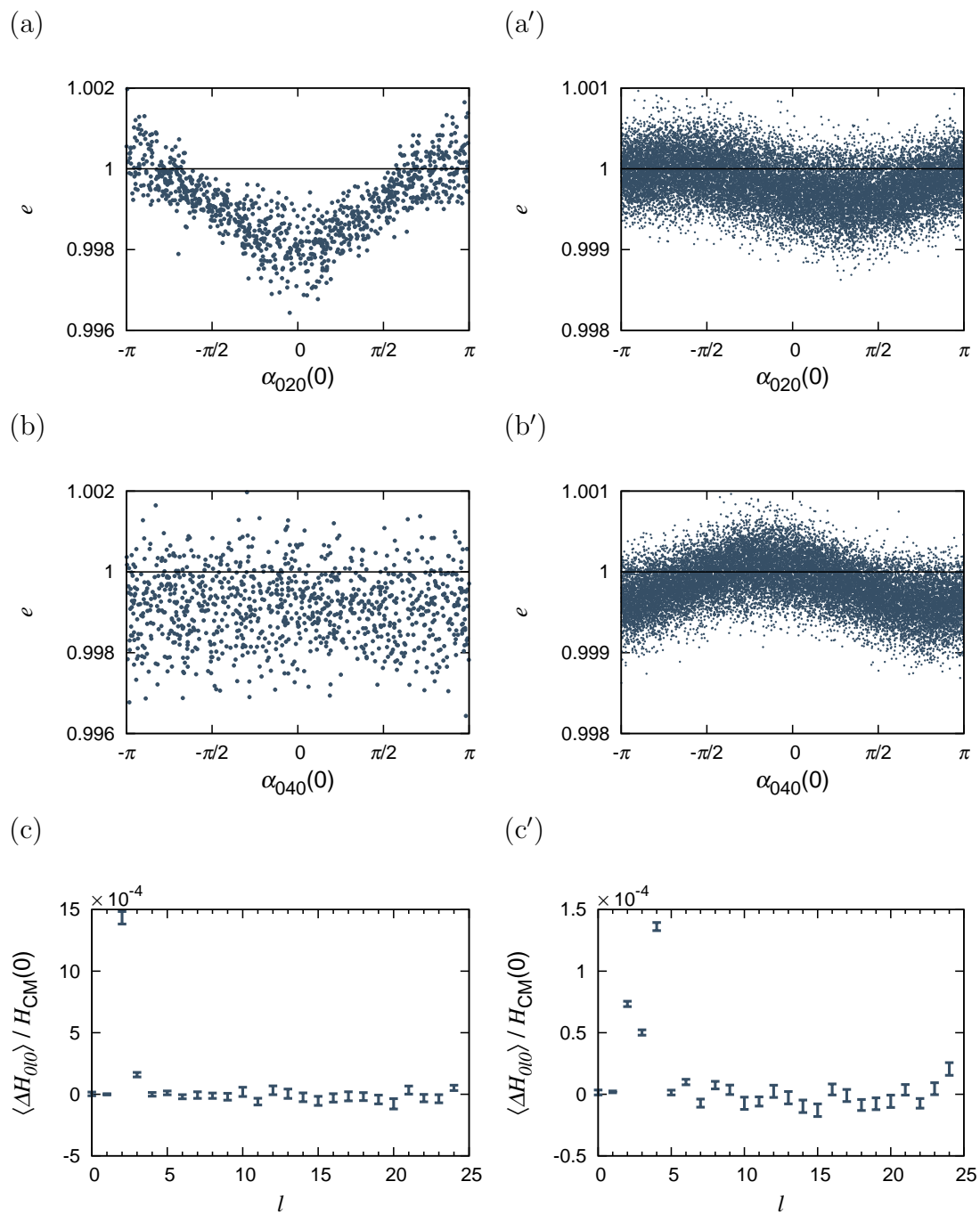


図 4.4: はね返り係数と (a), (a')4 重極モード ($l = 2$) および (b), (b')16 重極モード ($l = 4$) の初期位相の関係. (c) と (c') は $n = m = 0$ の各モードの励起エネルギーをプロットしている. (a), (b) および (c) は衝突速度 $v_{CM}(0) = 0.007c^{(t)}$ の場合でサンプル数は 1000, 一方 (a'), (b'), (c') は衝突速度 $v_{CM}(0) = 0.009c^{(t)}$ の場合でサンプル数は 20000 である. (c) および (c') におけるエラーバーは標準偏差を表す.

数値的に得るのは（無限の試行回数を要するので）不可能である．そこで，一定の幅 $\Delta v = 10^{-4}v_{\text{CM}}(0)$ を導入し，衝突後の速度が $v_{\text{CM}}(t_f) - \Delta v/2$ と $v_{\text{CM}}(t_f) + \Delta v/2$ の間にあるものを $v_{\text{CM}}(t_f)$ とみなすことで $P(X_0 \rightarrow X_1)dX_1$ を求める（図 4.5(a) 参照）．なお，重心位置は実質的に固定可能であり，幅を導入する必要はない． $P(\bar{X}_1 \rightarrow \bar{X}_0)$ も同様に求める．

衝突速度は $v_{\text{CM}}(0) = 0.009c^{(t)}$ とし，試行回数は $N_{\text{tot}} = 20000$ である．衝突後の速度が $v_{\text{CM}}(t_f) - \Delta v/2$ と $v_{\text{CM}}(t_f) + \Delta v/2$ の間に入るイベント数が N_{eve} のとき， $P \equiv P(X_0 \rightarrow X_1)$ は

$$P = \frac{N_{\text{eve}}}{N_{\text{tot}}} \quad (4.4)$$

であり，その誤差は

$$\sigma_{\text{err}}^{(P)} = \frac{\sqrt{N_{\text{eve}}}}{N_{\text{tot}}} \quad (4.5)$$

で与えられると仮定する． $\bar{P} \equiv P(\bar{X}_1 \rightarrow \bar{X}_0)$ に対する誤差 $\sigma_{\text{err}}^{(\bar{P})}$ についても同様である（試行回数を \bar{N}_{tot} ，イベント数を \bar{N}_{eve} と書く）．このとき比 P/\bar{P} の誤差 $\sigma_{\text{err}}^{(P/\bar{P})}$ は誤差の伝播により

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{err}}^{(P/\bar{P})} &= \frac{P}{\bar{P}} \sqrt{\left(\frac{\sigma_{\text{err}}^{(P)}}{P}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_{\text{err}}^{(\bar{P})}}{\bar{P}}\right)^2} \\ &= \frac{P}{\bar{P}} \sqrt{\frac{1}{N_{\text{eve}}} + \frac{1}{\bar{N}_{\text{eve}}}} \end{aligned} \quad (4.6)$$

となる．図 4.5(b) は比 P/\bar{P} をマクロなエネルギー変化 $W(X_0 \rightarrow X_1)$ に対してプロットしたものであり，エラーバーは $\sigma_{\text{err}}^{(P/\bar{P})}$ を表す．実線は衝突版ゆらぎの定理 (4.3) を表し，データとよく一致している．これにより衝突版ゆらぎの定理 (4.3) がはじめて数値的に実証された．なお，試行回数は \bar{N}_{tot} はイベント数 \bar{N}_{eve} が 100 以上となるように $v_{\text{CM}}(t_f)$ によって変えている (N_{eve} もまた全領域で 100 以上ある)．

4.4 衝突による加熱

本モデルの基礎方程式 (2.5) では等温条件を仮定している．しかし，衝突は断熱圧縮過程をみなすことができ，温度変化分布 $\Delta T(t; \mathbf{x})$ が

$$\Delta T(t; \mathbf{x}) = -T \frac{3K_{\text{ad}}\alpha}{c_P} \nabla \cdot \mathbf{u}(t; \mathbf{x}) \quad (4.7)$$

で与えられる（文献 [191, 192] および付録 F 参照）．ここで α は線形膨張率， c_P は等圧比熱である．また， K_{ad} は断熱弾性率で体積弾性率 K との関係は

$$\frac{1}{K_{\text{ad}}} = \frac{1}{K} - \frac{9T\alpha^2}{c_P} \quad (4.8)$$

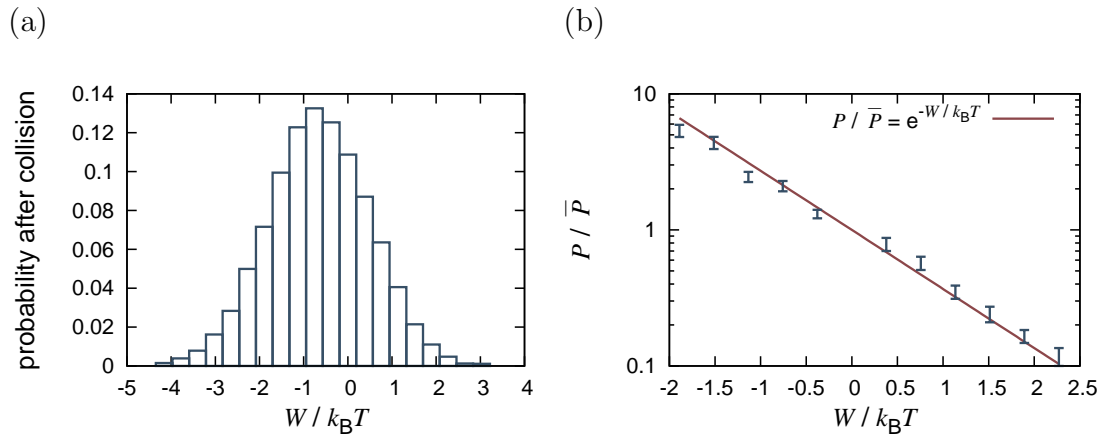


図 4.5: $v_{\text{CM}}(0) = 0.009c^{(t)}$ における, マクロなエネルギー変化 W に対する (a) 確率分布および (b) 比 P/\bar{P} . (b) の実線は衝突版ゆらぎの定理 (4.3) を表しており, データとよく一致しているのがわかる.

で与えられる. ここでは等温条件の妥当性について検証するために, 高速衝突 $v_{\text{CM}} = 0.1$ における最大圧縮時の温度変化分布 $\Delta T(t_f/2; \mathbf{x})$ を調べる. 図 4.6 はその断面図で, 黒線で球面, カラーバーで温度変化率 $\Delta T/T$ を示している. ここで, 銅の文献値 $\alpha = 16.5 \times 10^{-6}/\text{K}$, $c_P = 24.5 \text{ J/mol K}$ を用いている. このように初期温度を 300K とした時に全領域において温度変化率は $\Delta T/T < 0.0003$ と非常に小さい. それゆえ, 等温条件は妥当であると考えられる.

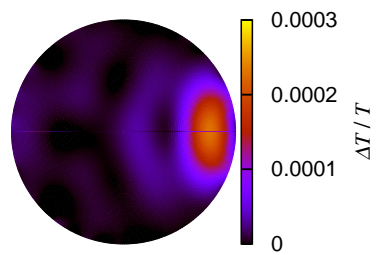


図 4.6: 高速衝突 $v_{\text{CM}} = 0.1$ における最大圧縮時の温度変化分布 $\Delta T(t_f/2; \mathbf{x})$ の断面図. 黒線は球面を表す. カラーバーが温度変化率 $\Delta T/T$ を表している.

第5章 考察

ここで、結果の考察を行う。まず、5.1節で摂動論を展開し、4.2節の結果について考察する。5.2では振動モード間遷移について調べる。

5.1 摂動論

この節では摂動論を構築し、図4.4にあるようなはね返り係数の初期位相依存性について考察する。なお、以下の議論では簡単のため散逸はないものとするが、散逸がある場合への拡張は容易である。

運動方程式の展開

はじめに、重心運動 $z_{\text{CM}}(t)$ の時間スケールが $t_{\text{CM}} \equiv R_{\text{eff}}/v_{\text{CM}}(0)$ 、振動モード $Q_{nlm}(t)$ の時間スケールが $t_{\text{vib}} \equiv R_{\text{eff}}/c^{(t)}$ であると仮定する。さらに換算半径 R_{eff} 、換算質量 M_{eff} および衝突速度 $v_{\text{CM}}(0)$ を用いて運動方程式 (2.4), (2.7) を無次元化すると

$$\frac{d^2 \tilde{z}_{\text{CM}}}{d\tilde{t}_{\text{CM}}^2} + \frac{\partial \tilde{V}(\tilde{z}_{\text{CM}}, \{\tilde{Q}_{i',n'\ell'm'}\})}{\partial \tilde{z}_{\text{CM}}} = 0 \quad (5.1)$$

$$\frac{d^2 \tilde{Q}_{i,nlm}}{d\tilde{t}_{\text{vib}}^2} + \tilde{\omega}_{i,nl}^2 \tilde{Q}_{i,nlm} = -\varepsilon \frac{1}{\tilde{M}_i} \frac{\partial \tilde{V}(\tilde{z}_{\text{CM}}, \{\tilde{Q}_{i',n'\ell'm'}\})}{\partial \tilde{Q}_{i,nlm}} \quad (5.2)$$

となる。ここで $\tilde{z}_{\text{CM}} \equiv z_{\text{CM}}/R_{\text{eff}}$ 、 $\tilde{Q}_{i,nlm} \equiv Q_{nlm}/R_{\text{eff}}$ 、 $\tilde{t}_{\text{CM}} \equiv t/t_{\text{CM}}$ 、 $\tilde{t}_{\text{vib}} \equiv t/t_{\text{vib}}$ 、 $\tilde{\omega}_{i,nl} \equiv \omega_{nl} t_{\text{vib}}$ 、 $\tilde{M}_i \equiv \frac{M_i}{M_{\text{eff}}}$ 、 $\tilde{V}[\tilde{z}_{\text{CM}}, \{\tilde{Q}_{i,nlm}\}] \equiv V[z_{\text{CM}}(t), \{Q_{nlm}(t)\}]/M_{\text{eff}} v_{\text{CM}}(0)^2$ は無次元化した変数である。また、 $\varepsilon \equiv (v_{\text{CM}}(0)/c^{(t)})^2$ であり、これにより \tilde{z}_{CM} および $\tilde{Q}_{i,nlm}$ を

$$\tilde{Q}_{i,nlm} = \tilde{Q}_{i,nlm}^{(0)} + \varepsilon \tilde{Q}_{i,nlm}^{(1)} + \varepsilon^2 \tilde{Q}_{i,nlm}^{(2)} + \dots \quad (5.3)$$

$$\tilde{z}_{\text{CM}} = \tilde{z}_{\text{CM}}^{(0)} + \varepsilon \tilde{z}_{\text{CM}}^{(1)} + \varepsilon^2 \tilde{z}_{\text{CM}}^{(2)} + \dots \quad (5.4)$$

と展開する。ここで $\tilde{z}_{\text{CM}}^{(j)}$ および $\tilde{Q}_{i,nlm}^{(j)}$ は j 次の展開係数である。これらの係数の初期値は0次を除き0とする。すなわち $\tilde{z}_{\text{CM}}(0) = \tilde{z}_{\text{CM}}^{(0)}(0)$ および $\tilde{Q}_{i,nlm}(0) = \tilde{Q}_{i,nlm}^{(0)}(0)$

である。このとき0次の運動方程式は

$$\frac{d^2 \tilde{z}_{\text{CM}}^{(0)}}{d\tilde{t}_{\text{CM}}^2} + \frac{\partial \tilde{V}(\tilde{z}_{\text{CM}}^{(0)}, 0)}{\partial \tilde{z}_{\text{CM}}} = 0 \quad (5.5)$$

$$\frac{d^2 \tilde{Q}_{i,nlm}^{(0)}}{d\tilde{t}_{\text{vib}}^2} + \tilde{\omega}_{i,nl}^2 \tilde{Q}_{i,nlm}^{(0)} = 0 \quad (5.6)$$

である。これより $\{\tilde{Q}_{i,nlm}^{(0)}\}$ はそれぞれ初期励起によって独立に単振動するが、線形弾性論の範囲ではその振幅は十分に小さい。したがってここではポテンシャル V の中の $\{\tilde{Q}_{i,nlm}^{(0)}\}$ は無視できるとする。(5.5)式の解は

$$\tilde{t}_{\text{CM}} = \begin{cases} \int_{\tilde{z}_{\text{CM}}^{(0)}(0)}^{\tilde{z}_{\text{CM}}^{(0)}} \frac{dx}{\sqrt{1-\tilde{V}(x,0)}} & (\tilde{t}_{\text{CM}} \leq \tilde{t}_{\text{CM}}^{\text{col}}) \\ \int_{\tilde{z}_{\text{CM}}^{(0)}(0)}^{\tilde{z}_{\text{CM}}^{\text{col}}} \frac{dx}{\sqrt{1-\tilde{V}(x,0)}} - \int_{\tilde{z}_{\text{CM}}^{\text{col}}}^{\tilde{z}_{\text{CM}}^{(0)}} \frac{dx}{\sqrt{1-\tilde{V}(x,0)}} & (\tilde{t}_{\text{CM}} > \tilde{t}_{\text{CM}}^{\text{col}}) \end{cases} \quad (5.7)$$

となる。ここで $\tilde{z}_{\text{CM}}^{\text{col}} \equiv \tilde{z}_{\text{CM}}^{(0)}(\tilde{t}_{\text{CM}}^{\text{col}})$ は $1 - \tilde{V}(\tilde{z}_{\text{CM}}^{\text{col}}, 0) = 0$ により与えられる。振動モードの1次の運動方程式は

$$\frac{d^2 \tilde{Q}_{i,nlm}^{(1)}}{d\tilde{t}_{\text{vib}}^2} + \tilde{\omega}_{i,nl}^2 \tilde{Q}_{i,nlm}^{(1)} = -\frac{1}{\tilde{M}_i} \frac{\partial \tilde{V}(\tilde{z}_{\text{CM}}^{(0)}, 0)}{\partial \tilde{Q}_{i,nlm}}, \quad (5.8)$$

であり、解は

$$\tilde{Q}_{i,nlm}^{(1)}(\tilde{t}_{\text{vib}}) = -\frac{1}{\tilde{M}_i \tilde{\omega}_{i,nl}} \int_0^{\tilde{t}_{\text{vib}}} dt' \frac{\partial \tilde{V}(\tilde{z}_{\text{CM}}^{(0)}(t'), 0)}{\partial \tilde{Q}_{i,nlm}} \sin \tilde{\omega}_{i,nl}(\tilde{t}_{\text{vib}} - t') \quad (5.9)$$

となる。

可解条件について

ここで可解条件について述べる。摂動の1次の方程式(5.8)に対し

$$\int_0^{\tilde{t}_f} d\tilde{t} \psi(\tilde{t}) \left(\frac{d^2}{d\tilde{t}^2} + \tilde{\omega}_{i,nl}^2 \right) \tilde{Q}_{i,nlm}^{(1)}(\tilde{t}) = 0 \quad (5.10)$$

を満たす0モード $\psi(\tilde{t})$ が存在するとする。ここで $\tilde{t}_f \equiv t_f c^{(t)} R_1$ は衝突後の時刻を無次元化したものである。このとき方程式(5.8)より

$$\int_0^{\tilde{t}_f} d\tilde{t} \psi(\tilde{t}) \frac{\partial \tilde{V}(\tilde{z}_{\text{CM}}^{(0)}(\tilde{t}), 0)}{\partial \tilde{Q}_{i,nlm}} = 0 \quad (5.11)$$

が得られる。これが可解条件である。

次に0モード $\psi(\tilde{t})$ を求める. 等式 (5.10) の左辺を部分積分することにより

$$\psi(\tilde{t}_f)\dot{\tilde{Q}}_{i,nlm}^{(1)}(\tilde{t}_f) - \dot{\psi}(\tilde{t}_f)\tilde{Q}_{i,nlm}^{(1)}(\tilde{t}_f) + \int_0^{\tilde{t}_f} d\tilde{t}\tilde{Q}_{i,nlm}^{(1)}(\tilde{t}) \left(\frac{d^2}{d\tilde{t}^2} + \tilde{\omega}_{i,nl}^2 \right) \psi(\tilde{t}) = 0 \quad (5.12)$$

が得られる. ここで, $\tilde{Q}_{i,nlm}^{(1)}(0) = \dot{\tilde{Q}}_{i,nlm}^{(1)}(0) = 0$ であることを用いた. したがって $\psi(\tilde{t})$ は

$$\left(\frac{d^2}{d\tilde{t}^2} + \tilde{\omega}_{i,nl}^2 \right) \psi(\tilde{t}) = 0 \quad (5.13)$$

$$\psi(\tilde{t}_f) = \dot{\psi}(\tilde{t}_f) = 0 \quad (5.14)$$

を満たさねばならないが, これを満たすのは自明解 $\psi(\tilde{t}) \equiv 0$ だけである. このように, この問題ではゼロモードは自動的に取り除かれ, 可解条件を気にせず形式的な摂動論を進めても構わない事になる.

励起エネルギーおよびはね返り係数の導出

1次解 (5.9) より励起エネルギーの1次 $\Delta\tilde{H}_{i,nlm}^{(1)} = \dot{\tilde{Q}}_{i,nlm}^{(0)}\dot{\tilde{Q}}_{i,nlm}^{(1)} + \tilde{\omega}_{i,nl}^2\tilde{Q}_{i,nlm}^{(0)}\tilde{Q}_{i,nlm}^{(1)}$, および2次 $\Delta\tilde{H}_{i,nlm}^{(2)} = (\dot{\tilde{Q}}_{i,nlm}^{(1)})^2/2 + (\tilde{\omega}_{i,nl}\tilde{Q}_{i,nlm}^{(1)})^2/2$ はそれぞれ

$$\Delta\tilde{H}_{i,nlm}^{(1)}(\tilde{t}_{\text{vib}}) = -2\sqrt{\tilde{H}_{i,nlm}^{(0)}(0)\Delta\tilde{H}_{i,nlm}^{(2)}(\tilde{t}_{\text{vib}})} \cos(\alpha_{i,nlm}(0) + \tilde{\omega}_{i,nl}\tilde{t}_{\text{vib}} - \beta_{i,nlm}(\tilde{t}_{\text{vib}})) \quad (5.15)$$

$$\Delta\tilde{H}_{i,nlm}^{(2)}(\tilde{t}_{\text{vib}}) = \frac{1}{2} \left| \frac{1}{\tilde{M}_i} \int_0^{\tilde{t}_{\text{vib}}} dt' \frac{\partial \tilde{V}(\tilde{z}_{\text{CM}}^{(0)}(t'), 0)}{\partial \tilde{Q}_{i,nlm}} e^{i\tilde{\omega}_{i,nl}t'} \right|^2 \quad (5.16)$$

となる. ここで $\beta_{i,nlm}(\tilde{t}_{\text{vib}})$ は

$$\sin \beta_{i,nlm}(\tilde{t}_{\text{vib}}) = -\frac{\tilde{\omega}_{i,nl}\tilde{Q}_{i,nlm}^{(1)}(\tilde{t}_{\text{vib}})}{\sqrt{2\Delta\tilde{H}_{i,nlm}^{(2)}(\tilde{t}_{\text{vib}})}}, \quad \cos \beta_{i,nlm}(\tilde{t}_{\text{vib}}) = -\frac{\dot{\tilde{Q}}_{i,nlm}^{(1)}(\tilde{t}_{\text{vib}})}{\sqrt{2\Delta\tilde{H}_{i,nlm}^{(2)}(\tilde{t}_{\text{vib}})}} \quad (5.17)$$

により導入したものであり, 力 $\partial\tilde{V}(\tilde{z}_{\text{CM}}^{(0)}(t), 0)/\partial\tilde{Q}_{i,nlm}$ が最大となる時刻 $t_f/2$ を中心に偶関数であることから $\beta_{i,nlm}(\tilde{t}_{\text{vib}}) = \tilde{\omega}_{i,nl}t_f/2$ となることがわかる (付録I参照). 等式 (2.10) および (5.15) より, はね返り係数は

$$e^2 = 1 + 4 \sum_{i,nlm} \sqrt{\tilde{H}_{i,nlm}^{(0)}(0)\Delta\tilde{H}_{i,nlm}^{(2)}(t_f)} \cos \left(\alpha_{i,nlm}(0) + \frac{\tilde{\omega}_{i,nl}t_f}{2} \right) + O(\varepsilon) \quad (5.18)$$

$$= 1 + 2\sqrt{2} \sum_{i,nlm} \sqrt{\Delta\tilde{H}_{i,nlm}^{(2)}(t_f)} \dot{\tilde{Q}}_{i,nlm}^{(0)}(t_f/2) + O(\varepsilon), \quad (5.19)$$

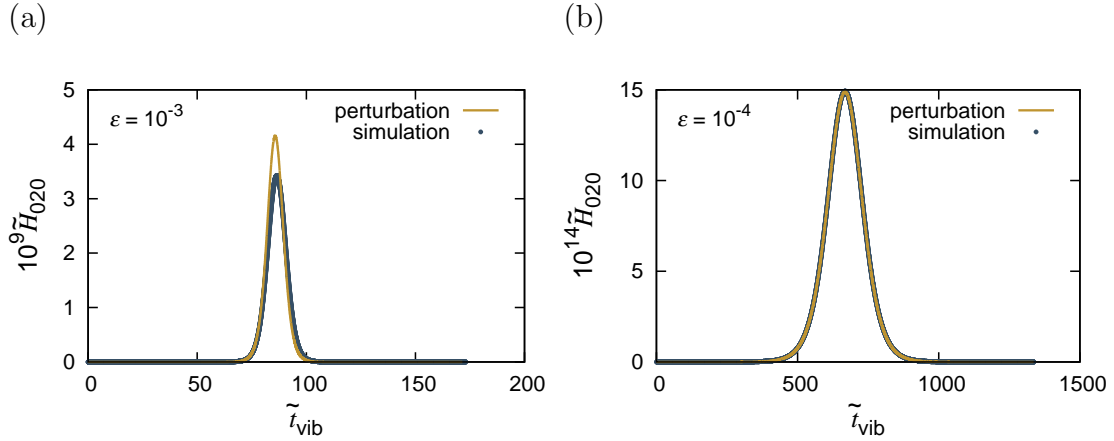


図 5.1: 4 重極モードのエネルギーの時間発展. 温度, 散逸, 引力はなしで, 衝突速度は (a) $v_{\text{CM}}(0) = 10^{-3}c^{(t)}$, および (b) $v_{\text{CM}}(0) = 10^{-4}c^{(t)}$ である.

となる. 一行目の等式は 4.2 節で示唆された, はね返り係数の初期位相に対する三角関数依存性, およびその振幅と励起エネルギーの関係を裏付けている. また, 二行目の等式のように振動モードの最大圧縮時 $t_f/2$ の速度を使って書き直すことが可能で, これよりはね返り係数が最大となる, したがって超弾性衝突が最も発生しやすいのは最大圧縮時に膨らむ位相のときであることがわかる.

シミュレーションとの比較

最後に, 摂動論とシミュレーションの結果を比較し, 摂動論の収束性を確認する. 図 5.1 は 4 重極モードのエネルギーの時間発展をプロットしたものである. 温度, 散逸, 引力はなしで, 衝突速度は (a) $v_{\text{CM}}(0) = 10^{-3}c^{(t)}$, および (b) $v_{\text{CM}}(0) = 10^{-4}c^{(t)}$ である. (a) では少しずれがあるが, (b) では完全に一致していることがわかる. なお, フィッティング等は一切行っていない. このように斥力系の低速衝突は完全に再現できる一方, 低速衝突で吸着してしまう引力系については摂動論で再現できない.

5.2 モード間遷移

ここまでは重心運動と振動モード間のやりとりに着目してきた. この節では振動モード間の遷移について調べる. ここでは半径 10nm, 温度, 散逸は 0 とする.

振動モード間の遷移を調べるには初期状態として 1 つのモード (n, ℓ, m) を励起した状態を用意し, 衝突後に (n', ℓ', m') モードの励起エネルギー $\Delta H_{n\ell m, n'\ell' m'}$ を調べればよい. ただし, これまでみてきたように初期の励起がなくても有限の励起エネルギー $\Delta H_{n'\ell' m'}$ (重心から振動モードへの遷移) が発生する. したがって, こ

れを取り除いた

$$\Delta H_{nlm \rightarrow n'\ell'm'} \equiv \Delta H_{nlm, n'\ell'm'} - \Delta H_{n'\ell'm'}, \quad (5.20)$$

によって振動モード間の遷移を定義する.

振動励起された球の衝突は初期位相依存性を示す. 5.2(a) は衝突速度 $v_{\text{CM}}(0) = 0.1c^{(t)}$, 4重極モードの初期エネルギー $H_{020}(0) = 0.05H_{\text{CM}}(0)$ における, はね返り係数の初期位相依存性を示したものである. 4.2節や5.1節でみたような三角関数依存性が現れている. また, $\alpha_{020}(0)$ が小さい領域において, 超弾性衝突 $e > 1$ がみられる. このような初期位相依存性を取り除くために, 初期位相を平均した

$$\langle \Delta H_{nlm \rightarrow n'\ell'm'} \rangle_{\alpha_{nlm}} \equiv \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\alpha_{nlm} \Delta H_{nlm \rightarrow n'\ell'm'}. \quad (5.21)$$

を, ここでは調べる.

図5.2(b)に $v_{\text{CM}}(0) = 0.1c^{(t)}$, $H_{0\ell 0}(0) = 0.05H_{\text{CM}}(0)$ における $\langle \Delta H_{0\ell 0 \rightarrow 0\ell' 0} \rangle / H_{\text{CM}}(0)$ を示す. 横軸は遷移先のモード ℓ' を表し, 初期に $\ell = 0, 2, 3, 4, 5$ を励起した場合の結果をプロットしている. まず $\ell' = 1$ をみると, 双極子モードへの遷移は起こらないことがわかる. これは変形振動である他のモードと違い, 双極子モードは単なる並進振動であるためだと考えられる. $\ell' \neq 1$ では自身への遷移が負になっていることがわかる. これは他のモードへ遷移していることを表す. 遷移先をみると, 最隣接モードへの遷移が大きい傾向にある. 一方, 呼吸振動モード $\ell = 0$ は16重極モード $\ell = 4$ や32重極モード $\ell = 5$ と結合している. これは呼吸振動モードの固有周波数がこれら2つのモードと同程度であるためだと考えられる. 同様の結果は低速衝突 $v_{\text{CM}}(0) = 0.01c^{(t)}$ においてもみられる.

5.3 今後の展望

この節では本研究の今後の展望について要約する. 本研究では線形弾性体の正面衝突に焦点を当てている. したがってこの後の発展としては, 一般の衝突 (ななめ衝突) への拡張と, 塑性変形の導入の大きく二つの方向性が考えられる.

ななめ衝突では接線運動と法線運動の結合により, さらに豊かな現象が創発される. 例えば, ななめ衝突ではマクロな (したがって熱ゆらぎが本質的でない) 物体においても, 法線方向のはね返り係数が1を超える現象がみられる [193–196]. これは川に石を投げる水切り遊びにおいてみられる現象である. 衝突により変形した水面が接線運動の一部を法線運動へ変換するのである [194]. また最近では, ななめ衝突において法線方向のはね返り係数が負になる現象が見出された [165, 197]. 負のはね返り係数とは解釈に戸惑うが, これは定義に起因した見かけ上の問題である. 従来のはね返り係数の定義では, 瞬間的な接触を想定していて接触面の変化を考慮していない. しかし実際の衝突では接触時間は有限であり, ななめ衝突

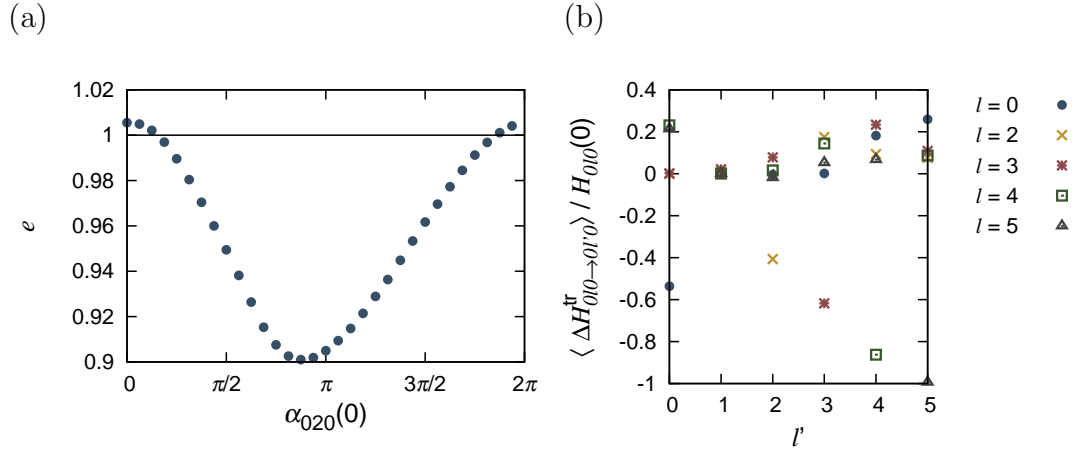


図 5.2: $v_{CM}(0) = 0.1c^{(t)}$, $H_{0l0}(0) = 0.05H_{CM}(0)$ における (a) はね返り係数の初期位相依存性と, (b) 振動モード間遷移 $\langle \Delta H_{0l0 \rightarrow 0l'0} \rangle / H_{CM}(0)$. (a) は 4 重極モード $l = 2$ の場合で, 三角関数的依存性がみられる. また, 超弾性衝突も確認することができる. (b) では横軸に遷移先のモード l' を表し, 初期に $l = 0, 2, 3, 4, 5$ を励起した場合の結果をプロットしている. 同様の結果は低速衝突 $v_{CM}(0) = 0.01c^{(t)}$ においてもみられる.

の場合, その間に接触面の法線ベクトルが回転する. この法線ベクトルの回転を考慮して定義し直せば, 法線方向のはね返り係数が負になることはない.

変形が大きくなると非線形な塑性変形が生じる. このとき, 接触力と変位の関係は劇的に変化する [13]. 図 5.3 は Luding モデル [198] として知られる接触力と変位の関係である. 本研究においても引力がある場合にヒステリシスを確認しているが, 塑性がある場合にはより巨大なループが出現する.

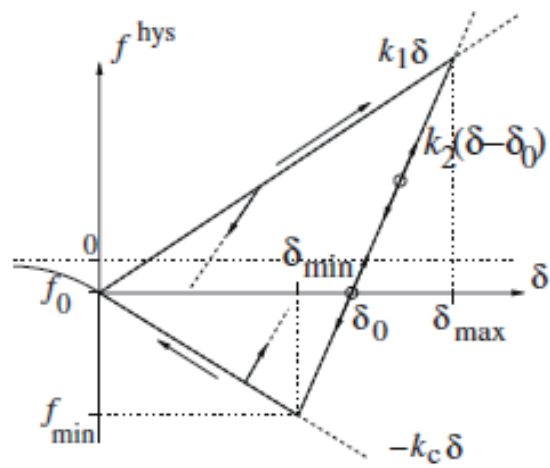


図 5.3: 接触力と変位の関係 (Luding モデル) を文献 [198] より転載. 塑性変形により巨大なヒステリシスループを描いている.

第6章 結論

本研究では、自由端解展開を用いた等温粘弾性球の衝突シミュレーションにより、衝突における弾性振動の影響について調べた。物体は衝突により加熱されるが、その温度上昇率を本シミュレーションで見積もると0.03%以下と非常に微小であるため、等温モデルで解析することは妥当である。

まず斥力のみの場合 $g = 0$ に、完全に同一球、半径が2倍大きい同質球、および硬い壁（表 2.1 参照）との衝突における接触力を調べ、ヘルツの接触理論 [52, 57] を再現することを示した。引力がある場合 $g = 1$ の硬い壁への衝突における接触力は、JKR 理論 [johnson1971, johnson1985] と定性的に一致する一方、分子動力学シミュレーション [121] と同様に吸着効果を反映したヒステリシスが存在することを示した。硬い壁への衝突におけるはね返り係数の衝突速度依存性については、固体粘性率が強いときには準静理論 [59] と定性的には一致する振る舞いに帰着する一方で、固体粘性率が弱いときには衝突と振動の共鳴により、特徴的な振動構造が出現することを明らかにした。

初期温度が有限の場合には、低減引力 $g = 0.2$ 下における硬い壁への衝突において、熱速度程度の低速衝突のときはね返り係数が1を超える超弾性衝突を見出した。さらに衝突板ゆらぎの定理 [177] を今回はじめて数値的に再現した。超弾性衝突の発生確率は低速であるほど上昇する傾向にあるが、前述したはね返り係数の振動構造を反映して単調ではない。また、ある程度以下の速度では、引力にトラップされてはね返らなくなるため、超弾性衝突の発生確率は抑制される。さらに、超弾性衝突はわずかな固体粘性率で抑制されるため、完全結晶に近い物質でのみ観測されることが示唆される。さらに詳しく解析したところ、強く励起される振動モードの初期位相と、はね返り係数の間に三角関数的相関を見出した。この相関の結果として超弾性衝突は発生する。非散逸 $\gamma = 0$ 、非引力 $g = 0$ の低速衝突 $v_{\text{CM}}(0) = 0.001c^{(t)}$ の場合に、摂動論によりこの関係を再現し、最大圧縮時 $t_f/2$ にちょうどニュートラルの状態から膨らみはじめる位相 $\dot{Q}_{nlm}^{(0)}(t_f/2) = |\dot{Q}_{nlm}^{(0)}(t_f/2)|$ のときに最も超弾性衝突が発生しやすいことを明らかにした。

単一モード励起状態の球と硬い壁との衝突により、モード間遷移についても調べた。それにより、変形運動ではない $l = 1$ （重心まわりの並進振動モード）が変形運動である他のモードと結合しないことを示した。 $l \neq 1$ のモード間では、固有周波数の近いモードへの遷移する傾向にあることを示した。

謝辞

指導教授の早川尚男先生には日々の議論を通じ、研究方針や方法など研究推進に関することから、物理の研究の姿勢に関することまで、数えきれない指導を賜りました。またセミナーを通じて、発表姿勢、的確な質疑応答、そのための本質的理解など粘り強くご指導いただきました。論文執筆にあたっては文章構成から英語表現まで徹底的にご教授いただきました。右も左もわからないところから、本研究を学位論文として形にできたのは、早川先生の多大なるご指導のおかげに他ならず、深く感謝致します。Göttingen 大学理論物理学研究所教授の Till W. Kranz 博士には重要な博士論文 [180] をご紹介いただきました。深く感謝致します。三重大学教育学部准教授の國仲寛人博士には超弾性衝突の物理的理解をご教授いただきました。また、数々の論文や書物に記された結果や洞察は、多くの重要な研究指針を与えるものでした。第4章で得られた結果はこれらに依るところが大きく、深く感謝致します。Twente 大学工学部ポスドク研究員の齊藤国靖博士には本研究の前段階において詳しく議論していただきました。特に第3章の内容はそのときの議論から着想したものであり、弾性体衝突に対する重要な理解につながりました。また、早川研究室の先輩として研究以外にも助言や励ましを数多く賜りました。深く感謝致します。セミナーやその他の時間に議論や相談に乗っていただいた早川研究室の皆様には感謝致します。特に助教の渡辺優博士には快適かつ利便性に優れた計算機システムを導入・保守していただき、日々の研究において大変お世話になりました。深く感謝致します。研究の議論や教科書の輪講から私生活まで苦楽を共にした友人一同に感謝します。特に藪中俊介君には初期の数値計算の手法から、途中の計算結果の考察や摂動論の構成にいたるまで、多大な時間を割いて何度も詳細に議論していただきました。深く感謝します。最後に、ここまで支えてくれた両親に深く感謝します。

付録 A 等温粘弾性球の波動方程式の導出

この付録ではポテンシャルを導入する前の変位の方程式 (2.5) を，自由エネルギーを使って導出する．線形弾性体の範囲では自由エネルギー密度は一般に

$$f(T, u) = f_0(T) - K(T - T_0)\alpha_{ij}u_{ij} + \frac{1}{2}\lambda_{ijkl}u_{ij}u_{kl} \quad (\text{A.1})$$

と表される [57]．ここで K は体積弾性率， α_{ij} は熱膨張係数テンソル， λ_{ijkl} は弾性係数テンソル，そして u_{ij} は歪みテンソルであり，変位ベクトル u_i を使って

$$u_{ij} = \frac{1}{2}(\partial_i u_j + \partial_j u_i) \quad (\text{A.2})$$

と表される．等式 (A.1) の右辺第一項 $f_0(T)$ は変形とは関係ない自由エネルギー密度である．第二項は熱による変形を表し，温度 T_0 で外力が働いていなければ物体は静止する．本論文では等温条件を課してこの項を無視する（衝突による加熱の影響については 4.4 節参照）．

等方的な球の場合，弾性係数テンソルは

$$\lambda_{ijkl} = \lambda\delta_{ij}\delta_{kl} + \mu(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \quad (\text{A.3})$$

で与えられる．ここで λ および μ はラメ係数である．このとき自由エネルギー密度は

$$f(T, u) = f_0(T) + \frac{1}{2}\lambda u_{ii}u_{jj} + \mu u_{ij}u_{ij} \quad (\text{A.4})$$

となる．これより応力テンソル σ_{ij}^{el} は

$$\sigma_{ij}^{\text{el}} = \frac{\partial f(T, u)}{\partial u_{ij}} = \lambda\delta_{ij}u_{kk} + 2\mu u_{ij} = \lambda\delta_{ij}\partial_k u_k + \mu(\partial_i u_j + \partial_j u_i) \quad (\text{A.5})$$

となる．一方，散逸応力テンソル σ_{ij}^{dis} は

$$\sigma_{ij}^{\text{dis}} = \lambda' \frac{\partial}{\partial t} \delta_{ij} \partial_k u_k + \mu' \frac{\partial}{\partial t} (\partial_i u_j + \partial_j u_i) \quad (\text{A.6})$$

で与えられる [57]．ここで λ' および μ' は固体粘性率を表す係数である．以上より変位の方程式（波動方程式）は

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} &= \partial_j (\sigma_{ij}^{\text{el}} + \sigma_{ij}^{\text{dis}}) \\ &= \left\{ \lambda + \mu + (\lambda' + \mu') \frac{\partial}{\partial t} \right\} \partial_i \partial_j u_j + \left(\mu + \mu' \frac{\partial}{\partial t} \right) \partial_j^2 u_i \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

であり、ベクトル表記では

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} &= \left(\frac{\lambda + \mu}{\rho} + \frac{\lambda' + \mu'}{\rho} \frac{\partial}{\partial t} \right) \nabla \nabla \cdot \mathbf{u} + \left(\frac{\mu}{\rho} + \frac{\mu'}{\rho} \frac{\partial}{\partial t} \right) \nabla^2 \mathbf{u} \\
&= (c^{(\ell)})^2 \left(1 + \gamma^{(\ell)} \frac{\partial}{\partial t} \right) \nabla \nabla \cdot \mathbf{u} \\
&\quad - (c^{(t)})^2 \left(1 + \gamma^{(t)} \frac{\partial}{\partial t} \right) \nabla \times (\nabla \times \mathbf{u})
\end{aligned} \tag{A.8}$$

となる。ここで

$$c^{(\ell)} = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}} \tag{A.9}$$

$$c^{(t)} = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}} \tag{A.10}$$

であり、

$$\gamma^{(\ell)} \equiv \frac{\lambda' + 2\mu'}{\lambda + 2\mu} \tag{A.11}$$

$$\gamma^{(t)} \equiv \frac{\mu'}{\mu} \tag{A.12}$$

である。

付録B 自由端境界条件における波動方程式の解

この付録では、波動方程式 (A.8) の、自由端境界条件における解を導出する。まず B.1 節で一般解を導出する。B.2 節で分散関係について調べる。最後に B.3 節で自由端境界条件における解を与える。

B.1 一般解

一般解を求めるために、まず解の形を

$$\mathbf{u}(t, \mathbf{x}) = e^{st} \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) \quad (\text{B.1})$$

であると仮定する。ここで s は複素数である。これを波動方程式 (A.8) に代入すれば

$$s^2 \tilde{\mathbf{u}} = (c^{(\ell)})^2 (1 + \gamma^{(\ell)} s) \nabla \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} - (c^{(t)})^2 (1 + \gamma^{(t)} s) \nabla \times (\nabla \times \tilde{\mathbf{u}}) \quad (\text{B.2})$$

が得られる。今、3次元空間に縦波と横波の2つのモードが存在するので、この式の独立な解は6つである。それらは波数 k のヘルムホルツ方程式

$$(\nabla^2 + k^2)\Phi = 0 \quad (\text{B.3})$$

の解 Φ を用いて $\nabla \Phi, \nabla \times (\mathbf{x}\Phi), \nabla \times (\nabla \times (\mathbf{x}\Phi))$ で与えられる。実際、これらを等式 (B.2) に代入すれば、解であることは簡単に確かめられる。ただし、分散関係は

$$-s^2 = (c^{(\ell)} k^{(\ell)})^2 (1 + \gamma^{(\ell)} s) = (c^{(t)} k^{(t)})^2 (1 + \gamma^{(t)} s) \quad (\text{B.4})$$

である。ここで、解 $\nabla \Phi$ は縦波、残り二つの解は横波で、対応する波数をそれぞれ $k^\ell, k^{(t)}$ と書いている。ヘルムホルツ方程式の一般解が球面調和関数 $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ を用いて

$$\Phi(\mathbf{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{m=\ell} \{A_{n\ell m} n_\ell(k_{n\ell} r) + B_{n\ell m} j_\ell(k_{n\ell} r)\} Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \quad (\text{B.5})$$

のように球ノイマン関数 $n_\ell(k_{n\ell} r)$ と球ベッセル関数 $j_\ell(k_{n\ell} r)$ という2つの独立な関数の重ね合わせで与えられるので、これで6つの独立な解がすべて出揃っている。

ただし、球ノイマン関数は原点で発散することから、物理的な解としては不適切であるため $A_{nlm} \equiv 0$ でなければならない。以上より等式 (B.2) の一般解 $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$ は

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) &= \sum_{nlm} \tilde{\mathbf{u}}_{nlm}(\mathbf{x}) \\
\tilde{\mathbf{u}}_{nlm}(\mathbf{x}) &\equiv B_{nlm}^{(0)} \nabla \{j_\ell(k_{nl}^{(\ell)} r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi)\} + B_{nlm}^{(1)} \nabla \times \{\mathbf{x} j_\ell(k_{nl}^{(t)} r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi)\} \\
&\quad + B_{nlm}^{(2)} \nabla \times [\nabla \times \{\mathbf{x} j_\ell(k_{nl}^{(t)} r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi)\}] \\
&= \left[B_{nlm}^{(0)} \frac{dj_\ell(k_{nl}^{(\ell)} r)}{dr} + B_{nlm}^{(2)} \ell(\ell+1) \frac{j_\ell(k_{nl}^{(t)} R)}{r} \right] Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \mathbf{e}_r \\
&\quad + \left[B_{nlm}^{(0)} j_\ell(k_{nl}^{(\ell)} r) + B_{nlm}^{(2)} \frac{d\{r j_\ell(k_{nl}^{(t)} R)\}}{dr} \right] \nabla Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \\
&\quad - B_{nlm}^{(1)} r j_\ell(k_{nl}^{(t)} r) \mathbf{e}_r \times \nabla Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \tag{B.6}
\end{aligned}$$

となる。ここで \mathbf{e}_r , $\nabla Y_{\ell m}$, $\mathbf{e}_r \times \nabla Y_{\ell m}$ はそれぞれ直交することに注意されたい。

B.2 分散関係

分散関係 (B.4) より固体粘性率が

$$0 < \gamma^{(\ell)} < \frac{2}{c^{(\ell)} k_{nl}^{(\ell)}} \quad 0 < \gamma^{(t)} < \frac{2}{c^{(t)} k_{nl}^{(t)}} \tag{B.7}$$

を満たすとき、 s は複素数となる。したがって分散関係 (B.4) の2つ目の等式の虚部から

$$\left(c^{(\ell)} k_{nl}^{(\ell)}\right)^2 \gamma^{(\ell)} = \left(c^{(t)} k_{nl}^{(t)}\right)^2 \gamma^{(t)} \tag{B.8}$$

が得られ、この関係をふまえて実部から

$$c^{(\ell)} k_{nl}^{(\ell)} = c^{(t)} k_{nl}^{(t)} \equiv \omega_{nl} \tag{B.9}$$

が得られる。ここで固有周波数 ω_{nl} を定義している。これより等式 (B.8) は

$$\gamma^{(\ell)} = \gamma^{(t)} \equiv \gamma \tag{B.10}$$

と書き直せる。これは特筆すべき結果で、等温粘弾性球において固体粘性率は1つだけであることを意味する。

B.3 自由端境界条件における解

この節では自由端境界条件，すなわち球面 $r = R$ にかかる圧力 $\mathbf{p}_r(R, \theta, \varphi)$ が 0 であるとき，解がどのように表されるかについて説明する． \mathbf{p}_r は応力 σ_{ij}^{el} により

$$(\mathbf{p}_r)_i = \frac{x_j}{r} \sigma_{ij}^{\text{el}} \quad (\text{B.11})$$

と表されるので，等式 (A.5) により応力を変位で表せば

$$\mathbf{p}_r = \lambda \nabla \cdot \mathbf{u} \mathbf{e}_r + \mu \left(\nabla u_r + \frac{u_r}{r} \mathbf{e}_r - \frac{\mathbf{u}}{r} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial r} \right) \quad (\text{B.12})$$

となる．ここに一般解 (B.6) を代入すれば

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{F}_{r,n\ell m}(\mathbf{x})}{\mu} &= \left[(k_{n\ell}^{(\ell)})^2 B_{n\ell m}^{(0)} a_{n\ell}(k_{n\ell}^{(\ell)} r) + (k_{n\ell}^{(t)})^2 B_{n\ell m}^{(2)} \ell(\ell+1) b_{n\ell}(k_{n\ell}^{(t)} r) \right] Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \mathbf{e}_r \\ &+ \left[(k_{n\ell}^{(\ell)})^2 B_{n\ell m}^{(0)} b_{n\ell}(k_{n\ell}^{(\ell)} r) + (k_{n\ell}^{(t)})^2 B_{n\ell m}^{(2)} d_{n\ell}(k_{n\ell}^{(t)} r) \right] r \nabla Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \\ &+ \frac{1}{2} (k_{n\ell}^{(t)} r)^2 B_{n\ell m}^{(1)} b_{n\ell}(k_{n\ell}^{(t)} r) \mathbf{e}_r \times \nabla Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

が得られる．ただし

$$a_{n\ell}(x) \equiv 2 \frac{d^2 j_\ell(x)}{dx^2} - \frac{\lambda}{\mu} j_\ell(x) \quad (\text{B.14})$$

$$b_{n\ell}(x) \equiv 2 \frac{d}{dx} \left(\frac{j_\ell(x)}{x} \right) \quad (\text{B.15})$$

$$d_{n\ell}(x) \equiv 2x \frac{d^2 j_\ell(x)}{dx^2} + (\ell-1)(\ell+2) \frac{j_\ell(x)}{x} \quad (\text{B.16})$$

である．したがって自由端境界条件は

$$\mathbf{A} \begin{pmatrix} (k_{n\ell}^{(\ell)})^2 B_{n\ell m}^{(0)} \\ (k_{n\ell}^{(t)})^2 B_{n\ell m}^{(2)} \end{pmatrix} = \mathbf{0} \quad (\text{B.17})$$

$$b_{n\ell}(k_{n\ell}^{(t)} R) B_{n\ell m}^{(1)} = 0 \quad (\text{B.18})$$

という形に還元される．ただし

$$\mathbf{A} \equiv \begin{pmatrix} a_{n\ell}(k_{n\ell}^{(\ell)} R) & \ell(\ell+1) b_{n\ell}(k_{n\ell}^{(t)} R) \\ b_{n\ell}(k_{n\ell}^{(\ell)} R) & d_{n\ell}(k_{n\ell}^{(t)} R) \end{pmatrix} \quad (\text{B.19})$$

である．固有周波数は $\det \mathbf{A} = 0$ あるいは $b_{n\ell}(k_{n\ell}^{(t)} R) B_{n\ell m}^{(1)} = 0$ から決まり，前者をスフェロイダルモード，後者をトロイダルモードという．等式 (B.17) および (B.18)

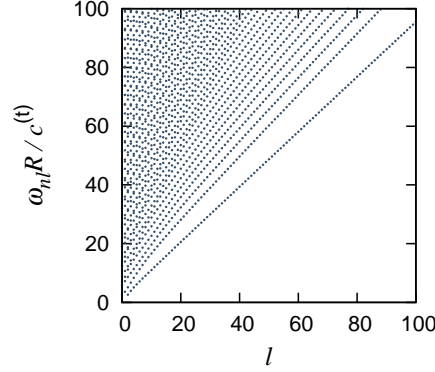


図 B.1: ポアソン比 0.343 におけるスフェロイダルモードの固有周波数.

から明らかなように, 自由端境界条件の下では両者が混ざることはない. 本論文ではスフェロイダルモード

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{u}}_{nlm}^{(S)}(\mathbf{x}) = & \left[B_{nlm}^{(0)} \frac{dj_\ell(k_{nl}^{(\ell)} r)}{dr} + B_{nlm}^{(2)} \ell(\ell+1) \frac{j_\ell(k_{nl}^{(t)} R)}{r} \right] Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \mathbf{e}_r \\ & + \left[B_{nlm}^{(0)} j_\ell(k_{nl}^{(\ell)} r) + B_{nlm}^{(2)} \frac{d\{r j_\ell(k_{nl}^{(t)} R)\}}{dr} \right] \nabla Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \quad (\text{B.20}) \end{aligned}$$

のみを扱っている. 図 B.1 にポアソン比 0.343 における固有周波数 ω_{nl} を示す. 横軸は余緯度モード数 l で, 動径モード数 n に対応して, 同じ l に異なる固有周波数の点が存在している. 等式 (B.17) から係数 $B_{nlm}^{(0)}$ と $B_{nlm}^{(2)}$ の比は決まるが, 自由度が 1 つ残る. ここではその自由度を使ってスフェロイダルモードを

$$\int_0^R dr r^2 \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi \left| \tilde{\mathbf{u}}_{nlm}^{(S)}(\mathbf{x}) \right|^2 = \frac{4\pi}{3} R^3 \quad (\text{B.21})$$

のように規格化している. これにより $\tilde{\mathbf{u}}_{nlm}^{(S)}(\mathbf{x})$ は無次元量である.

付録C 連続体ダイナミクスにおけるゆらぎ

2.2節で言及したとおり，固体粘性率があると揺動散逸関係式を満たすようなランダム力が発生する．ここでは，そのような散逸応力テンソルのゆらぎについてまとめる．また，固体粘性率に由来する緩和時間が接触時間と等しくなるときの固体粘性率の値についての評価も行う．

まず，散逸応力テンソル σ_{ij}^{dis} は (A.6) 式により与えられるとする．今，ゆらぎ $\delta\sigma_{ij}^{\text{dis}}$ の存在により，全散逸応力は

$$\sigma_{ij}^{\text{dis}} \rightarrow \sigma_{ij}^{\text{dis}} + \delta\sigma_{ij}^{\text{dis}} \quad (\text{C.1})$$

となる．流体力学におけるゆらぎと同様に，

$$\langle \delta\sigma_{ij}^{\text{dis}}(t; \mathbf{x}) \rangle = 0 \quad (\text{C.2})$$

および

$$\langle \delta\sigma_{ij}^{\text{dis}}(t_1; \mathbf{x}_1) \delta\sigma_{kl}^{\text{dis}}(t_2; \mathbf{x}_2) \rangle = 2T \{ 2\mu' (\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) + \lambda' \delta_{ij}\delta_{kl} \} \delta(t_1 - t_2) \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \quad (\text{C.3})$$

が成り立つ [199]．ここで， $\langle \rangle$ は統計平均を表す．

固体粘性率 γ が小さいと，緩和時間が接触時間に比べ十分長いいため，このようなゆらぎは重要ではない．ここで等式 (B.1) より， γ による緩和時間 $\tau_{nl}^{(r)}$ を

$$\tau_{nl}^{(r)} \equiv -\frac{1}{\text{Re}[s_{nl}]} \quad (\text{C.4})$$

として定義する．ここで， $\text{Re}[s_{nl}]$ は s_{nl} の実部を表す．等式 (B.4)，(B.9) および (B.10) から

$$\tau_{nl}^{(r)} = \frac{2}{\omega_{nl}^2 \gamma} \quad (\text{C.5})$$

となる．一方，接触時間は等式 (1.8) により与えられる．図 J.1 に示すとおり，シミュレーションにより求めた接触時間 τ と，等式 (1.8) により与えられる τ_H は $v_{\text{CM}}(0) = 0.001c^{(t)}$ から $v_{\text{CM}}(0) = 0.4c^{(t)}$ の範囲でよく一致しているため，以下の評価には τ_H を用いる． $\tau_{nl}^{(r)} = \tau_H$ となる固体粘性率 γ_{nl}^* は

$$\gamma_{nl}^* = \frac{0.7}{\omega_{nl}^2} \left(\frac{Y_{\text{eff}}^2 R_{\text{eff}} v_{\text{CM}}(0)}{M_{\text{eff}}^2} \right)^{1/5} \quad (\text{C.6})$$

と書ける．特に，最小固有周波数 $\omega_{02} \simeq 2.65c^{(t)}/R_1$ ，および $v_{\text{CM}}(0) = 0.001c^{(t)}$ では

$$\gamma_{02}^* \simeq 0.02R_1/c^{(t)} \quad (\text{C.7})$$

となる．ここで，ターゲット粒子は硬い壁とした．したがって $\gamma \ll 0.02R_1/c^{(t)}$ であればゆらぎは無視できる．この条件は3.3節を除いて満たされている．

付録D 力の明示的表式

ここでは力 $F_{\text{CM}} \equiv -\partial V(z_{\text{CM}}, \{Q_{i',n'\ell'm'}\})/\partial z_{\text{CM}}$ および $F_{i,n\ell m} \equiv -\partial V(z_{\text{CM}}, \{Q_{i',n'\ell'm'}\})/\partial Q_{i,n\ell m}$ の明示的な表式を与える．まず D.1 節で一般の場合について示した後，D.2 節で軸対称，D.3 節で硬い壁の場合について示す．

D.1 一般の場合

等式 (2.2) から

$$F_{\text{CM}}(z_{\text{CM}}, \{Q_{i',n'\ell'm'}\}) = 4\epsilon \frac{R_1^2 R_2^2}{d_1^2 d_2^2} \int_0^{\pi/2} d\theta_1 \sin \theta_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{\pi/2} d\theta_2 \sin \theta_2 \times \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \frac{\partial \{r(z_{\text{CM}}, \{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2)\}^2}{\partial z_{\text{CM}}} \times \left(-\frac{d\phi(r(z_{\text{CM}}, \{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2))}{d(r^2)} \right) \quad (\text{D.1})$$

$$F_{i,n\ell m}(z_{\text{CM}}, \{Q_{i',n'\ell'm'}\}) = 4\epsilon \frac{R_1^2 R_2^2}{d_1^2 d_2^2} \int_0^{\pi/2} d\theta_1 \sin \theta_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{\pi/2} d\theta_2 \sin \theta_2 \times \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \frac{\partial \{r(z_{\text{CM}}, \{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2)\}^2}{\partial Q_{i,n\ell m}} \times \left(-\frac{d\phi(r(z_{\text{CM}}, \{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2))}{d(r^2)} \right) \quad (\text{D.2})$$

である．ここで

$$-\frac{d\phi(r)}{dr^2} = 12 \frac{\epsilon}{\sigma^2} \left[2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{14} - g \left(\frac{\sigma}{r} \right)^8 \right] \quad (\text{D.3})$$

である．したがって距離 $r(z_{\text{CM}}, \{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2)$ およびその微分を計算すればよい．

ここで，デカルト基底 $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$ を

$$(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z) \equiv (\mathbf{e}_{x1}, \mathbf{e}_{y1}, \mathbf{e}_{z1}) = (-\mathbf{e}_{x2}, \mathbf{e}_{y2}, -\mathbf{e}_{z2}) \quad (\text{D.4})$$

により導入する（2球の座標系については図 2.1 参照）．これにより距離の表式

(2.3) は

$$\begin{aligned} \mathbf{r}(z_{\text{CM}}, \{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) &= -x(\{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) \mathbf{e}_x \\ &+ y(\{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) \mathbf{e}_y \\ &+ z(z_{\text{CM}}, \{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) \mathbf{e}_z \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

$$\begin{aligned} x(\{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) &\equiv R_2 \sin \theta_2 \cos \varphi_2 + R_1 \sin \theta_1 \cos \varphi_1 \\ &+ u_{x2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2) \\ &+ u_{x1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1, \varphi_1) \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

$$\begin{aligned} y(\{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) &\equiv R_2 \sin \theta_2 \sin \varphi_2 - R_1 \sin \theta_1 \sin \varphi_1 \\ &+ u_{y2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2) \\ &- u_{y1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1, \varphi_1) \end{aligned} \quad (\text{D.7})$$

$$\begin{aligned} z(z_{\text{CM}}, \{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) &\equiv z_{\text{CM}} - R_2 \cos \theta_2 - R_1 \cos \theta_1 \\ &- u_{z2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2) \\ &- u_{z1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1, \varphi_1) \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

と表すことができる。ここで

$$\mathbf{e}_r(\theta, \varphi) = \sin \theta \cos \varphi \mathbf{e}_x + \sin \theta \sin \varphi \mathbf{e}_y + \cos \theta \mathbf{e}_z \quad (\text{D.9})$$

を用いた。また、その微分は

$$\frac{1}{2} \frac{\partial r^2}{\partial z_{\text{CM}}} = z(z_{\text{CM}}, \{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) \quad (\text{D.10})$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{\partial r^2}{\partial Q_{1,n\ell m}} &= \tilde{u}_{x,n\ell m}(R_1, \theta_1, \varphi_1) x(\{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) \\ &- \tilde{u}_{y,n\ell m}(R_1, \theta_1, \varphi_1) y(\{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) \\ &- \tilde{u}_{z,n\ell m}(R_1, \theta_1, \varphi_1) z(z_{\text{CM}}, \{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{\partial r^2}{\partial Q_{2,n\ell m}} &= \tilde{u}_{x,n\ell m}(R_2, \theta_2, \varphi_2) x(\{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) \\ &+ \tilde{u}_{y,n\ell m}(R_2, \theta_2, \varphi_2) y(\{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) \\ &- \tilde{u}_{z,n\ell m}(R_2, \theta_2, \varphi_2) z(z_{\text{CM}}, \{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) \end{aligned} \quad (\text{D.12})$$

となる。ここで等式(2.6)を用いた。もし、球1と球2が同一の球で、かつ $Q_{1,n\ell m} = Q_{2,n\ell m}$ ならば、 $F_{1,n\ell m} = F_{2,n\ell m}$ である。これは球2に働く力(D.2)において、座標の入れ替え $(\theta_1, \varphi_1) \leftrightarrow (\theta_2, \varphi_2)$ をすることで容易に示すことが出来る。実際、シミュレーションでは丸め誤差による力 $F_{1,n\ell m}$ と $F_{2,n\ell m}$ の差異を生まないように、変数変換を行った式を用いている。

ここで等式 (B.6) を適用するために,

$$u_x = u_{xy} \cos \varphi - u_\varphi \sin \varphi \quad (\text{D.13})$$

$$u_y = u_{xy} \sin \varphi + u_\varphi \cos \varphi \quad (\text{D.14})$$

$$u_z = u_r \cos \theta - u_\theta \sin \theta \quad (\text{D.15})$$

のようにデカルト基底の成分 (u_x, u_y, u_z) から極座標成分 $(u_r, u_\theta, u_\varphi)$ へ変換する.
ここで

$$u_{xy} \equiv u_r \cos \theta + u_\theta \sin \theta \quad (\text{D.16})$$

である. このとき等式 (D.6) および (D.7) は

$$\begin{aligned} x(\{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) &= \{R_2 \sin \theta_2 + u_{xy2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2)\} \cos \varphi_2 \\ &\quad - u_{\varphi 2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2) \sin \varphi_2 \\ &\quad + \{R_1 \sin \theta_1 + u_{xy1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1, \varphi_1)\} \cos \varphi_1 \\ &\quad - u_{\varphi 1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1, \varphi_1) \sin \varphi_1, \end{aligned} \quad (\text{D.17})$$

$$\begin{aligned} y(\{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) &= \{R_2 \sin \theta_2 + u_{xy2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2)\} \sin \varphi_2 \\ &\quad + u_{\varphi 2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2) \cos \varphi_2 \\ &\quad + \{R_1 \sin \theta_1 + u_{xy1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1, \varphi_1)\} \sin \varphi_1 \\ &\quad - u_{\varphi 1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1, \varphi_1) \cos \varphi_1, \end{aligned} \quad (\text{D.18})$$

と書きなおされ, さらに等式 (2.3)

$$\begin{aligned}
r^2 &= [\{R_2 \sin \theta_2 + u_{xy2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2)\} \cos \varphi_2 \\
&\quad - u_{\varphi 2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2) \sin \varphi_2 \\
&\quad + \{R_1 \sin \theta_1 + u_{xy1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1, \varphi_1)\} \cos \varphi_1 \\
&\quad - u_{\varphi 1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1, \varphi_1) \sin \varphi_1]^2 \\
&\quad + [\{R_2 \sin \theta_2 + u_{xy2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2)\} \sin \varphi_2 \\
&\quad + u_{\varphi 2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2) \cos \varphi_2 \\
&\quad - \{R_1 \sin \theta_1 + u_{xy1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1, \varphi_1)\} \sin \varphi_1 \\
&\quad - u_{\varphi 1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1, \varphi_1) \cos \varphi_1]^2 \\
&\quad + \{z(z_{\text{CM}}, \{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2)\}^2 \\
&= \{R_2 \sin \theta_2 + u_{xy2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2)\}^2 + \{u_{\varphi 2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2)\}^2 \\
&\quad + \{R_1 \sin \theta_1 + u_{xy1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1, \varphi_1)\}^2 + \{u_{\varphi 1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1, \varphi_1)\}^2 \\
&\quad + 2[\{R_2 \sin \theta_2 + u_{xy2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2)\} \\
&\quad \times \{R_1 \sin \theta_1 + u_{xy1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1, \varphi_1)\} \\
&\quad + u_{\varphi 1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1, \varphi_1) u_{\varphi 2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2)] \cos(\varphi_1 + \varphi_2) \\
&\quad - 2[u_{\varphi 1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1, \varphi_1) \{R_2 \sin \theta_2 + u_{xy2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2)\} \\
&\quad + u_{\varphi 2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2) \\
&\quad \times \{R_1 \sin \theta_1 + u_{xy1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1, \varphi_1)\}] \sin(\varphi_1 + \varphi_2) \\
&\quad + \{z(z_{\text{CM}}, \{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2)\}^2 \tag{D.19}
\end{aligned}$$

および等式 (D.11) は

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \frac{\partial r^2}{\partial Q_{1,nlm}} &= (\tilde{u}_{xy,nlm}(R_1, \theta_1, \varphi_1) \cos \varphi_1 - \tilde{u}_{\varphi,nlm}(R_1, \theta_1, \varphi_1) \sin \varphi_1) \\
&\times [\{R_2 \sin \theta_2 + u_{xy2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2)\} \cos \varphi_2 \\
&- u_{\varphi 2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2) \sin \varphi_2 \\
&+ \{R_1 \sin \theta_1 + u_{xy1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1, \varphi_1)\} \cos \varphi_1 \\
&- u_{\varphi 1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1, \varphi_1) \sin \varphi_1] \\
&- [\tilde{u}_{xy,nlm}(R_1, \theta_1, \varphi_1) \sin \varphi_1 + \tilde{u}_{\varphi,nlm}(R_1, \theta_1, \varphi_1) \cos \varphi_1] \\
&\times [\{R_2 \sin \theta_2 + u_{xy2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2)\} \sin \varphi_2 \\
&+ u_{\varphi 2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2) \cos \varphi_2 \\
&- \{R_1 \sin \theta_1 + u_{xy1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1, \varphi_1)\} \sin \varphi_1 \\
&- u_{\varphi 1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1, \varphi_1) \cos \varphi_1] \\
&- \tilde{u}_{z,nlm}(R_1, \theta_1, \varphi_1) z(z_{\text{CM}}, \{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) \\
&= \tilde{u}_{xy,nlm}(R_1, \theta_1, \varphi_1) [\{R_2 \sin \theta_2 + u_{xy2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2)\} \cos(\varphi_1 + \varphi_2) \\
&- u_{\varphi 2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2) \sin(\varphi_1 + \varphi_2) \\
&+ \{R_1 \sin \theta_1 + u_{xy1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1, \varphi_1)\}] \\
&+ \tilde{u}_{\varphi,nlm}(R_1, \theta_1, \varphi_1) [-\{R_2 \sin \theta_2 + u_{xy2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2)\} \sin(\varphi_1 + \varphi_2) \\
&- u_{\varphi 2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2) \cos(\varphi_1 + \varphi_2) + u_{\varphi 1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1, \varphi_1)] \\
&- \tilde{u}_{z,nlm}(R_1, \theta_1, \varphi_1) z(z_{\text{CM}}, \{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) \tag{D.20}
\end{aligned}$$

となる。なお、 $\partial r^2 / \partial Q_{2,nlm}$ は $\partial r^2 / \partial Q_{1,nlm}$ において $(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1, \varphi_1)$ と $(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2, \varphi_2)$ を入れ替えたものである。

D.2 軸対称の場合

軸対称のとき, $u_\varphi = 0$ かつ u_{xy} および $z(z_{\text{CM}}, \{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2)$ は φ_1 および φ_2 に依らない. このとき距離 (D.19) およびその微分 (D.20) は

$$\begin{aligned}
r^2 &= \{R_2 \sin \theta_2 + u_{xy2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2)\}^2 \\
&\quad + \{R_1 \sin \theta_1 + u_{xy1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1)\}^2 \\
&\quad + 2\{R_2 \sin \theta_2 + u_{xy2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2)\} \\
&\quad \times \{R_1 \sin \theta_1 + u_{xy1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1)\} \cos(\varphi_1 + \varphi_2) \\
&\quad + \{z(z_{\text{CM}}, \{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1; \theta_2)\}^2
\end{aligned} \tag{D.21}$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \frac{\partial r^2}{\partial Q_{1,n\ell m}} &= \tilde{u}_{xy,n\ell m}(R_1, \theta_1, \varphi_1) [\{R_2 \sin \theta_2 \\
&\quad + u_{xy2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2)\} \cos(\varphi_1 + \varphi_2) \\
&\quad + \{R_1 \sin \theta_1 + u_{xy1}(\{Q_{1,n'\ell'm'}\}; R_1, \theta_1)\}] \\
&\quad - \tilde{u}_{\varphi,n\ell m}(R_1, \theta_1, \varphi_1) \{R_2 \sin \theta_2 \\
&\quad + u_{xy2}(\{Q_{2,n'\ell'm'}\}; R_2, \theta_2)\} \sin(\varphi_1 + \varphi_2) \\
&\quad - \tilde{u}_{z,n\ell m}(R_1, \theta_1, \varphi_1) z(z_{\text{CM}}, \{Q_{i',n'\ell'm'}\}; \theta_1; \theta_2)
\end{aligned} \tag{D.22}$$

である. (D.22) 式は φ_1 と $\varphi_1 + \varphi_2$ に, (D.21) 式は $\varphi_1 + \varphi_2$ のみに依存していることがわかる. 積分変数を φ_1 と $\varphi_1 + \varphi_2$ にとると, $m \neq 0$ のとき $F_{1,n\ell m} = 0$ となることが容易にわかる. $F_{2,n\ell m}$ についても同様である. 一方, $m = 0$ では $\tilde{u}_{\varphi,n\ell 0} = 0$ かつ $\tilde{u}_{xy,n\ell 0}$ および $\tilde{u}_{z,n\ell 0}$ が φ に依らない. したがって

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \frac{\partial r^2}{\partial Q_{1,n\ell 0}} &= \tilde{u}_{xy,n\ell 0}(R_1, \theta_1) [\{R_2 \sin \theta_2 + u_{xy2}(\{Q_{2,n'\ell'0}\}; R_2, \theta_2)\} \cos(\varphi_1 + \varphi_2) \\
&\quad + \{R_1 \sin \theta_1 + u_{xy1}(\{Q_{1,n'\ell'0}\}; R_1, \theta_1)\}] \\
&\quad - \tilde{u}_{z,n\ell 0}(R_1, \theta_1) z(z_{\text{CM}}, \{Q_{i',n'\ell'0}\}; \theta_1; \theta_2)
\end{aligned} \tag{D.23}$$

もまた, $\varphi_1 + \varphi_2$ のみに依存する. ここでも積分変数を φ_1 と $\varphi_1 + \varphi_2$ にとることにより, 力 $F_{1,n\ell m}$, $F_{2,n\ell m}$ の φ 積分を解析的に実行することが可能である.

D.3 硬い壁の場合

硬い壁（表 2.1 参照）の場合，ポテンシャルは

$$\begin{aligned}
V(z_{\text{CM}}, \mathbf{u}_1) &= 4\epsilon \frac{R_1^2}{d^4} \int_0^{\pi/2} d\theta_1 \sin \theta_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{\infty} dy_2 \\
&\quad \left[\left(\frac{\sigma}{\sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2}} \right)^{12} \right. \\
&\quad \left. - \left(\frac{\sigma}{\sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2}} \right)^6 \right] \\
&= 4\pi\epsilon \frac{R_1^2 \sigma^2}{d^4} \int_0^{\pi/2} d\theta_1 \sin \theta_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \\
&\quad \left[\frac{1}{5} \left(\frac{\sigma}{z_2 - z_1} \right)^{10} - \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma}{z_2 - z_1} \right)^4 \right] \\
&= 4\pi\epsilon \frac{R_1^2 \sigma^2}{d^4} \int_0^{\pi/2} d\theta_1 \sin \theta_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \\
&\quad \left[\frac{1}{5} \left(\frac{\sigma}{z_{\text{cm,w}} + R_1 \cos \theta_1 + u_z(R_1, \theta_1, \varphi_1)} \right)^{10} \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma}{z_{\text{cm,w}} + R_1 \cos \theta_1 + u_z(R_1, \theta_1, \varphi_1)} \right)^4 \right] \tag{D.24}
\end{aligned}$$

のように簡略化される．ここで (x_1, y_1, z_1) は球， (x_2, y_2, z_2) は壁の座標であり， $z_{\text{cm,w}}$ は球 1 の重心から壁までの距離を表す．軸対称の場合，積分 $\int \varphi_1$ は単に 2π に置き換わる．

付録E 衝突問題におけるゆらぎの定理と熱力学第二法則

研究背景で述べたとおり，超弾性衝突は熱力学第二法則に反しているようにみえるが，本当にそのようなことが起こっているのであろうか．その点を明らかにするために，ここでは文献 [177] に基いて衝突問題におけるゆらぎの定理を導出する．さらに Jarzynski-type 等式を導出し，そこから衝突問題における熱力学第二法則を導く．まず E.1 節でセットアップについてまとめる．次に E.2 節でゆらぎの定理を導出する．最後に E.3 節で Jarzynski-type 等式および熱力学第二法則を導出する．

E.1 セットアップ

まずは衝突問題のセットアップについて述べる．衝突問題では重心運動がマクロ変数 X に対応し，その他の相対運動 x がミクロ変数に対応する．例えば本論文の表記では， $X = (z_{\text{CM}}, v_{\text{CM}})$ ， $x = \{Q_{i,nlm}\}$ である．このとき系のハミルトニアン $H_{\text{tot}}(X, x)$ は

$$H_{\text{tot}}(X, x) = H(X) + h(x) + U(X, x) \quad (\text{E.1})$$

と表される．ここで， $H(X)$ は巨視的な部分に対するハミルトニアンであり， $h(x)$ は微視的な部分に対するハミルトニアンである．また， $U(X, x)$ 二つのスケール間の相互作用であり，(2.2) 式に対応する量である．系の初期状態は確率分布

$$\rho_{\text{tot},0}(X, x) = \rho_0(X) \frac{e^{-h(x)/k_{\text{B}}T}}{Z} \quad (\text{E.2})$$

に従うよう選ぶ．ここで， $\rho_0(X) \geq 0$ は

$$\int dX \rho_0(X) = 1 \quad (\text{E.3})$$

のように規格化された任意分布である．また，分配関数 Z は

$$Z = \int dx e^{-h(x)/k_{\text{B}}T} \quad (\text{E.4})$$

で与えられる．(E.2)式に従う (X, x) は

$$U(X, x) = 0 \quad (\text{E.5})$$

を満たす．さらに

$$U(X_{t_f}(X, x), x_{t_f}(X, x)) = 0 \quad (\text{E.6})$$

であるような定数 t_f が存在すると仮定する．ここで $X_t(X, x)$ および $x_t(X, x)$ はそれぞれ，時刻 t におけるマクロおよびミクロ変数である．すなわち初期状態と終状態（時刻 t_f ）においてマクロ変数 X とミクロ変数 x は非結合である．

主に興味のある量は，衝突の間に巨視的な部分が受け取った全エネルギー

$$W(X, x) \equiv H(X_{t_f}(X, x)) - H(X) = h(x) - h(X_{t_f}(X, x)) \quad (\text{E.7})$$

である．等式は初期状態と終状態のエネルギー保存則より導かれる． $W(X, x) = 0$ は弾性衝突に対応し， $W(X, x) < 0$ は非弾性衝突に対応する．そして $W(X, x) > 0$ は超弾性衝突に対応する．したがって何らかの平均操作により $W(X, x) \leq 0$ となることが期待される．

任意の関数 $f(X, x)$ に対し，初期分布 (E.2) による平均を

$$\langle f(X, x) \rangle_{\rho_0} \equiv \int dX dx f(X, x) \rho_0(X) \frac{e^{-h(x)/k_B T}}{Z} \quad (\text{E.8})$$

と書く．ここで，特に重要なのは $\rho_0(X) = \delta(X - X_0)$ のときである．そこで，これに対応する平均を

$$\langle f(X, x) \rangle_{X_0} \equiv \int dX dx f(X, x) \delta(X - X_0) \frac{e^{-h(x)/k_B T}}{Z} = \int dX dx f(X_0, x) \frac{e^{-h(x)/k_B T}}{Z} \quad (\text{E.9})$$

と書く．

E.2 ゆらぎの定理

ここではゆらぎの定理を導出する．この節に限り，ハミルトニアン の時間反転対称性を仮定する．

まず，衝突によって X_0 から X_1 へ遷移する確率密度

$$\begin{aligned} P(X_0 \rightarrow X_1) &\equiv \langle \delta(X_{t_f}(X, x) - X_1) \rangle_{X_0} \\ &= \int dX dx \delta(X - X_0) \delta(X_{t_f}(X, x) - X_1) \frac{e^{-h(x)/k_B T}}{Z} \end{aligned} \quad (\text{E.10})$$

を定義する．このときに巨視的な部分が受け取る全エネルギー

$$W(X_0 \rightarrow X_1) \equiv H(X_1) - H(X_0) \quad (\text{E.11})$$

も定義しておく．もちろんこれは変数が違うだけで (E.7) 式と同じ量である．このとき，

$$\begin{aligned}
e^{W(X_0 \rightarrow X_1)/k_B T} P(X_0 \rightarrow X_1) &= \int dX dx \delta(X - X_0) \delta(X_{t_f} - X_1) e^{\{H(X_{t_f}) - H(X)\}/k_B T} \frac{e^{-h(x)/k_B T}}{Z} \\
&= \int dX dx \delta(X - X_0) \delta(X_{t_f} - X_1) e^{\{h(x) - h(x_{t_f})\}/k_B T} \frac{e^{-h(x)/k_B T}}{Z} \\
&= \int dX dx \delta(X - X_0) \delta(X_{t_f} - X_1) \frac{e^{-h(x_{t_f})/k_B T}}{Z} \\
&= \int dX' dx' \delta(X_{-t_f}(X', x') - X_0) \delta(X' - X_1) \frac{e^{-h(x')/k_B T}}{Z}
\end{aligned} \tag{E.12}$$

が得られる．最終行では積分変数を X, x から

$$X' = X_{t_f}(X, x), \quad x' = x_{t_f}(X, x) \tag{E.13}$$

へ変換した．Liouville の定理より $dX dx = dX' dx'$ である．

ここで，ハミルトニアン の時間反転対称性から

$$\overline{X_{-t_f}(X', x')} = X_{t_f}(\overline{X'}, \overline{x'}) \tag{E.14}$$

であること，また $dX' dx' = d\overline{X'} d\overline{x'}$ および $h(x') = h(\overline{x'})$ より

$$\begin{aligned}
e^{W(X_0 \rightarrow X_1)/k_B T} P(X_0 \rightarrow X_1) &= \int d\overline{X'} d\overline{x'} \delta(X_{t_f}(\overline{X'}, \overline{x'}) - \overline{X_0}) \delta(\overline{X'} - \overline{X_1}) \frac{e^{-h(\overline{x'})/k_B T}}{Z} \\
&= \int dX dx \delta(X - \overline{X_1}) \delta(X_{t_f} - \overline{X_0}) \frac{e^{-h(x)/k_B T}}{Z}
\end{aligned} \tag{E.15}$$

が得られる．最終行は単に記号を書き直しただけである．確率密度の定義式 (E.10) 式より，

$$e^{W(X_0 \rightarrow X_1)/k_B T} P(X_0 \rightarrow X_1) = P(\overline{X_1} \rightarrow \overline{X_0}) \tag{E.16}$$

であることがわかる．これが衝突問題におけるゆらぎの定理である．

E.3 熱力学第二法則

この節では Jarzynski-type 等式を導出し，そこから衝突問題における熱力学第二法則を導く．ここでは一般の初期分布 (E.2) を用いる．簡単のため，任意の X に対し $\rho_0(X) > 0$ を仮定する．

まず， $\tilde{\rho}(X', x') > 0$ を

$$\int dX' \tilde{\rho}(X', x') = 1 \tag{E.17}$$

を満たす任意の関数とする．このとき

$$\begin{aligned} & \int dX dx \frac{\tilde{\rho}(X_{t_f}, x_{t_f})}{\rho_0(X)} e^{\{h(x)-h(x_{t_f})\}/k_B T} \rho_0(X) \frac{e^{-h(x)/k_B T}}{Z} \\ &= \int dX' dx' \tilde{\rho}(X', x') \frac{e^{-h(x')/k_B T}}{Z} = \int dx' \frac{e^{-h(x')/k_B T}}{Z} = 1 \end{aligned} \quad (\text{E.18})$$

であることわかる．ここで，変数変換 (E.13) および等式 (E.17) を用いた．したがって Jarzynski-type 等式

$$\left\langle \frac{\tilde{\rho}(X_{t_f}, x_{t_f})}{\rho_0(X)} e^{W(X, x)/k_B T} \right\rangle_{\rho_0} = 1 \quad (\text{E.19})$$

が成り立つ．

Jarzynski-type 等式 (E.19) を

$$\langle \exp[\log \tilde{\rho}(X_{t_f}, x_{t_f}) - \log \rho_0(X) + W(X, x)/k_B T] \rangle_{\rho_0} = 1 \quad (\text{E.20})$$

と書き直し，Jensen の不等式

$$\langle e^{f(X, x)} \rangle_{\rho_0} \geq \exp[\langle f(X, x) \rangle_{\rho_0}] \quad (\text{E.21})$$

を用いることにより，

$$\langle W(X, x) \rangle / k_B T \leq -\langle \log \tilde{\rho}(X_{t_f}, x_{t_f}) \rangle_{\rho_0} - \langle \log \rho_0(X) \rangle_{\rho_0} \quad (\text{E.22})$$

が得られる．ここで，シャノンのエントロピー

$$S[\rho] \equiv -k_B \int dX \rho(X) \log \rho(X) \quad (\text{E.23})$$

を用いることにより，

$$\langle \log \rho_0(X) \rangle_{\rho_0} = -S[\rho_0] / k_B \quad (\text{E.24})$$

と書くことができる．また，任意の関数 $\tilde{\rho}(X', x')$ を衝突後分布

$$\tilde{\rho}(X', x') = \rho_{t_f}(X') \equiv \int dX dx \delta(X_{t_f}(X, x) - X') \rho_0(X) \frac{e^{-h(x)/k_B T}}{Z} \quad (\text{E.25})$$

に選べば

$$\begin{aligned} \langle \log \tilde{\rho}(X_{t_f}, x_{t_f}) \rangle_{\rho_0} &= \int dX dx \log \rho_{t_f}(X_{t_f}) \rho_0(X) \frac{e^{-h(x)/k_B T}}{Z} \\ &= \int dX' dX dx \log \rho_{t_f}(X') \delta(X_{t_f}(X, x) - X') \rho_0(X) \frac{e^{-h(x)/k_B T}}{Z} \\ &= \int dX' \rho_{t_f}(X') \log \rho_{t_f}(X') = -S[\rho_{t_f}] / k_B \end{aligned} \quad (\text{E.26})$$

である．したがって不等式 (E.22) は

$$\langle W(X, x) \rangle \leq T \{S[\rho_{t_f}] - S[\rho_0]\} \quad (\text{E.27})$$

となる．これが衝突問題における熱力学第二法則である．

付録F 断熱圧縮による温度上昇

ここでは断熱圧縮における温度上昇の表式 (4.7) を導出する [57]. 自由エネルギー密度の一般的表式 (A.1) の両辺を温度で微分することによりエントロピーが

$$s(T, \mathbf{u}) = s_0(T) + 3K \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (\text{F.1})$$

のように得られる. ここで熱膨張係数テンソル α_{ij} は等方的であるとし, 線形膨張率 α により

$$\alpha_{ij} = 3\alpha \delta_{ij} \quad (\text{F.2})$$

のように表されると仮定する. 一方, 自由エネルギー密度の一般的表式 (A.1) に $T = T_0$ を代入し, T_0 で微分すると

$$s(T_0) = s_0(T_0) \quad (\text{F.3})$$

であることがわかる.

今, 断熱変化により温度が T_0 から T へ変化したとする. 断熱変化においてエントロピーは不変であることから, 等式 (F.1) および (F.3) より

$$s_0(T) + 3K \nabla \cdot \mathbf{u} = s_0(T_0) \quad (\text{F.4})$$

となる. ここで,

$$s_0(T) - s_0(T_0) = (T - T_0) \frac{\partial s_0(T_0)}{\partial T} \quad (\text{F.5})$$

と1次まで展開し, エントロピー密度の温度微分が

$$\frac{\partial s_0(T)}{\partial T} = \frac{c_V}{T} \quad (\text{F.6})$$

のように等積比熱で表されることを用いれば, 結局

$$T - T_0 = -T_0 \frac{3K\alpha}{c_V} \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (\text{F.7})$$

が得られる.

今, 熱平衡状態の温度を T_0 ではなく T で表し, 断熱圧縮による温度上昇を ΔT と表す. すなわち

$$T_0 \rightarrow T, \quad T \rightarrow T + \Delta T \quad (\text{F.8})$$

のように表記を変更する. また, 等方的な物体の場合,

$$K = \frac{c_V}{c_P} K_{\text{ad}} \quad (\text{F.9})$$

であることを用いると一般的等式 (F.7) は等式 (4.7) となる.

付録G 音波の吸収係数

固体粘性率は音波の吸収係数 Γ を調べることで実験的に決定することができる [57]. 吸収係数は物体内を伝播する音波

$$\Gamma = \frac{\langle E_{\text{dis}} \rangle_t}{2c^{(t)} \langle E_{\text{el}} \rangle_t} \quad (\text{G.1})$$

のようにエネルギー散逸 \dot{E}_{mech} の時間平均値と弾性波のエネルギー

$$E_{\text{el}} = \int dV \rho \dot{u}^2 \quad (\text{G.2})$$

の時間平均値の比によって表される. ここで $\langle \rangle_t$ は時間平均を表し, $\int dV$ は物体の全体積での積分を表す. 吸収係数を使って, 物体内を伝播する音波は $e^{-x\Gamma}$ のように表される. ここで, 音波は x 方向に伝播しているとする.

今, x 方向に伝播する単色の横波音波を考えよう. すなわち, 変位 \mathbf{u} は

$$u_x = 0 \quad u_y = u_{0y} \cos(kx - \omega t) \quad u_z = u_{0z} \cos(kx - \omega t) \quad (\text{G.3})$$

と表すことができる. ここで, k および ω はそれぞれ, 音波の波数および振動数である. このとき, 単位体積あたりの弾性波のエネルギーは

$$\langle \rho \dot{u}^2 \rangle_t = \frac{1}{2} \rho \omega^2 (u_{0y}^2 + u_{0z}^2) \quad (\text{G.4})$$

となる.

一方, 散逸には一般に固体粘性率に起因するものの他に, 熱伝導に起因するものも存在する. 音波の伝播は断熱過程とみなせるので, その温度変化は等式 (F.7) により与えられるが, 横波では $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ であるため, 温度変化は発生しない. したがって, 今の場合には固体粘性率に起因する散逸のみ考慮すればよい. このとき, 単位体積あたりの散逸 Φ は自由エネルギー密度の表式 (A.4) に対応して

$$\Phi = \frac{1}{2} \lambda' \dot{u}_{ii} \dot{u}_{jj} + \mu' \dot{u}_{ij} \dot{u}_{ij} \quad (\text{G.5})$$

と表される. 等式 (G.3) より

$$u_{xy} = -\frac{1}{2} k u_{0y} \cos(kx - \omega t) \quad u_{xz} = -\frac{1}{2} k u_{0z} \sin(kx - \omega t) \quad (\text{G.6})$$

で、それ以外は0であるから、結局

$$2\langle\Phi\rangle_t = \frac{1}{2(c^{(t)})^2} \mu' \omega^4 (u_{0y}^2 + u_{0z}^2) \quad (\text{G.7})$$

となる。したがって横波音波の吸収係数 $\Gamma^{(t)}$ は

$$\Gamma^{(t)} = \frac{2\langle\Phi\rangle_t}{2c^{(t)}\langle\rho\dot{u}^2\rangle_t} = \frac{\mu'\omega^2}{2\rho(c^{(t)})^3} \quad (\text{G.8})$$

により与えられる。したがって吸収係数を測定することにより固体粘性率 μ' が得られる。

一般には固体粘性率には μ' と独立な λ' が存在するため、縦波音波の吸収係数 $\Gamma^{(l)}$ も決定する必要がある。しかし等温粘弾性球の場合には縦波と横波の固体粘性率は独立ではないため（等式 (B.10) 参照），横波音波の吸収係数 $\Gamma^{(t)}$ のみ測定すればよい。

付録H 等式(3.6)第三項の係数について

等式(3.6)第三項の係数は文献[59]では

$$A = \alpha^2 \beta = \left(\frac{\lambda'}{\lambda} \right)^2 \frac{3\lambda + 2\mu}{3\lambda' + 2\mu'} \quad (\text{H.1})$$

で与えられている。ただし、文献[59]では応力 σ_{ij}^{el} および σ_{ij}^{dis} を

$$\sigma_{ij}^{\text{el}} = E_1 \left(u_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} u_{kk} \right) + E_2 \delta_{ij} u_{kk} \quad (\text{H.2})$$

$$\sigma_{ij}^{\text{dis}} = \eta_1 \frac{\partial}{\partial t} \left(u_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} u_{kk} \right) + \eta_2 \frac{\partial}{\partial t} \delta_{ij} u_{kk} \quad (\text{H.3})$$

と表した際の E_1 , E_2 , η_1 および η_2 を用いて A を与えているが、ここでは等式(A.5) および(A.6)に準拠して A を与えているため、表記が異なることに注意されたい。等式(A.11), (A.12), (B.10) から

$$\lambda' = \lambda \gamma \quad (\text{H.4})$$

$$\mu' = \mu \gamma \quad (\text{H.5})$$

である。これより

$$A = \gamma \quad (\text{H.6})$$

であることがわかる。

付録I 等式(5.15)の導出

ここでは等式(5.15)の導出方法を示す。 $\tilde{Q}_{i,nlm}^{(0)}$ が

$$\tilde{Q}_{i,nlm}^{(0)}(\tilde{t}_{\text{vib}}) = \frac{1}{\tilde{\omega}_{i,nl}} \sqrt{2\tilde{H}_{i,nlm}^{(0)}(0)} \sin(\alpha_{i,nlm}(0) + \tilde{\omega}_{i,nl}\tilde{t}_{\text{vib}}) \quad (\text{I.1})$$

であることから $\Delta\tilde{H}_{i,nlm}^{(2)}(\tilde{t}_{\text{vib}})$ は

$$\begin{aligned} \Delta\tilde{H}_{i,nlm}^{(2)}(\tilde{t}_{\text{vib}}) &= \dot{\tilde{Q}}_{i,nlm}^{(0)}(\tilde{t}_{\text{vib}})\dot{\tilde{Q}}_{i,nlm}^{(1)}(\tilde{t}_{\text{vib}}) + \tilde{\omega}_{i,nl}^2 \tilde{Q}_{i,nlm}^{(0)}(\tilde{t}_{\text{vib}})\tilde{Q}_{i,nlm}^{(1)}(\tilde{t}_{\text{vib}}) \\ &= \sqrt{2\tilde{H}_{i,nlm}^{(0)}(0)} \{ \dot{\tilde{Q}}_{i,nlm}^{(1)}(\tilde{t}_{\text{vib}}) \cos(\alpha_{i,nlm}(0) + \tilde{\omega}_{i,nl}\tilde{t}_{\text{vib}}) \\ &\quad + \tilde{\omega}_{i,nl} \tilde{Q}_{i,nlm}^{(1)}(\tilde{t}_{\text{vib}}) \sin(\alpha_{i,nlm}(0) + \tilde{\omega}_{i,nl}\tilde{t}_{\text{vib}}) \} \\ &= -2\sqrt{\tilde{H}_{i,nlm}^{(0)}(0)} \Delta\tilde{H}_{i,nlm}^{(2)}(\tilde{t}_{\text{vib}}) \\ &\quad \cos(\alpha_{i,nlm}(0) + \tilde{\omega}_{i,nl}\tilde{t}_{\text{vib}} - \beta_{i,nlm}(\tilde{t}_{\text{vib}})) \end{aligned} \quad (\text{I.2})$$

となる。最終行では $\Delta\tilde{H}_{i,nlm}^{(2)} = (\dot{\tilde{Q}}_{i,nlm}^{(1)})^2/2 + (\tilde{\omega}_{i,nl}\tilde{Q}_{i,nlm}^{(1)})^2/2$ を用いている。また、

$$\begin{aligned} \sin \beta_{i,nlm}(\tilde{t}_{\text{vib}}) &= -\frac{\tilde{\omega}_{i,nl}\tilde{Q}_{i,nlm}^{(1)}(\tilde{t}_{\text{vib}})}{\sqrt{2\Delta\tilde{H}_{i,nlm}^{(2)}(\tilde{t}_{\text{vib}})}} \\ \cos \beta_{i,nlm}(\tilde{t}_{\text{vib}}) &= -\frac{\dot{\tilde{Q}}_{i,nlm}^{(1)}(\tilde{t}_{\text{vib}})}{\sqrt{2\Delta\tilde{H}_{i,nlm}^{(2)}(\tilde{t}_{\text{vib}})}} \end{aligned} \quad (\text{I.3})$$

により $\beta_{i,nlm}(\tilde{t}_{\text{vib}})$ を導入した。

力 $\partial\tilde{V}(\tilde{z}_{\text{CM}}^{(0)}(t), 0)/\partial\tilde{Q}_{i,nlm}$ が最大圧縮時 $t_f/2$ を中心に偶関数であることから、

$\sin \beta_{i,nlm}(\tilde{t}_{\text{vib}} = t_f)$ は

$$\begin{aligned}
\sin \beta_{i,nlm}(t_f) &= \frac{\int_0^{t_f} dt' \frac{\partial \tilde{V}(\tilde{z}_{\text{CM}}^{(0)}(t'), 0)}{\partial \tilde{Q}_{i,nlm}} \sin \tilde{\omega}_{i,nl}(t_f - t')}{\sqrt{\left| \int_0^{t_f} dt' \frac{\partial \tilde{V}(\tilde{z}_{\text{CM}}^{(0)}(t'), 0)}{\partial \tilde{Q}_{i,nlm}} e^{i\tilde{\omega}_{i,nl}t'} \right|^2}} \\
&= \frac{\int_{-t_f/2}^{t_f/2} dt' \frac{\partial \tilde{V}(\tilde{z}_{\text{CM}}^{(0)}(t_f/2+t'), 0)}{\partial \tilde{Q}_{i,nlm}} \sin \tilde{\omega}_{i,nl}(t_f/2 - t')}{\sqrt{\left| \int_{-t_f/2}^{t_f/2} dt' \frac{\partial \tilde{V}(\tilde{z}_{\text{CM}}^{(0)}(t_f/2+t'), 0)}{\partial \tilde{Q}_{i,nlm}} e^{i\tilde{\omega}_{i,nl}t'} \right|^2}} \\
&= \frac{\sin \frac{\tilde{\omega}_{i,nl}t_f}{2} \int_0^{t_f/2} dt' \frac{\partial \tilde{V}(\tilde{z}_{\text{CM}}^{(0)}(t_f/2+t'), 0)}{\partial \tilde{Q}_{i,nlm}} \cos \tilde{\omega}_{i,nl}t'}{\left| \int_0^{t_f/2} dt' \frac{\partial \tilde{V}(\tilde{z}_{\text{CM}}^{(0)}(t_f/2+t'), 0)}{\partial \tilde{Q}_{i,nlm}} \cos \tilde{\omega}_{i,nl}t' \right|} \\
&= \sin \frac{\tilde{\omega}_{i,nl}t_f}{2} \tag{I.4}
\end{aligned}$$

となる．3行目の分母の絶対値は， $\partial \tilde{V}(\tilde{z}_{\text{CM}}^{(0)}(t), 0)/\partial \tilde{Q}_{i,nlm}$ が $0 \leq t \leq t_f/2$ において正かつ単調増加関数であることため取り除くことができる． $\cos \beta_{i,nlm}(t_f)$ についても同様の計算により

$$\cos \beta_{i,nlm}(t_f) = \cos \frac{\tilde{\omega}_{i,nl}t_f}{2} \tag{I.5}$$

となるので，結局

$$\beta_{i,nlm}(t_f) = \frac{\tilde{\omega}_{i,nl}t_f}{2} \tag{I.6}$$

である．

付録J 接触時間の衝突速度依存性と 4重極モードの支配性

先行研究 [178] では2次元弾性円盤において、接触時間の衝突速度依存性を調べ、ヘルツの準静理論と比較している (1.13節参照)。シミュレーションと理論は定性的には一致しているものの、定量的な一致は確認されていない。また、文献 [178] では低速衝突において4重極モードの励起が支配的であることを示したが、ここでは近似モデルが用いられているため、明快さに欠ける (1.13節参照)。そこで、3次元弾性球において同様に調べ、対応する理論式 (1.8) との整合性について論じる。ここでは斥力のみの場合 $g = 0$ 、および引力がある場合 $g = 1$ の両方について調べる。もちろん、近似モデルの導入は行わない。

接触時間 τ を導入するにあたり、相互作用が有限であれば接触していると考えるのが自然であるが、今の場合、相互作用は冪関数であるためどれだけ離れても0にはならない。そこで、斥力のみの場合 ($g = 0$) には表面間距離が 1.47σ の範囲にある時間として接触時間を定義する。ここで、係数はポテンシャルエネルギーが100分の1になるようにとった ($1.47^{-12} \simeq 0.01$)。一方、引力がある場合 ($g = 1$) には表面吸着のために、表面間距離の評価は煩雑なものとなる。そこで、ここでは相互作用の大きさにしきい値 $5 \times 10^{-5} M(c^{(t)})^2$ を設定し、これを上回っている時間として接触時間 τ を定義する。このしきい値はレナードジョーンズポテンシャルに導入したカットオフでの値とは異なることに注意されたい。カットオフは計算精度を保持するために、十分遠方に設定しているため、その間を接触しているとみなすのは不適當である。

図 J.1 は接触時間 τ と衝突速度の関係を調べたものである。実線は等式 (1.8) をプロットしたものである。低速領域 $v_{CM}(0) < 0.1c^{(t)}$ において、 $g = 0$ の場合と完全に一致している。高速衝突でずれるのは弾性励起が無視できないためだと考えられる。一方、 $g = 1$ の場合も全領域で理論値と同程度の大きさを示している。

また、図 J.2 は4重極モードおよび全モードの励起エネルギーの衝突速度依存性を示したものである。(a) は $g = 0$ 、(b) は $g = 1$ の結果を表している。したがって図 J.2(b) の4重極モードの結果については、図 3.2(b) と同じものである。ただし、ここでは対数表示している。

まず、(a) $g = 0$ では高速衝突、および共鳴部分を除き、励起エネルギーはほぼ4重極モードのみで決まっていることがわかる。低速衝突で4重極モードが支配的となるのは、2次元弾性円盤 [178] やレイリーの洞察 [200] と一致している。高速

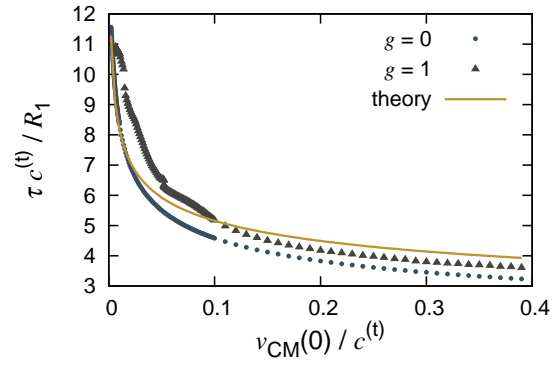


図 J.1: 接触時間と衝突速度の関係. 斥力のみの場合 $g = 0$, 引力がある場合 $g = 1$, および等式 (1.8) をそれぞれプロットしている.

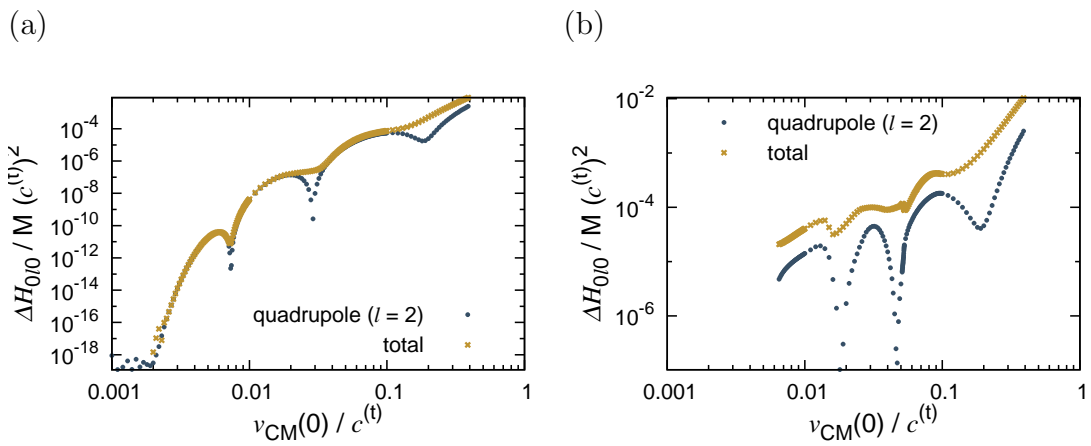


図 J.2: 4重極モードおよび全モードの励起エネルギーの衝突速度依存性. (a) は $g = 0$, (b) は $g = 1$ の結果を表している.

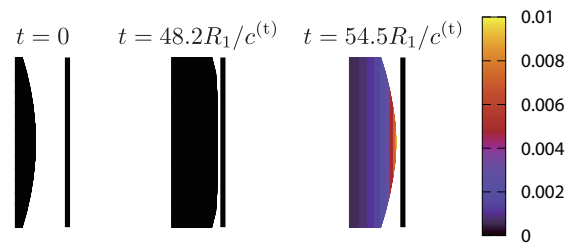


図 J.3: 引力がある場合の衝突の時間発展. カラーバーは変位を表す. 最後, 離れる際に突起ができているのがわかる.

衝突ではより高次のモードも励起される.

一方, (b) $g = 1$ では全領域で 4 重極モードの支配性がみられず, 高次モードの励起が起きていることがわかる. 図 J.3 に示したとおり, 引力があると吸着した表面が引きはがされる際に突起が形成される. そのため高次モードが励起されると考えられる.

付録K はね返り係数の非ガウス性

ナノクラスターの分子動力学シミュレーション [166] では引力がある場合、はね返り係数の頻度分布が2重指数関数となることを確認している (1.14 参照)。そこで、本モデルにおいても $g = 1$ におけるはね返り係数の分布について調べる。

図 4.1(a) の $v_{\text{CM}}(0) = 0.01c^{(t)}$ のデータを頻度分布にしたのが図 K.1 である。実線はガウス分布によるフィッティング結果を表す。はね返り係数の小さい領域でわずかにずれが見られるが、分子動力学シミュレーションで確認されたような2重指数関数的振舞いは確認できない。

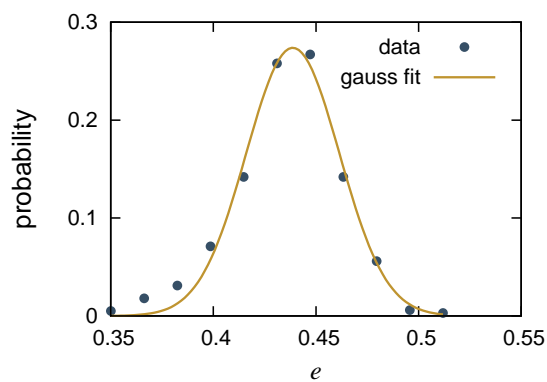


図 K.1: .

付録L 摩擦がある場合におけるスピン球衝突

本モデルでは球表面は滑らかで凹凸がない場合を扱っているため、球が回転していたとしても、接線応力は働かずに空転するだけである。そこで、ここでは最もシンプルなモデルであるクーロン摩擦の法則

$$F_T = \nu F_N \quad (\text{L.1})$$

により球面の凹凸を導入し、球が回転している場合の衝突について調べる。ここで、 F_T および F_N はそれぞれ接線および法線方向に働く力であり、 ν は摩擦係数である。 F_T は動きと逆向きに働く。ここでは簡単のため、硬い壁との衝突に限定し、球番号の添字 $i = 1$ は省略する。また、 y 軸反時計回りに回転しているとする。なお、クーロン摩擦の法則 (L.1) が成り立つのは表面同士がスリップしている場合に限られるので、球は十分高速に回転していると仮定する。

硬い壁との衝突では、ポテンシャルが u_z のみに依存する (等式 (D.24) 参照)。そのため摩擦がない場合 $\nu = 0$ 、変位に働く力 $\boldsymbol{\xi}_u \equiv -\partial V(z_{\text{CM}, w}, \mathbf{u})/\partial \mathbf{u}$ は z 成分のみ有する。一方、摩擦が存在する場合、クーロン摩擦の法則 (L.1) より

$$\boldsymbol{\xi}_u(\mathbf{x}) = -\frac{2\delta(r-R)}{R^2} v'(z_{\text{CM}, w} + R \cos \theta + u_z(R, \theta, \varphi)) (\nu \mathbf{e}_x + \mathbf{e}_z) \quad (\text{L.2})$$

のように x 方向にも力が生じる。ここで、 v はポテンシャル (D.24) の被積分関数

$$v(z) \equiv 4\pi\epsilon \frac{R^2 \sigma^2}{d^4} \left[\frac{1}{5} \left(\frac{\sigma}{z_2 - z_1} \right)^{10} - \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma}{z_2 - z_1} \right)^4 \right] \quad (\text{L.3})$$

である。また、プライム記号は微分を表す。等式 (L.2) にスフェロイドルモード $\tilde{\mathbf{u}}_{nlm}^{(S)}(\mathbf{x})$ をかけて球全体で積分すれば、振動モードにかかる力が

$$F_{nlm} = - \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi v'(z_{\text{CM}, w} + R \cos \theta + u_z(R, \theta, \varphi)) \{ \nu \tilde{u}_{x,nlm}^{(S)}(R, \theta, \varphi) + \tilde{u}_{z,nlm}^{(S)}(R, \theta, \varphi) \} \quad (\text{L.4})$$

のように得られる。

図 L.1 は温度 0、散逸 0、引力あり $g = 1$ 、摩擦係数 $\nu = 0.5$ 、カットオフ周波数 $\omega_{\text{cut}} = 25c^{(t)}/R_1$ で、低速衝突 $v_{\text{CM}}(0) = 0.01c^{(t)}$ の場合における励起エネルギーを

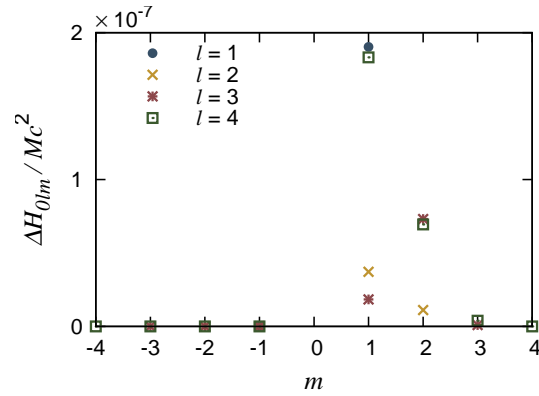


図 L.1: スピン球衝突における励起エネルギー．球表面の凹凸をクーロン摩擦の法則 (L.1) でモデル化している．横軸は方位角モード数 m で， $l \leq 4$ のモードをプロットしている．ただし， $m = 0$ は無視している． $m \neq 0$ が励起されていることがわかる．温度 0，散逸 0，引力あり $g = 1$ ，摩擦係数 $\nu = 0.5$ ，カットオフ周波数 $\omega_{\text{cut}} = 25c^{(t)}/R_1$ で，低速衝突 $v_{\text{CM}}(0) = 0.01c^{(t)}$ の場合である．

示したものである．横軸は方位角モード数 m で， $l \leq 4$ のモードをプロットしている．ただし， $m = 0$ は無視している． $m \neq 0$ が励起されていることがわかる．なお，である．

本来であればスピンによりトロイダルモードが強く励起されるはずである．しかし，本フレームワークではスフェロイダルモードとトロイダルモードを同時に扱うことができないため，トロイダルモードの励起を記述できない (2.2 節参照)．この問題を解決するためには次の付録で示すアプローチをとる必要がある．

付録M 境界条件により接触力を取り扱うモデル

2.2節で説明したとおり，本モデルの基礎方程式(2.7)では自由端境界条件を仮定しているため，スフェロイダルモードとトロイダルモードを同時に扱うことができない．そのためL節で扱った摩擦を伴うスピン球衝突のような，両モードとも励起される場合を正確に記述することができない．この問題を解消するためには接触力を考慮した境界条件の下で波動方程式(A.8)を解く必要がある．ここではその取り扱いについて考察する．簡単のため，散逸 γ は0，また接触力は斥力のみとする．

L節と同様に摩擦を伴うスピン球の正面衝突を考える．衝突により球表面に z 方向の圧力 $-p_z(R_i, \theta_i, \varphi_i; z_{\text{CM}})$ が働く（図2.1のように球によって向きの異なる軸をとっている）．また，ここでは y 軸反時計回りにスピンしているとし， x 方向にクーロン摩擦力 $-\nu p_z(R_i, \theta_i, \varphi_i; z_{\text{CM}})$ が働く．このとき，接触半径 a （接触により生じる平面の半径）が半径 R_i と比べ十分に小さければ，球表面における応力は

$$\begin{aligned}\sigma_{rr}(R_i, \theta_i, \varphi_i) &= \begin{cases} -p_z(R_i, \theta_i, \varphi_i; z_{\text{CM}}) & 0 \leq \theta \leq \frac{a}{R_i} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \\ \sigma_{\theta r}(R_i, \theta_i, \varphi_i) &= \nu \sigma_{rr}(R_i, \theta_i, \varphi_i) \\ \sigma_{\varphi r}(R_i, \theta_i, \varphi_i) &= 0 \end{aligned} \quad (\text{M.1})$$

で与えられる [201].

これより先に進むには圧力の表式を得る必要がある．ここでは準静的な場合に対する表式 [52, 57]

$$p_z(\rho_i) = \frac{3F_{\text{H}}}{2\pi a^2} \sqrt{1 - \left(\frac{\rho_i}{a}\right)^2} \quad (\text{M.2})$$

で与えられると仮定する．ここで $F_{\text{H}} = 4Y_{\text{eff}}a^3/3R_{\text{eff}}$ ， $\rho_i \simeq R_i\theta_i$ である．このとき接触半径は $a = \sqrt{R_{\text{eff}}(R_1 + R_2 - z_{\text{CM}})}$ となる．

圧力(M.2)式が軸対称であるため，動径方向の応力 $\sigma_{rr}(R_i, \theta_i, \varphi_i)$ をルジャンドル多項式 $P_\ell(\cos \theta_i)$ を使って

$$\sigma_{rr}(R_i, \theta_i, \varphi_i) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} c_\ell^{(r)}(R_i, z_{\text{CM}}) P_\ell(\cos \theta_i) \quad (\text{M.3})$$

と展開する．展開係数 $c_\ell^{(r)}(R_i, z_{\text{CM}})$ は

$$c_\ell^{(r)}(R_i, z_{\text{CM}}) = -\sqrt{\pi(2\ell+1)} \int_0^{a/R_i} d\theta \sin\theta P_\ell(\cos\theta) p_z(R_i\theta; z_{\text{CM}}) \quad (\text{M.4})$$

で与えられる．一方，方位角方向の応力 $\sigma_{\theta r}(R_i, \theta_i, \varphi_i)$ はルジャンドル多項式の微分 $dP_\ell(\cos\theta_i)/d\theta_i$ により

$$\sigma_{\theta r}(R_i, \theta_i, \varphi_i) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} c_\ell^{(\theta)}(R_i, z_{\text{CM}}) \frac{dP_\ell(\cos\theta_i)}{d\theta_i} \quad (\text{M.5})$$

と展開する．展開係数 $c_\ell^{(\theta)}(R_i, z_{\text{CM}})$ は

$$\int_0^\pi d\theta \sin\theta \frac{dP_\ell(\cos\theta)}{d\theta} \frac{dP_{\ell'}(\cos\theta)}{d\theta} = \frac{2\ell(\ell+1)}{2\ell+1} \delta_{\ell\ell'} \quad (\text{M.6})$$

より

$$c_\ell^{(\theta)}(R_i, z_{\text{CM}}) = -\nu \frac{\sqrt{\pi(2\ell+1)}}{\ell(\ell+1)} \int_0^{a/R_i} d\theta \sin\theta \frac{dP_\ell(\cos\theta)}{d\theta} p_z(R_i\theta; z_{\text{CM}}) \quad (\text{M.7})$$

となる．

$$r \nabla Y_{\ell 0} = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \frac{dP_\ell(\cos\theta)}{d\theta} \mathbf{e}_\theta \quad (\text{M.8})$$

$$\mathbf{e}_r \times r \nabla Y_{\ell 0} = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \frac{dP_\ell(\cos\theta)}{d\theta} \mathbf{e}_\varphi \quad (\text{M.9})$$

に注意して，軸対称 $m=0$ における球表面の応力の表式 (B.13) を等式 (M.3) と (M.5) の左辺に代入し，両辺を比べると

$$\mathbf{A} \begin{pmatrix} (k_{i,n\ell}^{(\ell)})^2 B_{i,n\ell m}^{(0)} \\ (k_{i,n\ell}^{(t)})^2 B_{i,n\ell m}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_\ell^{(r)}(R_i, z_{\text{CM}})/\mu_i \\ c_\ell^{(\theta)}(R_i, z_{\text{CM}})/\mu_i \end{pmatrix} \quad (\text{M.10})$$

$$b_{n\ell} \left(k_{i,n\ell}^{(t)} R_i \right) B_{i,n\ell m}^{(1)} = 0 \quad (\text{M.11})$$

が得られる．ここで

$$\mathbf{A} \equiv \begin{pmatrix} a_{n\ell}(k_{i,n\ell}^{(\ell)} R_i) & \ell(\ell+1) b_{n\ell}(k_{i,n\ell}^{(t)} R_i) \\ b_{n\ell}(k_{i,n\ell}^{(\ell)} R_i) & d_{n\ell}(k_{i,n\ell}^{(t)} R_i) \end{pmatrix} \quad (\text{M.12})$$

である． $B_{i,n\ell m}^{(1)} \neq 0$ を要請すると等式 (M.11) より $b_{n\ell}(k_{i,n\ell}^{(t)} R_i) = 0$ であり，これにより固有周波数 $\omega_{i,n\ell}$ が決定される．係数 $B_{i,n\ell m}^{(0)}$ および $B_{i,n\ell m}^{(2)}$ は等式 (M.10) によって， $B_{i,n\ell m}^{(1)}$ は等式 (B.21) と同様の規格化条件によって決定される．これらは

重心位置 z_{CM} に依存する．すなわち，固有状態は衝突によって変化する．このとき波動方程式 (A.8) を固有状態 $\tilde{\mathbf{u}}_{i,nlm}(\mathbf{x}_i; z_{\text{CM}})$ を使って展開すれば

$$\begin{aligned} \ddot{Q}_{i,nlm} + \sum_{n'\ell'm'} \left[2 \langle \tilde{\mathbf{u}}_{i,nlm}(z_{\text{CM}}) | \tilde{\mathbf{u}}'_{i,n'\ell'm'}(z_{\text{CM}}) \rangle \dot{z}_{\text{CM}} \dot{Q}_{i,n'\ell'm'} \right. \\ \left. + \langle \tilde{\mathbf{u}}_{i,nlm}(z_{\text{CM}}) | \tilde{\mathbf{u}}'_{i,n'\ell'm'}(z_{\text{CM}}) \rangle \ddot{z}_{\text{CM}} Q_{i,n'\ell'm'} \right. \\ \left. + \langle \tilde{\mathbf{u}}_{i,nlm}(z_{\text{CM}}) | \tilde{\mathbf{u}}''_{i,n'\ell'm'}(z_{\text{CM}}) \rangle \dot{z}_{\text{CM}}^2 Q_{i,n'\ell'm'} \right] \\ = -\{\omega_{i,nl}(z_{\text{CM}})\}^2 Q_{i,nlm} \end{aligned} \quad (\text{M.13})$$

となる．ここで

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\mathbf{u}}_{i,nlm}(z_{\text{CM}}) | \tilde{\mathbf{u}}'_{i,n'\ell'm'}(z_{\text{CM}}) \rangle \equiv \frac{3}{4\pi R_i^3} \int_0^R dr r^2 \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \\ \tilde{\mathbf{u}}_{i,nlm}(\mathbf{x}; z_{\text{CM}}) \cdot \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}'_{i,n'\ell'm'}(\mathbf{x}; z_{\text{CM}})}{\partial z_{\text{CM}}} \end{aligned} \quad (\text{M.14})$$

である．一方，重心運動はヘルツの接触力 F_{H} によって決まるが，弾性振動の影響を取り入れるために

$$M_{\text{eff}} \ddot{z}_{\text{CM}} = \frac{4Y_{\text{eff}} \sqrt{R_{\text{eff}}}}{3} \{-u_{z1}(R_1, 0, 0; z_{\text{CM}}) - u_{z2}(R_2, 0, 0; z_{\text{CM}})\}^{3/2} \quad (\text{M.15})$$

のように表されると仮定する．等式 (M.13) と (M.15) が基礎方程式であり，これらを連立して解けばよい．ただし，係数 $B_{i,nlm}^{(0)}$, $B_{i,nlm}^{(1)}$, $B_{i,nlm}^{(2)}$ の重心位置依存性については，準静的な圧力分布 (M.2) を用いる今のフレームワークにおいては，等式 (M.15) の代わりに準静理論

$$M_{\text{eff}} \ddot{z}_{\text{CM}}^{(\text{qs})} = \frac{4Y_{\text{eff}} \sqrt{R_{\text{eff}}}}{3} (R_1 + R_2 - z_{\text{CM}}^{(\text{qs})})^{3/2} \quad (\text{M.16})$$

によって決まる重心位置 $z_{\text{CM}}^{(\text{qs})}$ を用いて決めればよい．

このモデルによるシミュレーションは未だ行われていない．

関連図書

- [1] H. J. Herrmann, J.-P. Hovi, and S. Luding, editors, *Physics of Dry Granular Media* (Kluwer, Dordrecht, 1998).
- [2] H. Hinrichsen and D. Wolf, editors, *The Physics of Granular Media* (Wiley-VCH, Berlin, 2004).
- [3] N. T. Bridges *et al.*, *Nature* **485**, 339 (2012).
- [4] P. Senthil Kumar *et al.*, *Journal of Geophysical Research (Planets)* **118**, 206 (2013).
- [5] S. J. Weidenschilling, *Icarus* **44**, 172 (1980).
- [6] Y. Nakagawa, K. Nakazawa, and C. Hayashi, *Icarus* **45**, 517 (1981).
- [7] H. Tanaka, Y. Himeno, and S. Ida, *Astrophys. J.* **625**, 414 (2005).
- [8] C. P. Dullemond and C. Dominik, *Astronomy & Astrophysics* **434**, 971 (2005).
- [9] F. Brauer, C. P. Dullemond, and T. Henning, *Astronomy & Astrophysics* **480**, 859 (2008).
- [10] Kataoka, A., Tanaka, H., Okuzumi, S., and Wada, K., *Astronomy & Astrophysics* **554**, A4 (2013).
- [11] Kataoka, Akimasa, Tanaka, Hidekazu, Okuzumi, Satoshi, and Wada, Koji, *Astronomy & Astrophysics* **557**, L4 (2013).
- [12] A. Castellanos, *Adv. Phys.* **54**, 263 (2005).
- [13] J. Tomas, *Chem. Eng. Sci.* **62**, 1997 (2007).
- [14] J. Tomas, *Chem. Eng. Sci.* **62**, 5925 (2007).
- [15] R. Tykhoniuk *et al.*, *Chem. Eng. Sci.* **62**, 2843 (2007).

- [16] A. Bertram and J. Tomas, *Micro-Macro-Interactions in Structured Media and Particle Systems* (Springer-Verlag, Berlin and Heidelberg, 2008).
- [17] B. J. Ennis, J. Green, and R. Davies, *Chemical Engineering Progress* **90**, 32 (1994), ID: 199559831.
- [18] T. M. Knowlton, J. W. Carson, G. E. Klinzing, and W.-C. Yang, *Chemical Engineering Progress* **90**, 44 (1994), ID: 199559849.
- [19] H. M. Jaeger and S. R. Nagel, *Science* **255**, 1523 (1992).
- [20] R. P. Behringer, *Nonlinear Science Today* **3**, 1 (1993).
- [21] D. Bideau and J. Dodds, editors, *Physics of Granular Media* Les Houches Series (Nova Science Publishers, 1991).
- [22] D. Bideau and A. Hansen, editors, *Disorder and Granular Media* Random Materials and Processes Series (North Holland, New York, 1993).
- [23] H. M. Jaeger, J. B. Knight, C. H. Liu, and S. R. Nagel, *Materials Research Society Bulletin* **19**, 25 (1994).
- [24] A. Mehta, editor, *Granular Matter: An Interdisciplinary Approach* (Springer, New York, 1994).
- [25] A. Mehta and G. C. Barker, *Reports on Progress in Physics* **57**, 383 (1994).
- [26] R. P. Behringer, *MRS Proceedings* **367** (1994).
- [27] H. Hayakawa, H. Nishimori, S. Sasa, and Y. h. Taguchi Y-h. Taguchi, *Japanese Journal of Applied Physics* **34**, 397 (1995).
- [28] H. M. Jaeger, S. R. Nagel, and R. P. Behringer, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 1259 (1996).
- [29] S. Douady, S. Fauve, and C. Laroche, *EPL (Europhysics Letters)* **8**, 621 (1989).
- [30] S. Fauve, S. Douady, and C. Laroche, *Journal de Physique Colloques* **50**, C3 (1989), ID: jpa-00229469, version 1.
- [31] O. Zik and J. Stavans, *EPL (Europhysics Letters)* **16**, 255 (1991).
- [32] F. Melo, P. Umbanhowar, and H. L. Swinney, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 172 (1994).

- [33] H. K. Pak and R. P. Behringer, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1832 (1993).
- [34] H. K. Pak and P. R. Behringer, *Nature* **371**, 231 (1994).
- [35] F. Melo, P. B. Umbanhowar, and H. L. Swinney, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3838 (1995).
- [36] H. K. Pak, E. Van Doorn, and R. P. Behringer, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4643 (1995).
- [37] I. Goldhirsch and G. Zanetti, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1619 (1993).
- [38] I. Goldhirsch, M.-L. Tan, and G. Zanetti, *Journal of Scientific Computing* **8**, 1 (1993).
- [39] S. McNamara, *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics (1989-1993)* **5**, 3056 (1993).
- [40] S. McNamara and W. R. Young, *Phys. Rev. E* **53**, 5089 (1996).
- [41] J. W. P. Schmelzer, *Nucleation theory and applications* (JINR, Dubna, 1999).
- [42] I. Goldhirsch, *Annual Review of Fluid Mechanics* **35**, 267 (2003).
- [43] N. Brilliantov, C. Salueña, T. Schwager, and T. Pöschel, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 134301 (2004).
- [44] N. Brilliantov and T. Pöschel, *Kinetic Theory of Granular Gases* Oxford Graduate Texts (Oxford University Press, 2004).
- [45] M. E. Lasinski, J. S. Curtis, and J. F. Pekny, *Physics of Fluids (1994-present)* **16**, 265 (2004).
- [46] S. L. Conway and B. J. Glasser, *Physics of Fluids (1994-present)* **16**, 509 (2004).
- [47] K. Saitoh and H. Hayakawa, *Phys. Rev. E* **75**, 021302 (2007).
- [48] S. R. Waitukaitis, H. F. Grütjen, J. R. Royer, and H. M. Jaeger, *Phys. Rev. E* **83**, 051302 (2011).
- [49] M. Alam and P. Shukla, *Journal of Fluid Mechanics* **716**, 349 (2013).
- [50] M. Shukla, Priyank Astronomy & Astrophysicslam, *Journal of Fluid Mechanics* **718**, 131 (2013).
- [51] S. McNamara and W. R. Young, *Phys. Rev. E* **50**, R28 (1994).

- [52] H. Hertz, *J. Reine Angew. Math.* **92** (1882).
- [53] K. L. Johnson, *Contact Mechanics* (Cambridge University Press, 1985).
- [54] G. Kuwabara and K. Kono, *Jpn. J. Appl. Phys.* **26**, 1230 (1987).
- [55] N. V. Brilliantov, F. Spahn, J.-M. Hertzsch, and T. Pöschel, *Phys. Rev. E* **53**, 5382 (1996).
- [56] W. A. M. Morgado and I. Oppenheim, *Phys. Rev. E* **55**, 1940 (1997).
- [57] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Theory of Elasticity* (Pergamon, New York, 1959).
- [58] K. L. Johnson, K. Kendall, and A. D. Roberts, *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* **324**, 301 (1971).
- [59] N. V. Brilliantov, N. Albers, F. Spahn, and T. Pöschel, *Phys. Rev. E* **76**, 051302 (2007).
- [60] S. T. Thornton and J. B. Marion, *Classical dynamics of particles and systems* (Brooks/Cole, Belmont, CA, 2004), Includes bibliographical references (p. 628-632) and index.
- [61] F. G. Bridges, A. Hatzes, and D. N. C. Lin, *Nature (London)* **309**, 333 (1984).
- [62] W. Goldsmith, *Impact : the theory and physical behaviour of colliding solids* (Arnold, London, 1960), Bibliography: p. 342-369; Includes indexes.
- [63] P. Müller, M. Heckel, A. Sack, and T. Pöschel, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 254301 (2013).
- [64] J. Blum, Grain Growth and Coagulation, in *Astrophysics of Dust*, edited by A. N. Witt, G. C. Clayton, and B. T. Draine, , Astronomical Society of the Pacific Conference Series Vol. 309, p. 369, 2004.
- [65] C. W. Ormel, M. Spaans, and A. G. G. M. Tielens, *Astronomy & Astrophysics* **461**, 215 (2007).
- [66] Zsom, A., Ormel, C. W., Güttler, C., Blum, J., and Dullemond, C. P., *Astronomy & Astrophysics* **513**, A57 (2010).
- [67] S. Okuzumi, H. Tanaka, H. Kobayashi, and K. Wada, *The Astrophysical Journal* **752**, 106 (2012).

- [68] G. L. Hornyak, H. Tibbals, J. Dutta, and J. J. Moore, *Introduction to Nanoscience and Nanotechnology* (CRC Press, 2008).
- [69] M. Bruchez, M. Moronne, P. Gin, S. Weiss, and A. P. Alivisatos, *Science* **281**, 2013 (1998).
- [70] W. C. W. Chan and S. Nie, *Science* **281**, 2016 (1998).
- [71] S. Wang, N. Mamedova, N. A. Kotov, W. Chen, and J. Studer, *Nano Lett.* **2**, 817 (2002).
- [72] A. P. Alivisatos *et al.*, *Nature* (London) **382**, 609 (1996).
- [73] C. A. Mirkin, R. L. Letsinger, R. C. Mucic, and J. J. Storhoff, *Nature* (London) **382**, 607 (1996).
- [74] A. P. Alivisatos, *Sci. Am. (Int. Ed.)* **285**, 66 (2001).
- [75] C. Mah *et al.*, *Mol. Therapy* **1**, S239 (2000).
- [76] D. Pantarotto *et al.*, *Chem. Bio.* **10**, 961 (2003).
- [77] O. V. Salata, *J. Nanobiotech.* **2**, 3 (2004).
- [78] K. Sattler, J. Mühlbach, and E. Recknagel, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 821 (1980).
- [79] W. A. de Heer, *Rev. Mod. Phys.* **65**, 611 (1993).
- [80] C. Binns, *Surface Science Reports* **44**, 1 (2001).
- [81] K. Wegner, P. Piseri, H. V. Tafreshi, and P. Milani, *Journal of Physics D: Applied Physics* **39**, R439 (2006).
- [82] T. Bachels, H.-J. Güntherodt, and R. Schäfer, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1250 (2000).
- [83] C. B. Murray, C. R. Kagan, and M. G. Bawendi, *Annu. Rev. Mater. Sci.* **30**, 545 (2000).
- [84] T. L. Hill, *Thermodynamics of Small Systems, Parts I and II* (Benjamin, Amsterdam, 1964).
- [85] C. R. Henry, *Surf. Sci. Rep.* **31**, 235 (1998).
- [86] A. S. K. Hashmi and G. J. Hutchings, *Angewandte Chemie International Edition* **45**, 7896 (2006).

- [87] D. J. Gorin and F. D. Toste, *Nature* **446**, 395 (2007).
- [88] Z. Y. Li *et al.*, *Nature* **451**, 46 (2008).
- [89] F. Baletto and R. Ferrando, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 371 (2005).
- [90] A.-H. Lu, E. L. Salabas, and F. Schüth, *Angewandte Chemie International Edition* **46**, 1222 (2007).
- [91] J. Shu *et al.*, *The Journal of Chemical Physics* **124**, (2006).
- [92] H. Bresch *et al.*, *Faraday Discuss.* **137**, 389 (2008).
- [93] C. J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*, 2nd ed. (Cambridge University Press, 2008).
- [94] K. W. Madison, Y. Wang, A. M. Rey, and K. Bongs, editors, *Annual Review of Cold Atoms and Molecules: Volume 1* (World Scientific Publishing Company, 2012).
- [95] J. Gieseler, B. Deutsch, R. Quidant, and L. Novotny, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 103603 (2012).
- [96] T. Fennel *et al.*, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1793 (2010).
- [97] W. Harbich, *Metal Clusters at Surfaces* (Springer, Berlin, 2000).
- [98] V. N. Popok and E. E. B. Campbell, *Reviews on Advanced Materials Science* **11**, 19 (2006).
- [99] J. Jellinek, *Theory of atomic and molecular clusters : with a glimpse at experiments* (Springer, Berlin, 1999), Includes bibliographical references and index.
- [100] 近藤保・市橋正彦, *クラスター入門* (裳華房, 2010).
- [101] K.-H. Müller, *Journal of Applied Physics* **61**, 2516 (1987).
- [102] Y. Yamamura, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* **45**, 707 (1990).
- [103] C. L. Cleveland and U. Landman, *Science* **257**, 355 (1992).
- [104] H. Haberland, Z. Insepov, and M. Moseler, *Phys. Rev. B* **51**, 11061 (1995).
- [105] Y. Guoqing *et al.*, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* **135**, 382 (1998).

- [106] K. Koga and K. Sugawara, *Surface Science* **529**, 23 (2003).
- [107] J. G. Partridge *et al.*, *Nanotechnology* **15**, 1382 (2004).
- [108] M. Matsumoto and S. Nakazawa, *Thermal Science and Engineering* **15**, 55 (2008).
- [109] A. I. Ayesh *et al.*, *Phys. Rev. B* **81**, 195422 (2010).
- [110] B. Wyatt, *Computers & Mathematics with Applications* **28**, 175 (1994).
- [111] M. Svanberg, L. Ming, N. Marković, and J. B. C. Pettersson, *The Journal of Chemical Physics* **108**, 5888 (1998).
- [112] D. Greenspan, *Computers & Mathematics with Applications* **19**, 91 (1990).
- [113] D. Greenspan and L. F. Heath, *Journal of Physics D: Applied Physics* **24**, 2121 (1991).
- [114] L. Ming, N. Marković, M. Svanberg, and J. B. C. Pettersson, *The Journal of Physical Chemistry A* **101**, 4011 (1997).
- [115] M. Kalweit and D. Drikakis, *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience* **1**, 367 (2004-12-10T00:00:00).
- [116] M. Rieber and A. Frohn, *Journal of Aerosol Science* **26**, S929 (1995).
- [117] M. Schelkle and A. Frohn, *Journal of Aerosol Science* **26**, S145 (1995).
- [118] F. Mashayek, N. Ashgriz, W. Minkowycz, and B. Shotorban, *International Journal of Heat and Mass Transfer* **46**, 77 (2003).
- [119] Y. Meleán and L. D. G. Sigalotti, *International Journal of Heat and Mass Transfer* **48**, 4041 (2005).
- [120] Y. Pan and K. Suga, *Physics of Fluids (1994-present)* **17**, (2005).
- [121] H. Tanaka, K. Wada, T. Suyama, and S. Okuzumi, *Prog. of Theor. Phys. Suppl. No.* **195**, 101 (2012).
- [122] F. H. Stillinger and T. A. Weber, *Phys. Rev. B* **31**, 5262 (1985).
- [123] E. Blaisten-Barojas and M. R. Zachariah, *Phys. Rev. B* **45**, 4403 (1992).
- [124] M. R. Zachariah and M. J. Carrier, *Journal of Aerosol Science* **30**, 1139 (1999).

- [125] R. Schmidt, G. Seifert, and H. Lutz, *Physics Letters A* **158**, 231 (1991).
- [126] T. Hawa and M. Zachariah, *Journal of Aerosol Science* **37**, 1 (2006).
- [127] J. Rogan, R. Ramírez, A. Romero, and M. Kiwi, *The European Physical Journal D - Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics* **28**, 219 (2004).
- [128] F. Ercolessi, M. Parrinello, and E. Tosatti, *Philosophical Magazine A* **58**, 213 (1988).
- [129] S. Arcidiacono, N. Bieri, D. Poulikakos, and C. Grigoropoulos, *International Journal of Multiphase Flow* **30**, 979 (2004).
- [130] M. A. Asoro, D. Kovar, Y. Shao-Horn, L. F. Allard, and P. J. Ferreira, *Nanotechnology* **21**, 025701 (2010).
- [131] H. Hsieh, R. S. Averback, H. Sellers, and C. P. Flynn, *Phys. Rev. B* **45**, 4417 (1992).
- [132] X. Kang, L. Wille, H. Dreyssé, and J. Eugène, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* **122**, 339 (1997).
- [133] K. Nordlund, T. Jrvi, K. Meinander, and J. Samela, *Applied Physics A* **91**, 561 (2008).
- [134] Y. Yamamura and T. Muramoto, *Radiat. Eff. Defects Solids* **130-131**, 225 (1994).
- [135] D. J. Kenny, R. E. Palmer, C. F. Sanz-Navarro, and R. Smith, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, 185 (2002).
- [136] J. Samela, K. Nordlund, V. N. Popok, and E. E. B. Campbell, *Phys. Rev. B* **77**, 075309 (2008).
- [137] J. Samela and K. Nordlund, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 027601 (2008).
- [138] M. Châtelet, A. D. Martino, J. Pettersson, F. Pradère, and H. Vach, *Chem. Phys. Lett.* **196**, 563 (1992).
- [139] J. B. C. Pettersson and N. Marković, *Chem. Phys. Lett.* **201**, 421 (1993).
- [140] M. Moseler, O. Rattunde, J. Nordiek, and H. Haberland, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* **164-165**, 522 (2000).

- [141] P. U. Tomsic, AnnAstronomy & Astrophysicsndersson, N. Markovic, W. Piskorz, M. Svanberg, and J. B. C. Pettersson, The Journal of Chemical Physics **115**, 10509 (2001).
- [142] S. Bouneau *et al.*, Phys. Rev. B **65**, 144106 (2002).
- [143] Y. Yamaguchi and J. Gspann, Phys. Rev. B **66**, 155408 (2002).
- [144] A. Tomsic, H. Schröder, K.-L. Kompa, and C. R. Gebhardt, The Journal of Chemical Physics **119**, 6314 (2003).
- [145] R. Krämer, Y. Yamaguchi, and J. Gspann, Surface and Interface Analysis **36**, 148 (2004).
- [146] J. Samela, J. Kotakoski, K. Nordlund, and J. Keinonen, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms **239**, 331 (2005).
- [147] C. S. Xu, H. Cang, D. Montiel, and H. Yang, The Journal of Physical Chemistry C **111**, 32 (2007).
- [148] S. J. Antony, R. Moreno-Atanasio, J. Musadaidzwa, and R. A. Williams, Journal of Nanomaterials **2008** (2008).
- [149] H. P. Cheng and U. Landman, J. Phys. Chem. **98**, 3527 (1994).
- [150] T. T. Järvi, A. Kuronen, K. Meinander, K. Nordlund, and K. Albe, Phys. Rev. B **75**, 115422 (2007).
- [151] P. Valentini and T. Dumitrică, Phys. Rev. B **75**, 224106 (2007).
- [152] K. Saitoh and H. Hayakawa, Prog. Theor. Phys. **122**, 1081 (2009).
- [153] Y. Sakiyama, S. Takagi, and Y. Matsumoto, Phys. Fluids **16**, 1620 (2004).
- [154] D. Kohen, J. C. Tully, and F. H. Stillinger, Surface Science **397**, 225 (1998).
- [155] T. Hawa and M. R. Zachariah, Phys. Rev. B **69**, 035417 (2004).
- [156] T. Hawa and M. R. Zachariah, Phys. Rev. B **71**, 165434 (2005).
- [157] J. Tersoff, Phys. Rev. B **37**, 6991 (1988).
- [158] F. de Brito Mota, J. F. Justo, and A. Fazzio, Journal of Applied Physics **86**, 1843 (1999).
- [159] R. Rurali and E. Hernandez, Computational Materials Science **28**, 85 (2003).

- [160] M. Suri and T. Dumitrică, Phys. Rev. B **78**, 081405 (2008).
- [161] J.-L. Barrat and L. Bocquet, Phys. Rev. Lett. **82**, 4671 (1999).
- [162] A. Awasthi, S. C. Hendy, P. Zoontjens, and S. A. Brown, Phys. Rev. Lett. **97**, 186103 (2006).
- [163] A. Awasthi, S. C. Hendy, P. Zoontjens, S. A. Brown, and F. Natali, Phys. Rev. B **76**, 115437 (2007).
- [164] A. Awasthi, S. Hendy, and S. Brown, Mathematics and Mechanics of Solids **15**, 771 (2010).
- [165] K. Saitoh, A. Bodrova, H. Hayakawa, and N. V. Brilliantov, Phys. Rev. Lett. **105**, 238001 (2010).
- [166] H. Kuninaka and H. Hayakawa, Phys. Rev. E **79**, 031309 (2009), See also Phys. Rev. Focus **23**, 10 (2009).
- [167] L. B. Han, Q. An, S. N. Luo, and W. A. G. III, Material Lett. **64**, 2230 (2010).
- [168] H. Kuninaka and H. Hayakawa, Phys. Rev. E **86**, 051302 (2012).
- [169] D. J. Evans, E. G. D. Cohen, and G. P. Morriss, Phys. Rev. Lett. **71**, 2401 (1993).
- [170] G. Gallavotti and E. G. D. Cohen, Phys. Rev. Lett. **74**, 2694 (1995).
- [171] C. Jarzynski, Phys. Rev. Lett. **78**, 2690 (1997).
- [172] P. Visco, A. Puglisi, A. Barrat, E. Trizac, and F. van Wijland, EPL (Europhysics Letters) **72**, 55 (2005).
- [173] S.-H. Chong, M. Otsuki, and H. Hayakawa, Phys. Rev. E **81**, 041130 (2010).
- [174] S. Joubaud, D. Lohse, and D. van der Meer, Phys. Rev. Lett. **108**, 210604 (2012).
- [175] A. Naert, EPL (Europhysics Letters) **97**, 20010 (2012).
- [176] H. Hayakawa and M. Otsuki, Phys. Rev. E **88**, 032117 (2013).
- [177] H. Tasaki, Fluctuation relation, jarzynski-type equality, and the second law for general collision problems, in *The proceedings of the RIMS workshop "Micro-Macro Duality in Quantum Analysis"*, p. 102, Japan, 2006, No. 1507, RIMS, Kyoto University.

- [178] F. Gerl and A. Zippelius, Phys. Rev. E **59**, 2361 (1999).
- [179] H. Hayakawa and H. Kuninaka, Chem. Eng. Sci. **57**, 239 (2002).
- [180] T. Aspelmeier, *Microscopic models of energy dissipation by internal degrees of freedom in particle collisions*, PhD thesis, Georg-August-Universität Göttingen, 2000, <http://hdl.handle.net/11858/00-1735-0000-0006-B59F-9>.
- [181] H. Kuninaka and H. Hayakawa, Prog. Theor. Phys. Suppl. No. 178, 157 (2009).
- [182] P. J. Steinhardt, D. R. Nelson, and M. Ronchetti, Phys. Rev. B **28**, 784 (1983).
- [183] J. S. van Duijneveldt and D. Frenkel, The Journal of Chemical Physics **96**, 4655 (1992).
- [184] W. Lechner and C. Dellago, The Journal of Chemical Physics **129**, (2008).
- [185] R. Murakami and H. Hayakawa, submitted to Phys. Rev. E (arXiv:1309.095474).
- [186] V. Lebedev, {USSR} Computational Mathematics and Mathematical Physics **15**, 44 (1975).
- [187] V. I. Lebedev and D. N. Laikov, Doklady Mathematics **59**, 477 (1999).
- [188] P. M. Agrawal, B. M. Rice, and D. L. Thompson, Surf. Science **515**, 21 (2002).
- [189] J. N. Israelachvili, *Intermolecular and Surface Forces*, 3rd ed. (Academic Press, London, 2011).
- [190] D. J. Evans and D. J. Searles, Advances in Physics **51**, 1529 (2002).
- [191] W. Thomson, Trans. Roy. Soc. **20**, 261 (1853).
- [192] W. Thomson, Phil. Mag. **5**, 4 (1878).
- [193] M. Y. Louge and M. E. Adams, Phys. Rev. E **65**, 021303 (2002).
- [194] H. Kuninaka and H. Hayakawa, Phys. Rev. Lett. **93**, 154301 (2004).
- [195] H. Hayakawa and H. Kuninaka, Phase Transitions **77**, 889 (2004).
- [196] C. Shen *et al.*, Nat. Phys. **8**, 923 (2012).

- [197] P. Müller, D. Krenzel, and T. Pöschel, *Phys. Rev. E* **85**, 041306 (2012).
- [198] S. Luding, *Granular Matter* **10**, 235 (2008).
- [199] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Fluid Mechanics* (Pergamon, New York, 1959).
- [200] L. Rayleigh, *Philosophical Magazine Series 6* **11**, 283 (1906).
- [201] J. Tian, H. Ogi, and M. Hirao, *Journal of Applied Physics* **95**, 8366 (2004).