

二维有摩擦颗粒体系振动态密度与玻色峰的研究

牛晓娜 张国华 孙其诚 赵雪丹 董远湘

Vibrational density of states and boson peak in two-dimensional frictional granular assemblies

Niu Xiao-Na Zhang Guo-Hua Sun Qi-Cheng Zhao Xue-Dan Dong Yuan-Xiang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 036301 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.036301

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.036301>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I3>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

双分散颗粒体系在临界堵塞态的结构特征

[Structural features of critical jammed state in bi-disperse granular systems](#)

物理学报.2016, 65(2): 024502 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.024502>

垂直载荷下颗粒物质的声波探测和非线性响应

[Acoustic detection and nonlinear response of granular materials under vertical vibrations](#)

物理学报.2016, 65(2): 024501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.024501>

颗粒气体团簇行为实验研究

[Experimental study of clustering behaviors in granular gases](#)

物理学报.2016, 65(1): 014502 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.014502>

玻璃-橡胶混合颗粒的  $\rho$  芯

[Mechanical response study of glass-rubber particle mixtures](#)

物理学报.2015, 64(15): 154502 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.154502>

二维晶格颗粒堆积中侧壁的压力分布与转向系数

[Lateral pressure distribution and steering coefficient in two-dimensional lattice pile of granular material](#)

物理学报.2015, 64(13): 134502 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.134502>

## 二维有摩擦颗粒体系振动态密度与玻色峰的研究\*

牛晓娜<sup>1)</sup> 张国华<sup>1)†</sup> 孙其诚<sup>2)‡</sup> 赵雪丹<sup>1)</sup> 董远湘<sup>1)</sup>

1)(北京科技大学物理系, 北京 100083)

2)(清华大学, 水沙科学与水利水电工程国家重点实验室, 北京 100084)

(2015年6月12日收到; 2015年11月5日收到修改稿)

利用颗粒离散元方法, 研究了由2048个有摩擦的单分散圆盘颗粒组成的体系在各向同性压缩条件下, 颗粒摩擦系数 $\mu$ 对颗粒体系结构与振动特性的影响. 结果表明: 固定压强下, 随 $\mu$ 的增大, 区分德拜标度与态密度平台的过渡频率 $\omega^*$ 与玻色峰频率 $\omega_{BP}$ 均向低频移动, 玻色峰高度 $D(\omega_{BP})/\omega_{BP}$ 逐渐增加. 主要原因是 $\mu$ 增大导致颗粒体系无序程度增加(平均配位数减小)而在 $\omega > \omega^*$ 处出现了大量额外模式. 模式分析表明: 低频( $\omega < 1.0$ )模式主要是以平动为主的混合模式, 中频( $1.0 < \omega < 4.0$ )模式主要是以平动为主的混合局域化模式, 高频( $\omega > 4.0$ )振动模式几乎为纯转动的局域化模式; 并且随 $\mu$ 的增大, 低频下平动模式更加局域化, 同时低频转动模式的贡献也逐渐增加, 暗示在高摩擦系数下低频转动模式产生更重要的影响.

关键词: 颗粒物质, 振动态密度, 玻色峰, 模式分析

PACS: 63.50.-x, 45.70.-n, 61.43.-j

DOI: 10.7498/aps.65.036301

## 1 引言

晶体材料的振动态密度随频率的变化呈德拜标度 $D(\omega) \sim \omega^{d-1}$ , 其中 $d$ 为空间维度,  $\omega$ 为振动圆频率. 由于缺乏长程序, 分子玻璃和胶体等非晶体材料的振动态密度不同于晶体材料, 在低频区域出现大量的额外振动模式<sup>[1-7]</sup>, 表现为约化态密度 $D(\omega)/\omega^{d-1} \sim \omega$ 曲线的低频区域出现一个较宽的峰, 即玻色(boson)峰.

迄今为止, 关于无序材料玻色峰的真正起源依然是个难题. 一些研究者将玻色峰的来源归结于局域振动<sup>[8-10]</sup>或者是类局域振动<sup>[11,12]</sup>, Elliot等<sup>[13]</sup>认为玻色峰可能是源于中等长度标度的密度波动而造成的声子散射, Wyart等<sup>[14]</sup>则认为玻色峰的产生本质上是由于大量低频软模式的出现, 而Flores等<sup>[15]</sup>认为刚性晶格中玻色峰的出现主要由

于晶格体系的弱连性所致, 然而对于玻色峰的真正起源仍未达成共识. 近年来, 人们也通过研究玻色峰的影响因素来理解玻色峰的起源. 例如: Zhang等通过数值模拟调节颗粒尺寸分散度来改变体系的无序程度<sup>[16]</sup>; 刘海霞等<sup>[7]</sup>通过实验调制两种不同粒径的温敏性水凝胶的数量来改变体系无序程度. 研究结果都表明随体系无序程度增加, 玻色峰增高、峰值移向低频, 暗示体系无序程度可能是导致玻色峰形成的一个重要原因. Leonforte<sup>[17]</sup>通过对石英玻璃施加不同的液体静压力, Premkumar和Das<sup>[18]</sup>在无序固体中利用经典的密度泛函模型数值计算, 都发现随压力的增大玻色峰高度降低、玻色峰频率向高频移动, 意味着压力对体系玻色峰的形成有重要的影响.

颗粒体系是一种典型的无序系统<sup>[19]</sup>, 其振动态密度表现出与非晶体材料相似的行为. 例如: 存

\* 国家自然科学基金(批准号: 11272048, 51239006)和欧盟 Marie Curie 国际合作项目(批准号: IRSES-294976)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhguohua@sas.ustb.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: qcsun@tsinghua.edu.cn

在大量低频软模式、玻色峰及局域化模式等<sup>[6,16]</sup>; 颗粒体系振动态密度存在一个区分德拜标度和态密度平台的过渡频率 $\omega^*$ <sup>[20]</sup>, 并且 $\omega^*$ 与体系颗粒额外接触数 $\Delta z = z - z_{\text{iso}}^\mu$ 的关系为:  $\omega^* \sim \Delta z$ <sup>[21]</sup>, 其中,  $z_{\text{iso}}^\mu$ 为颗粒体系等静态配位数.  $\mu = 0$ 时,  $z_{\text{iso}}^0 = 2d$ <sup>[22]</sup>;  $\mu \rightarrow \infty$ 时,  $z_{\text{iso}}^\mu = d + 1$ <sup>[23]</sup>. 迄今为止, 人们对颗粒体系振动态密度已经进行了大量的研究, 但是关于摩擦对二维有摩擦颗粒体系玻色峰及其振动模式的影响研究还很缺乏. 本文采用颗粒离散元方法 (DEM) 模拟生成了特定压强下由 2048 个二维单分散有摩擦圆盘颗粒组成的系统. 对于每个摩擦系数, 分别随机生成了 100 个等压强的构型. 本文所涉及到的物理量都是这 100 个构型的统计平均值, 颗粒摩擦系数 $\mu$ 的取值分别为: 0.001, 0.01, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0. 通过改变颗粒摩擦系数的大小研究了体系振动态密度、玻色峰等的演化规律, 并进一步分析了摩擦系数 $\mu$ 对二维有摩擦颗粒体系振动特性的影响.

## 2 数值模拟

本文研究的二维有摩擦颗粒系统是由在边长为 $L$ 具有周期性边界的正方形盒子中随机放置了 2048 个质量相同的有摩擦单分散圆盘颗粒组成的, 不考虑重力的影响. 体系偏离平衡构型所导致总接触势能的增加为

$$\delta V = \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ k_n (\delta \mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{n}}) - \frac{f_n}{r^0} (\delta \mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{t}})^2 + k_t \delta t^2 \right], \quad (1)$$

其中,  $\delta \mathbf{r}$ 为两颗粒间的相对位移 ( $\delta \mathbf{r} = \delta \mathbf{r}_i - \delta \mathbf{r}_j$ ,  $\delta \mathbf{r}_i$ 与 $\delta \mathbf{r}_j$ 分别为颗粒 $i$ 与颗粒 $j$ 的质心位移);  $f_n$ 为两颗粒间的法向作用力;  $r^0$ 为平衡时两颗粒中心距离;  $\delta t$ 为两颗粒接触点的切向位移 ( $\delta t = (\delta \mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{t}}) - (R_i \delta \alpha_i + R_j \delta \alpha_j)$ ,  $\delta \alpha_i$ 与 $\delta \alpha_j$ 分别为颗粒 $i$ 与颗粒 $j$ 转动的角度,  $R_i$ 与 $R_j$ 分别为颗粒 $i$ 与颗粒 $j$ 的半径);  $\hat{\mathbf{n}}$ 为法向单位矢量 (即由颗粒 $i$ 中心指向颗粒 $j$ 中心的单位矢量);  $\hat{\mathbf{t}}$ 为切向单位矢量 (即垂直于 $\hat{\mathbf{n}}$ 的单位矢量);  $k_n$ 与 $k_t$ 分别为颗粒法向和切向接触刚度系数, 为了突出切向刚度对颗粒体系的贡献, 本文取 $k_n/k_t = 1.0$ . 无热颗粒体系 ( $T = 0$ ) 的具体制备协议如下: 首先, 在一个边长为 $L$ 具有周期性边界的正方形区域中随机生成

2048 个粒径很小速度为零的单分散有摩擦圆盘颗粒. 接着, 一步增大颗粒半径至体系体积分数达到某一固定值 ( $T = \infty$ ). 然后, 采用共轭梯度能量最小化 (conjugate-gradient energy minimization) 方法<sup>[24]</sup>使体系达到一个趋于局部能量极小的亚稳态, 此时可认为体系稳定且是无热的 ( $T = 0$ )<sup>[25]</sup>. 最后通过逐渐减小颗粒半径的方法进行卸载, 每卸载一步记录一次体系压强, 直至体系压强与目标压强差值的绝对值小于  $2.0 \times 10^{-8}$ . 体系振动模式及振动态密度可通过求解下列久期方程来实现:

$$|\mathbf{F} - \omega^2 \mathbf{I}| = 0, \quad (2)$$

其中,  $\mathbf{F}$ 为 Hessian 矩阵,

$$F_{ij} = \frac{H_{ij}}{\sqrt{M_i M_j}}, \quad H_{ij} = \frac{\partial^2 \delta V}{\partial \delta r_i \partial r_j},$$

$M_i$  ( $M_j$ ) 代表颗粒 $i$  ( $j$ ) 的质量  $m_i$  ( $m_j$ ) 或者颗粒 $i$  ( $j$ ) 的转动惯量  $I_i$  ( $I_j$ )<sup>[26]</sup>,  $\delta V$  代表体系偏离平衡构型时颗粒间总接触势的增加量 ((1) 式),  $\delta r_i$  和  $\delta r_j$  分别代表颗粒 $i$  与颗粒 $j$  质心位移. 值得注意的是, 采用短程线性弹簧势将导致 Hessian 矩阵元  $H_{ij}$  的不连续性, 并且在 Jammed 颗粒系统中会显示出其固有的非谐波性<sup>[27]</sup>. 通过对角化每个稳定位形的 Hessian 矩阵可以得到相应的特征值与特征向量, 其特征值是振动圆频率 $\omega$ 的平方, 特征向量是相应圆频率下每个颗粒的极化矢量. 本文分别取  $\sigma = R_i + R_j$ ,  $m$  和  $2\pi\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2}$  (其中,  $\varepsilon = \frac{1}{2}k_n(R_i + R_j)^2$  为特征能量) 为长度、质量和振动圆频率的单位, 文中不同摩擦系数对应的颗粒体系压强均为  $P = 2.0 \times 10^{-3}$ .

## 3 结果与分析

### 3.1 态密度

利用 Hessian 矩阵方法得到不同摩擦系数 $\mu$ 的体系振动态密度  $D(\omega)$ - $\omega$  曲线, 如图 1 (a) 所示. 可以看出, 固定压强下, 不同摩擦系数颗粒体系的态密度都存在一个区分德拜标度和态密度平台的过渡频率 $\omega^*$ , 且随着 $\mu$ 的增大, 过渡频率 $\omega^*$ 逐渐向低频方向移动, 如图 1 (a) 中的水平实线所示. 态密度曲线平台的出现表明在  $\omega > \omega^*$  处现了大量超出德拜模型预测的额外模式, 且随着摩擦系数增大上述额外模式逐渐增加, 与文献<sup>[28]</sup>的结果类似.

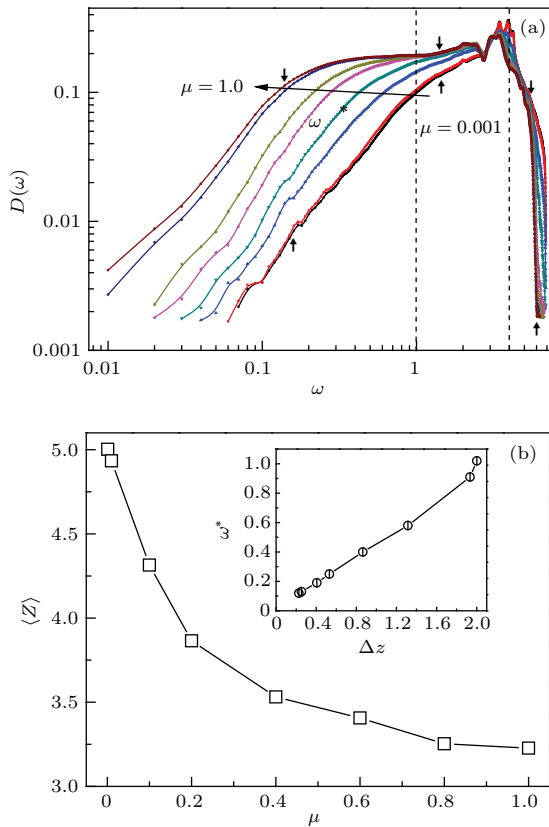


图1 (a) 摩擦系数  $\mu$  不同时, 二维有摩擦颗粒体系的振动态密度  $D(\omega)$ - $\omega$  曲线, 横坐标  $\omega$  为归一化圆频率, 图中沿着箭头方向摩擦系数  $\mu$  逐渐增大, 并且过渡频率  $\omega^*$  逐渐移向低频; (b) 为体系平均配位数  $\langle Z \rangle$  随颗粒摩擦系数  $\mu$  的变化规律, 插图为过渡频率  $\omega^*$  随  $\Delta z = z - 3$  的变化规律

Fig. 1. (a) Density of states as a function of  $\omega$  for two-dimensional granular systems with different friction coefficient  $\mu$ , the scaled angular frequency is normalized, and the crossover frequency  $\omega^*$  shifts towards a lower frequency; (b) the average coordination number  $\langle Z \rangle$  as a function of  $\mu$  in the system; inset: the crossover frequency  $\omega^*$  as a function of  $\Delta z = z - 3$  in the system.

为了从结构角度分析体系振动态密度  $D(\omega)$  随  $\mu$  的变化规律, 我们计算了体系平均配位数  $\langle Z \rangle$  随  $\mu$  的变化曲线, 如图 1(b) 所示. 由图 1(b) 可以看出, 随着  $\mu$  从 0.001 增大到 1.0, 体系平均配位数  $\langle Z \rangle$  由 5.0 逐渐减小至 3.2 左右, 非常接近于二维有摩擦颗粒体系等静态平均配位数  $z_{\text{iso}}^{\mu} = d + 1 = 3$ . 因此, 固定压强下改变颗粒的摩擦系数, 实际上是在调整系统的平均配位数. 为了探索体系的微观结构对过渡频率的影响, 绘制了  $\omega^*$  随体系平均额外接触数  $\Delta z = z - 3$  的变化曲线, 如图 1(b) 中的插图所示. 可以看出  $\omega^* - \Delta z$ , 意味着导致低频下态密度逐渐升高的异常额外模式强烈依赖于体系偏离“临界点”

的距离:  $\Delta z = z - z_{\text{iso}}^{\mu}$ , 亦即  $\Delta z$  越小, 出现的额外模式就越多, 与文献 [21, 29] 的结论一致. 值得注意的是, Xu 等 [3] 通过对模型玻璃体系的研究发现, 尽管玻璃体系平均配位数较大, 但是大部分的额外接触被认为是不牢固的, 因此减小体系体积分数逐渐靠近 J 点时,  $\delta z_1 = (z_1 - z_c)/z_c$  ( $z_1$  为体系中每个颗粒接触最牢固的接触数,  $z_c$  为 J 点时体系平均配位数) 逐渐减小, 并且伴随着大量低频额外振动模式的出现. 意味着在模型玻璃体系中, 额外模式的出现可能与  $\delta z_1$  有关. 另外, 对于  $k_t/k_n = 0.5$  的体系我们也进行了模拟与计算, 得到的结果与图 1 几乎一致 (文中没有给出相应的图).

### 3.2 玻色峰

为了进一步研究摩擦系数对颗粒系统额外模式的影响, 本文计算了不同摩擦系数下体系约化态密度 (the reduced density of states)  $D(\omega)/\omega - \omega$  如图 2 所示. 由图 2 中可以看出, 不同摩擦系数体系的约化态密度曲线均在某个特征频率  $\omega_{\text{BP}}$  处出现一个玻色峰, 表明在此处出现了大量德拜模型无法预测的额外振动模式 [20]. 随着  $\mu$  的增大, 玻色峰高度  $D(\omega_{\text{BP}})/\omega_{\text{BP}}$  不断升高, 且玻色峰频率  $\omega_{\text{BP}}$  不断移向更低的频率处, 意味着玻色峰高度  $D(\omega_{\text{BP}})/\omega_{\text{BP}}$  与频率  $\omega_{\text{BP}}$  强烈依赖于  $\mu$ . 考虑到在压强固定下改变颗粒摩擦系数实质上是改变了体系的平均配位数, 因此摩擦系数对玻色峰的影响实际上对应体系平均配位数对玻色峰的影响. 为了定量研究上述影响, 分别计算了玻色峰高度  $D(\omega_{\text{BP}})/\omega_{\text{BP}}$  及玻色峰频率  $\omega_{\text{BP}}$  随体系平均配位数  $\langle Z \rangle$  的变化曲线, 如图 3 所示. 由图 3 可以看出, 随着体系平均配位数  $\langle Z \rangle$  的增大, 玻色峰高度  $D(\omega_{\text{BP}})/\omega_{\text{BP}}$  逐渐降低, 而玻色峰频率  $\omega_{\text{BP}}$  却逐渐增大. 注意到, 当在固定压强下改变尺寸分散度 [16] 或在相同分散度下改变压强 [30] 会得到类似的结果. 上述结果表明: 固定压强下增大  $\mu$  或增大颗粒尺寸分散度与固定  $\mu$ 、颗粒尺寸分散度减小压强一样, 本质上都减小了颗粒体系的约束数目 ( $\langle z \rangle \rightarrow z_{\text{iso}}^{\mu}$ ), 同时伴随着偏离德拜模型额外模式的增加和玻色峰的升高, 意味着体系约束数目的减小是玻色峰形成的一个很重要的原因. 该结论与 Flores 等 [15] 对于刚性晶格中玻色峰出现的分析——微扰理论一致. 另一方面, 在胶体玻璃体系中, 刘海霞等 [7] 通过实验调制两种不同粒径温敏性水



凝胶的数量来改变体系的无序程度, 结果发现胶体玻璃体系中玻色峰的高度随着无序程度的增加而增加; Chen 等<sup>[31]</sup>发现玻色峰随着体系体积分数的减小而增加, 暗示无序可能是造成颗粒体系和胶体玻璃体系中玻色峰的形成的重要因素.

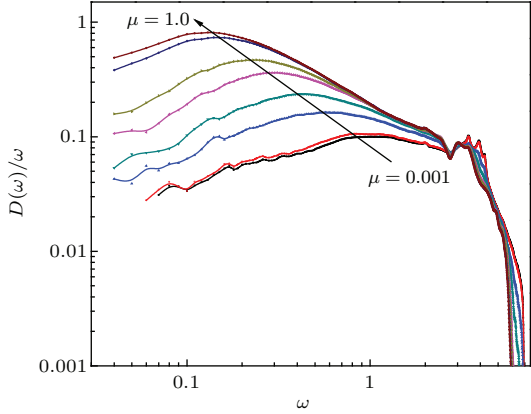


图2 不同颗粒摩擦系数  $\mu$  下二维有摩擦颗粒体系约化态密度  $D(\omega)/\omega-\omega$  曲线, 图中沿着箭头方向摩擦系数依次为:  $\mu = 0.001, 0.01, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$

Fig. 2. Reduce density of states  $D(\omega)/\omega-\omega$  of two-dimensional granular systems with different friction coefficient  $\mu$ , here  $\mu = 0.001, 0.01, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$  (from bottom to top).

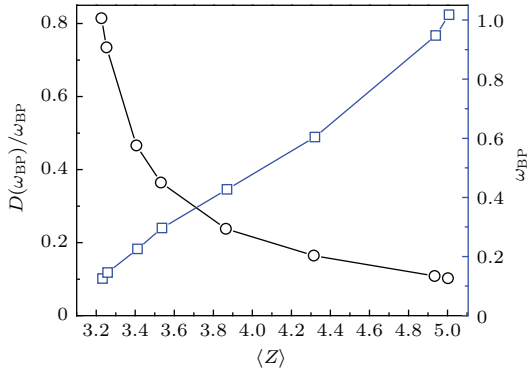


图3 黑色圆点和蓝色方格分别表示玻色峰高度  $D(\omega_{BP})/\omega_{BP}$  与玻色峰频率  $\omega_{BP}$  随体系平均配位数  $\langle Z \rangle$  的变化规律

Fig. 3. The average coordination number  $\langle Z \rangle$  dependence of boson peak intensity  $D(\omega_{BP})/\omega_{BP}$  (black dot) and the position of the boson peak  $\omega_{BP}$  (blue grid).

### 3.3 模式分析

为了定量地探索体系振动模式, 可以通过求解 Hessian 矩阵得到每个振动模式的特征频率  $\omega_n$  及其对应的特征向量  $\mathbf{e}_n = \{e_n^{x,1}, e_n^{y,1}, e_n^{\theta,1}, \dots, e_n^{x,N}, e_n^{y,N}, e_n^{\theta,N}\}$ , 并为了进一步研究体系平移、转动模式的局域化程度以及转动模式的参与程度, 分别计算了各个模式的整体参与

度  $p(\omega)$ 、平移模式参与度  $p_T(\omega)$ 、转动模式参与度  $p_R(\omega)$  及转动模式参与分数  $p_{F,\theta}(\omega_n)$ .

#### 3.3.1 参与度

参与度是一个量化体系振动模式局域化程度的物理量<sup>[20]</sup>, 定义如下:

$$p(\omega_n) = \left( \sum_{i=1,N} |e_n^i|^2 \right)^2 / \left( N \sum_{i=1,N} |e_n^i|^4 \right), \quad (3)$$

其中,  $\mathbf{e}_n^i$  为颗粒  $i$  在第  $n$  个模式下的极化矢量,  $N$  为体系去掉 ratters 之后的颗粒个数. 通常  $p(\omega)$  的取值范围是 0—1.0,  $p(\omega) = 1/N$  对应的是局域化模式,  $p(\omega) = 1.0$  对应的是扩展模式. 图 4(a) 给出了不同摩擦系数体系整体参与度  $p(\omega)$  随角频率  $\omega$  的变化曲线. 由图 4(a) 可以看出: 固定压强下, 不同摩擦系数体系的整体参与度  $p(\omega)$  在  $\omega < 1.0$  的区域 (小于  $\omega^*$  的区域) 均出现一个极小值, 意味着这个区域的模式相比于其他区域更加局域化, 我们称其为准局域化模式. 并且, 随着  $\mu$  的增大, 这些准局域化模式逐渐移向更低频率下, 而在极小值左侧体系整体参与度  $p(\omega)$  逐渐降低, 意味着随  $\mu$  的增大低频模式逐渐由扩展模式变为局域化振动模式. 这可能与在固定压强下随摩擦系数增大体系平均配位数逐渐减小有关. 值得一提的是, 在 Jammed 颗粒体统中, 当系统被进一步压缩或者剪切时, 这些与较低能量势垒相关的准局域化模式最终将由于趋于不稳定而引起系统的局部颗粒重排<sup>[32]</sup>. 并且软胶体晶体系统同样具有这样的特性<sup>[33]</sup>, 暗示准局域化模式的出现可能成为体系具有缺陷的一个标志. 在  $\omega > 1.0$  的区域, 固定  $\mu$  下沿  $\omega$  增大的方向与固定  $\omega$  下增大  $\mu$ , 体系整体参与度  $p(\omega)$  均逐渐降低, 这表明固定压强下, 在高频率与高摩擦系数下, 体系振动模式局域化程度更高.

为了研究有摩擦体系中转动模式与平动模式的局域化程度, 分别计算了不同摩擦系数  $\mu$  下每个振动模式的转动参与度  $p_R(\omega)$  与平动模式参与度  $p_T(\omega)$ ,  $p_R(\omega)$  和  $p_T(\omega)$  的定义如下:

$$p_R(\omega_n) = \left( \sum_{i=1,N} |e_n^{\theta,i}|^2 \right)^2 / \left( N \sum_{i=1,N} |e_n^{\theta,i}|^4 \right), \quad (4)$$

$$p_T(\omega_n) = \left( \sum_{i=1,N} |e_n^{x,y,i}|^2 \right)^2 / \left( N \sum_{i=1,N} |e_n^{x,y,i}|^4 \right), \quad (5)$$

其中,  $e_n^{\theta,i}$  与  $e_n^{x,y,i}$  分别为颗粒  $i$  在第  $n$  个模式下的转动极化矢量与平动极化矢量,  $N$  是体系去掉 ratters 后的颗粒个数. 图 4(b) 显示了不同  $\mu$  下的  $p_R(\omega)$ - $\omega$  曲线. 由图 4(b) 可以看出, 固定压强下, 在  $\omega < 1.0$  区域,  $\mu > 0.01$  体系转动模式参与度  $p_R(\omega)$  随着  $\omega$  的减小而减小, 表明低频转动模式更加局域化; 并且  $\mu > 0.01$  体系的  $p_R(\omega)$  随着  $\mu$  的增大逐渐增大, 暗示增大摩擦系数可以使低频模式局域化程度下降. 值得注意的是:  $\mu = 0.001, 0.01$  体系  $p_R(\omega)$ - $\omega$  曲线在  $\omega = 0.6$  处存在极小值, 在  $\omega < 0.6$  区域  $p_R(\omega)$  随着  $\omega$  的减小而增加, 具体原因还有待于进一步研究. 在  $1.0 < \omega < 2.0$  的区域,  $\mu > 0.1$  体系  $p_R(\omega)$  随  $\omega$  的增大逐渐降低, 但  $\mu = 0.001, 0.01, 0.1$  体系  $p_R(\omega)$  却随  $\omega$  的增大而增大; 而在  $\omega > 2.0$  的区域, 不同摩擦系数体系  $p_R(\omega)$  随  $\omega$  的增大逐渐降低, 并在固定  $\omega$  下, 体系  $p_R(\omega)$  随  $\mu$  的增大同样逐渐降低, 表明频率越大、摩擦越大转动模式越局域化; 但总体来说, 不同摩擦系数体系的转动模式参与度  $p_R(\omega)$  都很低, 几乎都没有超过 0.2, 说明二维有摩擦体系颗粒转动模式局域化程度都很高.

图 4(c) 显示了不同  $\mu$  下的  $p_T(\omega)$ - $\omega$  曲线. 由图 4(c) 可以看出: 与  $p(\omega)$ - $\omega$  曲线类似, 不同摩擦系数体系的  $p_T(\omega)$ - $\omega$  曲线在  $\omega < 1.0$  的区域都存在一个极小值, 且该极小值随着摩擦系数的增大逐渐移向零频, 该结果与文献 [20,32] 的三维无摩擦球体颗粒体系的结果类似. 同样在  $\omega > 1.0$  的区域, 不同摩擦系数体系的  $p_T(\omega)$ - $\omega$  曲线与  $p(\omega)$ - $\omega$  曲线变化几乎一致, 意味着体系平动模式同样在高频率下与高摩擦下更加局域化.

### 3.3.2 转动模式贡献量

为了定量研究每个振动模式中转动模式分量的贡献, 我们计算了转动模式参与分数  $p_{F,\theta}(\omega_n)$ , 如图 4(d) 所示. 其中, 转动模式参与分数  $p_{F,\theta}(\omega_n)$  的定义如下:

$$p_{F,\theta}(\omega_n) = \sum_{i=1,N} (e_n^{\theta,i})^2, \quad (6)$$

通常,  $p_{F,\theta}(\omega_n)$  取值范围为 0—1.0,  $p_{F,\theta}(\omega_n) = 0$  表示转动模式对该振动模式贡献量为零, 即该模式为纯平动模式;  $p_{F,\theta}(\omega_n) = 1.0$  表示该模式为纯转动模式;  $0 < p_{F,\theta}(\omega_n) < 1.0$  说明该振动模式为既有转动模式贡献又有平动模式贡献的混合模式. 由图 4(d) 可以看出, 不同摩擦系数体系的低频区域 ( $\omega < 1.0$ ) 振动模式转动模式贡献量  $p_{F,\theta}(\omega_n)$

都没有超过 0.4, 说明低频下的振动模式是以平动模式贡献为主的混合振动模式; 而在高频区域 ( $\omega > 4.0$ ), 不同摩擦系数体系  $p_{F,\theta}(\omega_n)$  都趋近于 1.0, 说明高频模式几乎为纯转动模式; 在中间频率区域 ( $1.0 < \omega < 4.0$ ), 不同摩擦系数的体系  $0.18 < p_{F,\theta}(\omega_n) < 0.5$ , 说明不同摩擦系数的体系转动模式贡献量随角频率  $\omega$  的增大逐渐增大. 值得注意的是: 随着  $\mu$  的增大, 在  $\omega < 1.0$  的低频区域内转动模式贡献逐渐增大, 暗示在高摩擦系数下转动模式扮演更加重要的角色.

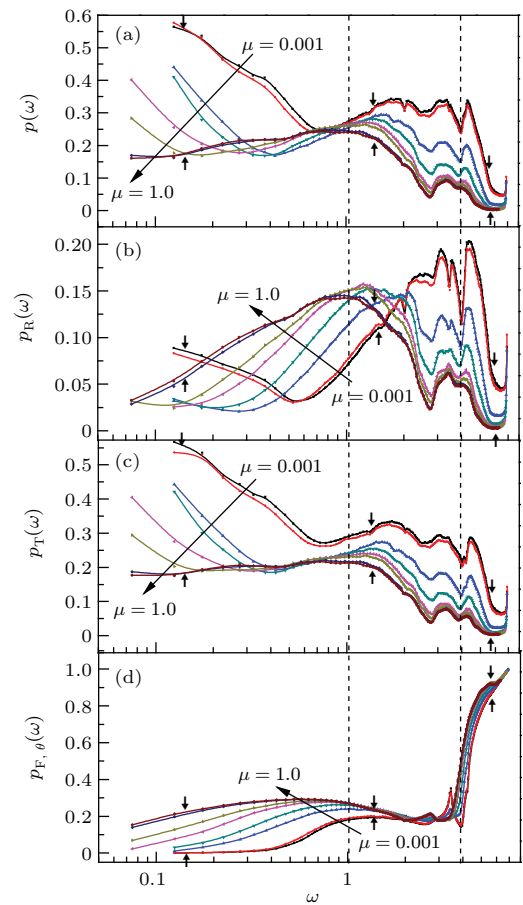


图 4 (a) 体系整体参与度  $p(\omega)$ - $\omega$  随摩擦系数  $\mu$  的变化规律; (b) 体系转动模式参与度  $p_R(\omega)$ - $\omega$  随摩擦系数  $\mu$  的变化规律; (c) 体系平动模式参与度  $p_T(\omega)$ - $\omega$  随  $\mu$  的变化规律; (d) 体系转动模式参与分数  $p_{F,\theta}(\omega)$ - $\omega$  随  $\mu$  的变化规律; 沿着箭头方向颗粒摩擦系数大小依次为:  $\mu = 0.001, 0.01, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$ , 图中数据都是对频率  $\omega$  取宽度  $\text{bin}=0.05$  的统计结果, 频率  $\omega$  为归一化频率

Fig. 4. The friction coefficient  $\mu$  of disks in the system dependence of: (a) Participation ratio versus normalized frequencies of the normal modes; (b) rotational participation ratio; (c) translational participation ratio; (d) rotational participation fraction; here  $\mu = 0.001, 0.01, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$  (from bottom to top), the scaled angular frequency is a statistical result by a narrow  $\text{bin}=0.05$  of frequencies.



### 3.3.3 模式结构分析

为了更加形象化地理解不同频率区域二维有摩擦颗粒体系振动模式的结构特点, 分别在图5(a)—(c)和图5(d)—(f)中绘制了摩擦系数为 $\mu = 0.001$ 与 $\mu = 1.0$ 的体系在三个频率区域中 $\omega_1 = 0.15$ ,  $\omega_2 = 1.5$ 和 $\omega_3 = 6.0$ 模式的极化矢量图. 图5中, 平移模式的极化矢量幅度大小用黑色箭头的长短表示; 转动模式的极化矢量幅度由小到大变化用蓝色到红色表示.

由图5可以看出: 1)  $\mu = 0.001$ 体系中 $\omega_1 = 0.15$ 模式的 $p_{F,\theta} = 0.0007$ ,  $p = 0.55$ , 为平动为主的扩展模式, 如图5(a)所示; 而 $\mu = 1.0$ 的体系中

$\omega_1 = 0.15$ 模式的 $p_{F,\theta} = 0.22$ ,  $p = 0.17$ 为平动为主的局域化模式, 如图5(d)所示, 可见, 固定压强下, 摩擦系数增大导致低频模式更加局域化; 2)  $\mu = 0.001$ 体系( $\mu = 1.0$ 的体系)的 $\omega_2 = 1.5$ 模式的 $p_{F,\theta} = 0.19$  ( $p_{F,\theta} = 0.22$ ),  $p = 0.33$  ( $p = 0.21$ ), 都为以平动为主的混合局域化模式, 如图5(b)和图5(e)所示; 3)  $\mu = 0.001$ 体系( $\mu = 1.0$ 的体系)的 $\omega_3 = 6.0$ 模式的 $p_{F,\theta} = 0.9$  ( $p_{F,\theta} = 0.92$ ),  $p = 0.06$  ( $p = 0.002$ ), 是几乎为纯转动的高度局域化模式, 此时体系中只有少量的颗粒参加平动, 如图5(c)和图5(f)所示.

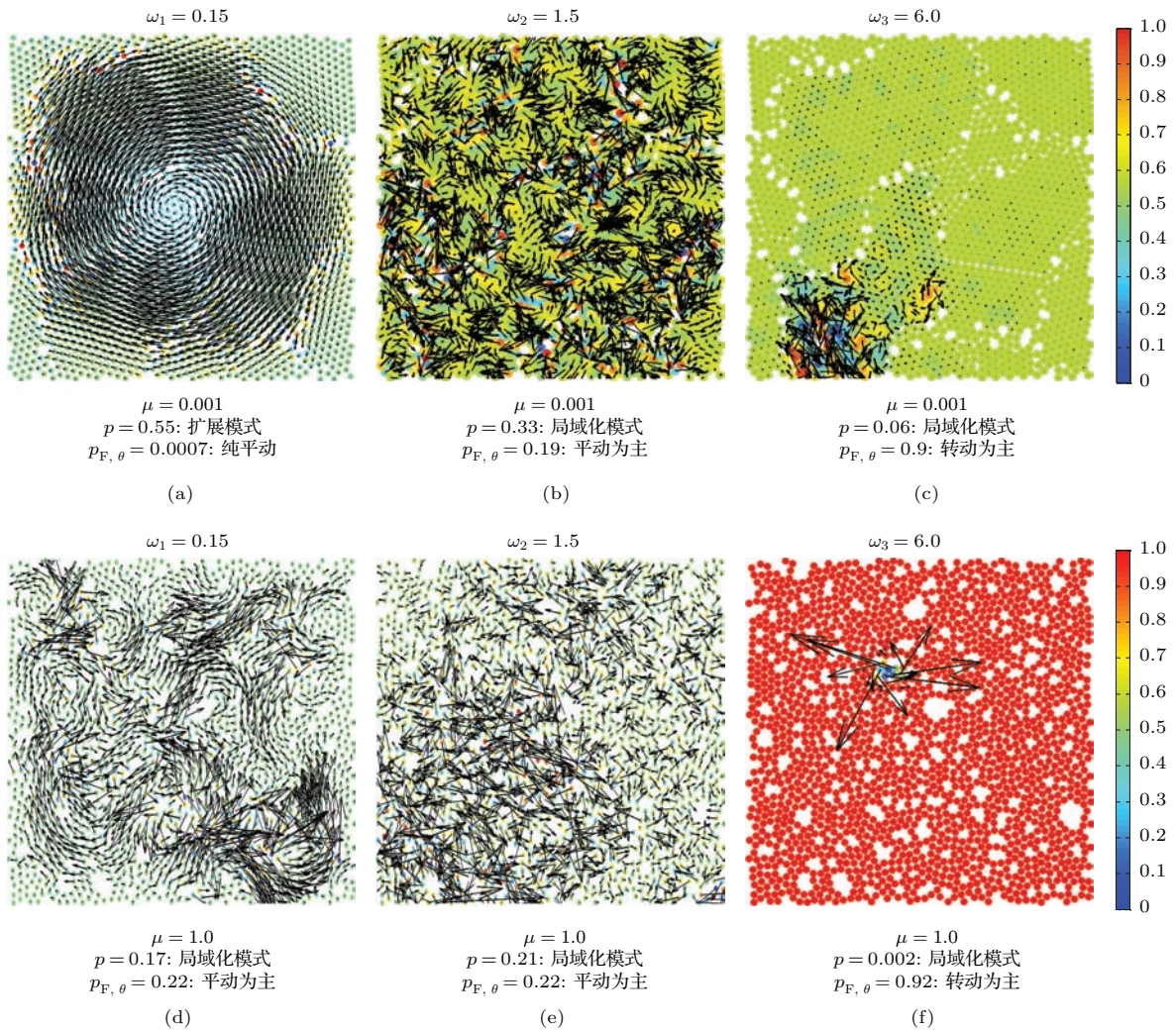


图5 不同摩擦系数体系振动模式的极化矢量分布 (a)—(c)  $\mu = 0.001$ 的体系, 振动模式分别为 (a)  $\omega_1 = 0.15$ , (b)  $\omega_2 = 1.5$ , (c)  $\omega_3 = 6.0$ 的颗粒极化矢量; (d)—(f)  $\mu = 1.0$ 的体系, 振动模式分别为 (d)  $\omega_1 = 0.15$ , (e)  $\omega_2 = 1.5$ , (f)  $\omega_3 = 6.0$ 的颗粒极化矢量; (a)—(f) 每个箭头的大小与其所在位置颗粒的平移幅度成正比, 颗粒的颜色由蓝色到红色表明其所在位置颗粒转动幅度逐渐增大

Fig. 5. Displacement vector plots of eigenmodes at (a), (d)  $\omega_1 = 0.15$ , (b), (e)  $\omega_2 = 1.5$  and (c), (f)  $\omega_3 = 0.15$  in the system with  $\mu = 0.001$  and  $\mu = 1.0$  respectively. The size of each arrow is proportional to the translational displacement of the particle at that position, the meaning of the color of each particle from blue to red is the rotational displacement of the particle at that position larger and larger.

值得一提的是, Zeravcic 等<sup>[34]</sup>的模拟研究发现随着椭球胶体颗粒形状略微偏离球形(颗粒长短轴比略微偏离 1.0)时, 体系中颗粒转动模式与平动模式完全分开; 而当颗粒长短轴比偏离 1.0 较大时, 变为混合模式. 同时, Yunker 等<sup>[35]</sup>对椭球胶体玻璃的实验研究表明, 随着椭球胶体颗粒逐渐偏离球形(颗粒长短轴比逐渐增加), 椭球胶体体系的低频模式逐渐由平动为主的混合模式变为平动、转动各占一半的混合模式, 暗示形状偏离球形和增加摩擦类似同样导致体系低频模式转动分量贡献的增大. 此外, Papanikolaou 等<sup>[36]</sup>通过在颗粒边缘周期性固定小的圆形颗粒来模拟颗粒的粗糙表面(geometrical asperity model). 他们发现在有效摩擦系数  $\mu_{\text{eff}}$  ( $\mu_{\text{eff}} = 1/\sqrt{[(2R_a/R)/\sin(\pi/N_a)]^2 - 1}$ , 其中  $R$  为颗粒半径,  $R_a$  为边缘小颗粒半径,  $N_a$  为颗粒边缘小颗粒个数) 为 0.1 体系中, 其态密度曲线的低频区域出现一个纯转动模式峰, 意味着转动模式可能在低频下扮演重要的角色.

## 4 结 论

本文采用颗粒离散元方法数值模拟生成了具有不同摩擦系数的二维有摩擦颗粒体系, 通过对角化 Hessian 矩阵的方法得到体系的特征值与对应的特征向量, 进一步研究了二维有摩擦颗粒体系中体系结构与振动特性随颗粒摩擦系数的变化规律. 得到如下结论.

1) 固定压强下, 随颗粒摩擦系数  $\mu$  的增大, 二维有摩擦颗粒体系振动态密度  $D(\omega)$ - $\omega$  曲线中, 区分德拜标度与态密度平台的过渡频率  $\omega^*$  逐渐移向低频, 并且在约化态密度  $D(\omega)/\omega$  曲线中对应的玻色峰高度  $D(\omega_{\text{BP}})/\omega_{\text{BP}}$  不断增加, 玻色峰频率  $\omega_{\text{BP}}$  逐渐移向更低频率. 这主要由于随颗粒摩擦系数  $\mu$  (0.001—1.0) 的增大, 体系平均配位数  $\langle Z \rangle$  由 5.0 逐渐减小至 3.2 左右, 而使得体系偏离“临界点”的距离:  $\Delta z = z - 3$  不断减小, 本质上是减小了颗粒体系约束数目而在  $\omega > \omega^*$  处出现大量额外模式所致.

2) 对不同频率下颗粒体系振动模式的参与度  $p(\omega)$  和转动模式贡献量  $p_{F,\theta}(\omega)$  的分析表明: 低频 ( $\omega < 1.0$ ) 模式是以平动为主的混合模式, 中频 ( $1.0 < \omega < 4.0$ ) 模式是以平动为主的混合局域化模式, 而高频 ( $\omega > 4.0$ ) 模式几乎为局域化的纯转动

模式. 值得注意的是, 随着颗粒摩擦系数  $\mu$  的增大, 低频模式的局域化程度增加, 且低频转动模式的贡献逐渐增加, 暗示在高摩擦系数下低频转动模式扮演着更加重要的角色.

## 参考文献

- [1] O'Hern C S, Silbert L E, Nagel S R 2003 *Phys. Rev. E* **68** 011306
- [2] Wyart M, Nagel S R, Witten T A 2005 *Europhys. Lett.* **72** 486
- [3] Xu N, Wyart M, Liu A J, Nagel S R 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 175502
- [4] Ghosh A, Chikkadi V K, Schall P, Kurchan J, Bonn D 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 248305
- [5] Tan P, Xu N, Schofield A B, Xu L 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 095501
- [6] Zargar R, Russo J, Schall P, Tanaka H, Bonn D 2014 *Europhys. Lett.* **108** 38002
- [7] Liu H X, Chen K, Hou M Y 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 116302 (in Chinese) [刘海霞, 陈科, 厚美瑛 2015 物理学报 **64** 116302]
- [8] Schober H R, Laird B B 1991 *Phys. Rev. B* **44** 6746
- [9] Schober H R, Oligschleger C 1996 *Phys. Rev. B* **53** 11469
- [10] Rufflé B, Parshin D A, Courtens E, Vacher R 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 015501
- [11] Tanguy A, Wittmer J P, Leonforte F, Barrat J L 2002 *Phys. Rev. B* **66** 174205
- [12] Gurevich V L, Parshin D A, Schober H R 2003 *Phys. Rev. B* **67** 094203
- [13] Elliott S R 1992 *Europhys. Lett.* **19** 201
- [14] Wyart M, Silbert L E, Nagel S R, Witten T A 2005 *Phys. Rev. E* **72** 051306
- [15] Flores-Ruiz H M, Naumis G G 2011 *Phys. Rev. B* **83** 184204
- [16] Zhang G H, Sun Q C, Shi Z P, Feng X, Gu Q, Jin F 2014 *Chin. Phys. B* **23** 076301
- [17] Leonforte F 2011 *J. Non-Cryst. Solids* **357** 552
- [18] Premkumar L, Das S P 2015 *Phys. Lett. A* **379** 1073
- [19] Feng X, Zhang G H, Sun Q C 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 184501 (in Chinese) [冯旭, 张国华, 孙其诚 2013 物理学报 **62** 184501]
- [20] Xu N 2011 *Front. Phys. China* **6** 109
- [21] Somfai E, van Hecke M, Ellenbroek W G, Shundyak K, van Saarloos W 2007 *Phys. Rev. E* **75** 020301
- [22] Song C, Wang P, Makse H A 2008 *Nature* **453** 629
- [23] Henkes S, Shundyak K, van Saarloos W, van Hecke M 2010 *Soft Matter* **6** 2935
- [24] Stillinger F H, Weber T A 1984 *Science* **225** 4666
- [25] Gao G J, Bławdziewicz J, O'Hern C S 2006 *Phys. Rev. E* **74** 061304
- [26] Shintani H, Tanaka H 2008 *Nature Mater.* **7** 870
- [27] Schreck C F, Bertrand T, O'Hern C S, Shattuck M D 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 078301



- [28] Henkes S, van Hecke M, van Saarloos W 2010 *Europhys. Lett.* **90** 14003
- [29] Goodrich C P, Liu A J, Nagel S R 2014 *Nature Phys.* **10** 578
- [30] Srivastava D, Sarkar S K 2012 *Phys. Rev. B* **85** 024206
- [31] Chen K, Ellenbroek W G, Zhang Z, Chen D T, Yunker P J, Henkes S, Brito C, Dauchot O, van Saarloos W, Liu A J, Yodh A G 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 025501
- [32] Xu N, Vitelli V, Liu A J, Nagel S R 2010 *Europhys. Lett.* **90** 56001
- [33] Chen K, Still T, Schoenholz S, Aptowicz K B, Schindler M, Maggs A C, Liu A J, Yodh A G 2013 *Phys. Rev. E* **88** 022315
- [34] Zeravcic Z, Xu N, Liu A J, Nagel S R, van Saarloos W 2009 *Europhys. Lett.* **87** 26001
- [35] Yunker P J, Chen K, Zhang Z, Ellenbroek W G, Liu A J, Yodh A G 2011 *Phys. Rev. E* **83** 011403
- [36] Papanikolaou S, O'Hern C S, Shattuck M D 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 198002

## Vibrational density of states and boson peak in two-dimensional frictional granular assemblies\*

Niu Xiao-Na<sup>1)</sup> Zhang Guo-Hua<sup>1)†</sup> Sun Qi-Cheng<sup>2)†</sup> Zhao Xue-Dan<sup>1)</sup> Dong Yuan-Xiang<sup>1)</sup>

1) (Department of Physics, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China)

2) (State Key Laboratory for Hydrosience and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

( Received 12 June 2015; revised manuscript received 5 November 2015 )

### Abstract

In this paper, the two-dimensional granular assemblies composed of 2048 mono-dispersed frictional disks are simulated by the discrete element method. A set of eigenvalues and corresponding eigenvectors is obtained by diagonalizing the Hessian matrix for each stable configuration. The effects of the friction coefficient  $\mu$  of disk on mechanical and geometrical properties of these systems under isotropic confining are studied. Results show that at a fixed pressure, with  $\mu$  increasing from 0.001 to 1.0, the crossover frequency  $\omega^*$ , which separates the Debye scale region from the platform of vibrational density of states, and the boson peak  $\omega_{BP}$  gradually shift towards lower frequency, and the intensity of the boson peak  $D(\omega_{BP})/\omega_{BP}$  increases. These results are mainly attributed to the fact that the system becomes more and more disordered with the increase of  $\mu$  (i.e., the decrease of the average coordination number), resulting in more excess modes at  $\omega > \omega^*$ . For a better understanding of the different vibration modes of the two-dimensional frictional granular systems, we plot the polarization vector diagrams for different frequencies ( $\omega_1 = 0.15$ ,  $\omega_2 = 1.5$  and  $\omega_3 = 6.0$ ) for configurations with  $\mu = 0.001$  and  $\mu = 1.0$ , respectively. Mode analysis results show that the mode at low ( $\omega < 1.0$ ) has a mixed translational-rotational but translational-dominated character; the mode at intermediate frequency ( $1.0 < \omega < 4.0$ ) is localized and has a mixed translational-rotational but translational-dominated character; and the mode at high frequency ( $\omega > 4.0$ ) have a strongly rotational in character. It is worth noting that the low-frequency modes become more localized and the rotational participation fraction also increases as  $\mu$  increases, implying that the rotational modes play more important role in the system with higher friction coefficient.

**Keywords:** granular matter, vibrational density of states, boson peak, mode analysis

**PACS:** 63.50.-x, 45.70.-n, 61.43.-j

**DOI:** 10.7498/aps.65.036301

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11272048, 51239006) and the European Commission Marie Curie Actions (Grant No. IRSES-294976).

† Corresponding author. E-mail: zhguohua@sas.ustb.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: qcsun@tsinghua.edu.cn