

水分子吸着表面と気体分子との干渉に関する分子動力学解析

Molecular Dynamics Study of Interaction
between H₂O Adsorbed Surface and Gas Molecules

- 武内秀樹, 岡大院, 〒700-8530 岡山市津島中 3-1-1, E-mail: takeuchi@flust.mech.okayama-u.ac.jp
 山本恭二, 岡大, 〒700-8530 岡山市津島中 3-1-1, E-mail: yamamoto@fluid.mech.okayama-u.ac.jp
 百武徹, 岡大, 〒700-8530 岡山市津島中 3-1-1, E-mail: hyaku@mech.okayama-u.ac.jp
 Hideki TAKEUCHI, Okayama University, 3-Chome, 1-1 Tsushimanaka, Okayama 700-8530, Japan
 Kyoji YAMAMOTO, Okayama University, 3-Chome, 1-1 Tsushimanaka, Okayama 700-8530, Japan
 Toru HYAKUTAKE, Okayama University, 3-Chome, 1-1 Tsushimanaka, Okayama 700-8530, Japan

The characteristics of reflected gas molecules at H₂O adsorbed surfaces are investigated by applying the molecular dynamics method for the interaction of gas molecules with the adsorbed surface together with the DSMC method for the motion of molecules. In this study, the flow problem between two walls, i.e., the Couette flow, is considered. The gas is taken to be argon and the wall surface consists of platinum molecules. The tangential momentum accommodation coefficient of 0.42 is obtained at the wall whose temperature is 300K. The flow velocity between two walls and the distribution functions of the reflected molecules are also obtained. It is found that the Maxwell-type boundary condition describes well the distribution function of the reflected molecules.

1. はじめに

真空工学をはじめ, 触媒性細孔壁, 分離膜, あるいは, MEMS (Micro Electro Mechanical Systems), やマイクロマシンなどの流路 (チャネル) における気体の流れは, 連続体仮定に基づく取り扱いが難しく, 希薄気体の流れとして捉える必要があり, 分子スケールでの解析が求められる。このような, チャネル内壁では, 通常, 気体分子が物理的あるいは化学的に吸着された状態にあり, チャネル内の気体の流動は, 気体分子の吸着状態によって大きく影響される。そこで, 本研究では, 水分子が吸着している固体表面に対する解析を行う。具体的には, 気体分子としてアルゴン分子, 固体表面として白金をとり, 二平板壁間の希薄気体の Couette 流を考え, DSMC 法と分子動力学法を用いて解析を行い, 気体分子の接線方向運動量適応係数, 壁面応力, あるいは, 反射分子速度分布関数がどのようなになるかを明らかにする。

2. 水分子吸着固体表面

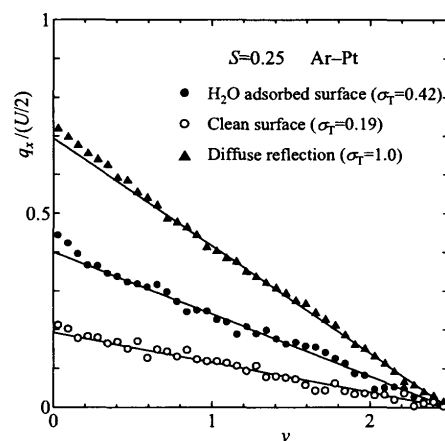
水分子吸着表面を作成するために, 300K の白金固体表面に対し, 水分子を入射させる。入射する水分子の分子速度分布および回転エネルギーは, 壁温と同じ 300K に相当する Maxwell 分布および Boltzmann 分布からランダムに与える。本研究では, 計算負荷を考慮して, 水分子が 1 区画の白金固体表面上に 20 個吸着した状態の水分子吸着表面を考え, 白金表面分子 (分子数 100 個) に対する吸着分子数の比を被覆度 θ と定義し, $\theta=0.2$ の場合を取り上げる。なお, 様々な被覆度を有する表面が考えられるが, 本研究では $\theta=0.2$ に限っている。

3. 接線方向運動量適応係数および流速分布

上下壁温 T_w が 300K で上壁が $-U/2$, 下壁が $U/2$ で移動する, 間隔 L の壁間の Couette 流に対し, 解析を行った。このとき, Knudsen 数は 0.2 とし, 速度比 $S=(U/2)/C_m$ ($C_m=(2kT_w/m)^{1/2}$ は最確速度, k は Boltzmann 定数, m は気体分子の質量) が 0.25 とする。表 1 に, 解析により得られた接線方向運動量適応係数 σ_T を示す。この表には, 以前の研究⁽¹⁾で得られた清浄で滑らかな白金固体表面 (Clean surface) の結果も示す。水分子吸着表面 (H₂O adsorbed surface) の結果と比較すると, 接線方向運動量適応係数 σ_T の値は, 被覆度 $\theta=0.2$ であるにもかかわらず, 清浄な場合のものよりも 2 倍以上大きくなっており, 水分子の吸着による干渉度への影響が

Table 1 Accommodation coefficient and shear stress at the wall

Ar-Pt	Clean surface	H ₂ O adsorbed surface	Diffuse reflection
σ_T	0.19	0.42	1.0
τ_s	-0.012	-0.024	-0.045

Fig. 1 Flow Velocity ($S=0.25$)

非常に大きいことが分かる。また, 表 1 の下段に, 壁面での無次元化した接線応力 τ_s を示す。水分子が表面に吸着している場合の方が, 清浄な場合よりも接線応力 τ_s は, かなり大きくなる傾向を示しているのが見られる。図 1 には, X 方向の無次元流速 $q_x/(U/2)$ の分布を示す。図の黒丸は, 本解析により得られた水分子吸着表面 (H₂O adsorbed surface) に対する流速分布であり, 白丸は, 以前の研究⁽¹⁾で求められた清浄で滑らかな白金表面 (Clean surface) に対する流速分布, 黒三角は拡散反射 (Diffuse reflection) の分布である。清浄な表面 (白丸) では, 水分子吸着表面 (黒丸) や拡散反射 (黒三角) に対して, 壁面での滑りの度合いが大きくなっているのが見られる。

参考文献

- (1) 山本, 武内, 百武, “固体壁面における気体分子反射特性の分子動力学法による解明, (第 1 報, 流れ問題の場合),” 日本機械学会論文集, 70-691, B (2004), pp. 602-609.