

1. 緒言

コンピューター的发展によって、よりミクロな視点、分子レベルでの解析が行えるようになった。また、MEMS 技術の発展とともに、マイクロスケールやナノスケールでの制御、デバイスの開発が必要とされている。

マイクロスケールやナノスケールでの制御や開発を行うために、分子の集団現象を知る必要があり、分子動力学を用いて数値計算を行う方法がある。分子動力学法は、分子1つ1つの運動や軌跡を追うことが出来るだけでなく、工学的に重要である非平衡状態の現象に対しても適用できることが利点である。

本研究では、流れが分子に与える影響に注目して、球状分子のせん断流れ中での挙動を分子動力学シミュレーションにより、明らかにする。

2. 計算方法及び評価方法

球状分子の分子間に働く分子間力 F_i は Lennard-Jones ポテンシャルを用いてモデル化でき、

$$F_i = \frac{\partial U_{LJ}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right\} \quad (1)$$

と表される。ここで σ は分子形状の長さ、 ϵ はポテンシャルエネルギーの大きさ、 r_{ij} は分子間の相対位置ベクトルであり添字 i, j は分子の番号を示す。また、せん断流れを与えるハミルトンの運動方程式は SLLOD 法を用いて、

$$\frac{dr_i}{dt} = \frac{p_i}{m} + r_i \cdot \nabla u \quad \text{但し} \quad u = (u_x, 0, 0) \quad (2)$$

$$\frac{dp_i}{dt} = F_i - p_i \cdot \nabla u \quad (3)$$

と表される。 p_i は運動量のベクトルを示し、 F_i は分子間力を、 u はせん断流れのベクトルを示している。

また、計算領域は、一辺 L の三次元領域とし、デカルト座標系に対して一般化座標を用いる。境界条件はせん断流れの影響を考慮するため、上下のセルが $\pm jLdt$ ずれた Lees-Edwards 周期境界条件を用いて、中心セルを計算セルとする。図1に Lees-Edwards 周期境界条件を示す。

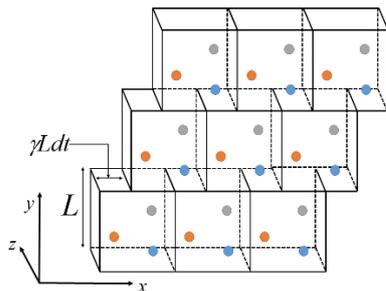


Fig.1 Lees-Edwards boundary condition

ここで、 L は1つのセルの大きさ、 dt は時間刻み幅を示す。

今回は、 y 方向にせん断速度 $\dot{\gamma} = du_x/dy$ が生じるようせん断をかけ解析を行う。

3. 結果および考察

粒子数 108 個、一片のセルの大きさ L が 5.09 の立方体とし、せん断速度 $\dot{\gamma} = 1.5$ 、無次元時間刻み幅 $dt^* = 0.5 \times 10^{-3}$ 、温度一定として、以下に計算結果を示す。

$t^* = 75.00$ の時の分子の位置は図2に、 $t^* = 75.25$ の時の分子の位置の変化は図3に、 $t^* = 75.50$ の時の分子の位置の変化は図4に示す。

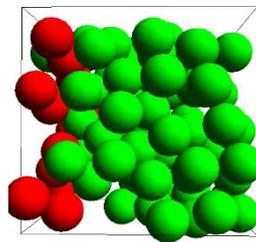


Fig.2 at $t^* = 75.00$ of molecular configurations

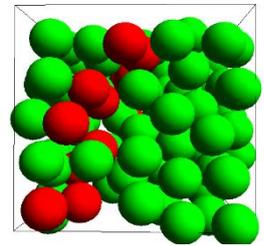


Fig.3 at $t^* = 75.25$ of molecular configurations

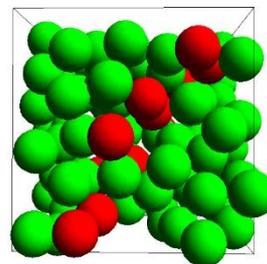


Fig.4 at $t^* = 75.50$ of molecular configurations

図2~4が示すように計算を可視化することで、計算セル内にある色の違う分子を $t^* = 0.5 \times 10^{-3}$ 毎で確認した。せん断を与えているので、計算領域内の下部に存在する分子より、上部に存在する分子のほうが速く動き、速度勾配が発生していることがわかる。

参考文献

(1) Cummings, Peter T., and Denis, J. Evans. *Industrial engineering chemistry research* 31.5 (1992): 1237-1252.
 (2) 徳増崇, 小原拓. "熱流体工学における分子動力学法 (第1回)(第3回)."