# 19 固体表面近傍における分子スケールの流動構造

○正 松本 洋一郎(東大工),正 高木 周(東大工),鍵谷 亮一(東大学),正 山西 伸宏(東大工)

# Molecular Scale Flow Structure near a Solid Surface

Yoichiro MATSUMOTO, Shu TAKAGI, Ryoichi KAGIYA, and Nobuhiro YAMANISHI

Key Words : Molecular Dynamics, Solid Surface, Non-equilibrium Flow, Lennard-Jones Fluid

#### 1.緒 言

マイクロデバイス化されたバルブ,ポンプ,熱交換器などの性能は機器内部のミクロな流動構造に大きく 依存し,その理解がますます求められている.そのような流れではもはや流体を連続体として扱うことはで きず,個々の分子の運動を考慮した解析が必要となる. そこで本研究では、固体表面近傍における分子スケ ールの流動構造を把握することを目的に、分子動力学 法を用いた詳細なシミュレーションを行い、Lennard-Jones(LJ)流体分子の存在確率分布、動径分布、自己拡 散係数,速度分布,温度分布などを解析する.

### 2. 計算条件

計算対象の系を図1に示す.本研究では,LJ流体分子としてXe(キセノン)を考え,壁面はミラー指数(111)のPt(プラチナ)固体結晶とする.z方向に23.79Åの間隔でPt(111)固体結晶を二つ配置し,分子オーダーの狭い隙間におけるXe流体分子の挙動を解析する.また,x,y方向には,周期境界条件を適用し,さらに上下の壁面を,速度Vsで動かす場合についても解析する.

#### 3. Xe-Pt 系における熱平衡状態

まず始めに,壁面を横方向に動かさず(Vs=0),熱平 衡を保った状態における計算結果について述べる.

図2に、T=300Kにおける,異なる圧力でのXe流体 分子の存在確率分布を示す.横軸は固体表面に平行な 面で領域を分割し,そのセルごとに積算された分子数, 縦軸は下壁の固体表面分子の中心を原点としたときの 位置である.まず,どの条件においても固体表面近傍 にピークをもった分布となっていることがわかる.こ



Fig.1 Image of the simulation system

れは吸着層(adsorption layer)を示しており,固体表面が 形成するポテンシャル井戸に入り,離脱できない分子 が存在するためである.圧力の上昇に伴い分布の形状 が変化し,第二,第三の吸着層が形成されることから 固体表面近傍において流体分子が構造化していくのが わかる.

次に,固体表面の被覆率を,流体分子が固体表面上 に最密で配列された場合を想定し,両壁合わせて 72 個 の吸着点が埋まったときに1となるよう定義する.図 3に示されるように,圧力の上昇や温度の低下に伴っ て被覆率が増加していることが確認できる.さらに分 布形状から,系の温度が 250K, 300K のときは最終的 に1.0 付近で被覆率が飽和するが,400K のときは吸着 確率が低いことから飽和するまでに至っていない.

吸着層における流体分子の自己拡散係数と圧力の関係を図4に示す.但し,各方向の自己拡散係数は速度 相関の式から求めた<sup>(5)</sup>.吸着層内において表面接線方 向(x, y)の自己拡散係数は同様の傾向を示すが,z方向 はそれよりも低い値を示しており,圧力の変化に関わ らず一定の値である.これは吸着層内の流体分子の動 的挙動を表しており,流体分子が固体表面から強い束 縛を受けることから z方向にほとんど拡散しないこと がわかる.これとは対照的に表面接線方向は,低圧に おいては表面から拘束を受けるもののz方向よりは自 由に運動していることがわかる.しかし,高圧になる と吸着層内の分子密度が高くなることから自己拡散係 数は低くなり,表面接線方向にもほとんど拡散しない ことがわかる.





[No.00-4] 熱流体系および固体系のミクロシミュレーションに関する合同シンポジウム・ 第5回分子動力学シンポジウム講演論文集〔'00-3-3,4,浜松〕

## 4. Xe-Pt 系におけるせん断流れ

ここでは、固体結晶に x 方向速度を与え、せん断で 流れを駆動した場合について述べる.このときの固体 壁間の流体分子の存在確率分布の例を図5に示す.比 較のため Vs=0m/s における存在確率分布も入れた.図 からもわかるように、第一吸着層の存在確率は Vs が大 きくなると減少し、気相領域の存在確率が増加する. これは固体分子に与えられた Vs が流体分子の運動エ ネルギーに伝えられ、吸着層の温度が上昇するためで ある.一方、分布のピークの位置は全く変化しておら ず、ピークの位置は流体分子が固体状態で配置された 場合の層間距離を保ち、Vs に依存しないことがわかる

流体分子の速度分布は,存在確率分布の測定と同様 に壁面間をセルに分割し,各セル内の x 方向の平均速 度を計算して求める.図6に Xe 分子数 Ng=50 流体分 子の速度分布を示す.



Fig.3 Relation between pressure and coverage of first layer at T=250K, 300K and 400K







Fig. 5 Density profile of Xe molecules at Ng=50

固体表面から離れた気相領域の速度が直線状に変化 しており,速度勾配がほぼ一定となっている.この速 度勾配は Vs の増加に伴って大きくなっており,逆に流 体分子数が増加すると小さくなる.一方,固体表面近 傍に注目すると,第一吸着層の中心(z = 2.97Å, 20.8Å) において速度が最高となるが,壁面の移動速度に比較 し跳びがあり,速度滑りを生じている.また,固体表 面に最も近い測定点(z = 1.78Å, 22.0Å)の速度は,第一吸 着層での速度より小さな値をとっているが,この領域 にはほとんど分子が存在せず,バルクから壁面極近傍 へ突入してくる分子の平均速度が計算されているため, 吸着層の速度より小さな値となっている.

図6のVs=400m/sの条件における,壁面間の温度分 布を図7に示す.固体分子はx方向に速度Vsを与えら れているので,流体分子のx方向の温度がまず上昇し, y方向,z方向の温度と続く.衝突回数が少ない場合は 十分な運動量交換を行う前にせん断による加熱を受け, 温度間の非平衡が残る.図7は衝突回数が少なく,Vs が大きいことから,各方向間の温度の非平衡を顕著と なった例である.

### 5.結言

固体表面近傍における分子スケールの流動構造を把 握することを目的に,Lennard-Jones 流体分子を用いた 分子動力学シミュレーションを行った.その結果,壁 面近傍では,吸着層の影響により,流体分子の存在確 率分布,動径分布,速度分布がバルクの分布とは大き く異なり,自己拡散係数,温度分布などに強い異方性 が現れるのが確認された.





Fig. 6 Stream velocity distribution for various Vs at Ng=50





- 38 -