ポテンシャル勾配を用いたナノチャネル内の流体分子駆動

学 石山 達也[○](北大・院) 正 望月 修(北大・工) 正 石川 仁(北大・工)Fluid Molecular Drive in a Nano-Channel
Due to Intermolecular Potential Gradient

Tatsuya Ishiyama and Osamu Mochizuki and Hitoshi Ishikawa

ABSTRACT

Molecular flow induced by intermolecular potential gradient between solid and fluid was analyzed by a MD method. Platinum (Pt) and xenon (Xe) were used as solid and fluid respectively. The number of Xe molecules was 100 and that of Pt atoms composing walls of nano-channel was 2400. The wall temperature was fixed at 300K. It was found that a longitudinal rotating flow in the nano-channel could be driven by the potential gradient.

Key Words; Molecular Dynamics, Potential Gradient, Xenon, Platinum

1 緒論

近年、「ナノテクノロジー」がクローズアップされている。現在の技術は、もはやマイクロテクノロジーをも越え、原子分子オーダーにまで足を踏み入れようとしている。流体分子駆動という観点から、固体壁に沿う方向に密度勾配 [1] や温度勾配 [2] を設定して流れを駆動する研究などが行われている。これらは、いずれも外部からエネルギーを与え続ける事で、流れを誘起させる事ができる。

本研究は、原子、分子の運動を支配するポテンシャルエネルギーに注目し、異種原子間ポテンシャルに勾配を持たせる事によって、流れを駆動しようとするものである。つまり、常時外部からエネルギーを与える事なく、電気的に中性である分子が衝突の瞬間に生じる誘導分極を利用して、固体原子近傍で勾配力を働かせるのである。なお、本研究では、実在する原子のポテンシャルパラメータを用いているが、ポテンシャル勾配にのみ仮想的な値を用いている事に注意されたい。現実的には、ポテンシャル勾配を作るために、異種固体原子結晶を作り出す必要があるが、原子操作が可能である現在の技術においてポテンシャル勾配を作り出すことは決して不可能ではないと考えている。

2 解析方法

2.1 原子、分子間ポテンシャル

固体原子、流体分子共に以下に示す Lennard-Jones ポテンシャル ϕ を用いる。

$$\phi = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} \quad (1)$$

ここで、 ϵ はポテンシャルの谷の深さ、 σ はみかけの原子半径、 r は原子間距離を表す。固体原子間ポテンシャルパラメータには Pt、流体分子間ポテンシャルパラメータには単原子分子である Xe を用いる [3]。これらの値を表 1 に示す。また、異種原子間ポテンシャルパラメータは、勾配を与えない壁面には、

$$\sigma_{ab} = \frac{\sigma_a + \sigma_b}{2}, \quad \epsilon_{ab} = \frac{\epsilon_a \epsilon_b}{\epsilon_a + \epsilon_b} \quad (2)$$

によって決定する [4]。また、勾配を与える場合、便宜上ポテンシャルの谷の深さ ϵ のみに勾配をつけ、その他のパラメータは、表 1 に示す通りとする。なお、 k_B はボルツマン定数である。勾配の大きさについては、次項で述べる。

2.2 計算モデル

固体原子配置の配置図を、図 1 に示す。座標系は f.c.c 構造をとる Pt 原子のミラー指数 (111) 断面が、 xy 面となる

Table 1: Lennard-Jones potential parameters

parameter	unit	value	
		Pt	Xe
ϵ/k_B	K	3776	231
σ	Å	2.523	3.885
$M(\text{mass})$	atomic unit	195.08	131.29

Fig. 1: Structure of nano-channel

ように決定した。これにより、ポテンシャル場が最も安定した面を流路壁面とする事ができる。また、図 1 に示すように、固体壁を 4 つのグループに分け、 $10 \times 30 \times 3$ 個の原子からなる固体壁を upper wall, lower wall とし、その間に挟まれる形で、 $10 \times 3 \times 10$ 個の原子からなる固体壁を side wall と定義する。固体壁温度は全て 300K と一定にしている。

境界条件は、 x 方向に周期境界条件を課し、 y, z 方向には、最も外側の固体原子の速度を 0 にすることで、その位置を固定させる。これは、 x 軸方向に無限に長い nano-channel を想定している。

ポテンシャル勾配は、upper wall, lower wall のみに課す。upper wall には負の ($d\phi/dy < 0$)、lower wall には正の ($d\phi/dy > 0$) ポテンシャル勾配を与え、ポテンシャルの谷の深さ ϵ を y 方向へ隣り合う原子に等差的に与える事によって実現される。表 2 に示すように、勾配の大きさの順に case1~case3 を設定した。また、case4 として、固体壁に勾配を与えない場合についての計算も行った。Xe 原子数は 100 であり、時間刻みは 6.3 fs としている。

Table 2: Magnitude of potential parameter ϵ

	potential gradient $\Delta\epsilon/\Delta y$ (K)	minimum value of ϵ/k_B (K)	maximum value of ϵ/k_B (K)
case1	9.0	30	300
case2	6.7	100	300
case3	0.3	290	300
case4	0.0	231	231

Fig. 2: Molecular distribution in the case1

Fig. 3: Molecular distribution in the case3

3 解析結果と考察

3.1 ポテンシャル場と吸着分子との関係

ポテンシャル勾配を利用した流体の駆動を考えた場合、固体表面近傍で形成される吸着層は、その機能の低下につながる原因になると予想される。そこで、分子運動をアニメーションにより可視化することで、吸着分子とポテンシャル場との関係を考える。単純に考えれば、ポテンシャルエネルギーが -300K 以下の領域から、 300K に相当する運動エネルギーをもった分子が離脱することは不可能である。そこで、case1 における -300K 以下の異種原子間ポテンシャル場を図 5 に、分子運動のアニメーションを Link 1 として示す。また、Link 1 の画像の一部を図 2 に示しておく。図 5 に示した吸着すると予想される領域で、実際に分子の運動の拘束、又は吸着が起こり、数密度が大きくなっていることが確認できる。比較として case3 における異種分子間ポテンシャル場を図 6 に、分子運動のアニメーションを Link 2 に、その画像の一部を図 3 に示しておく。case3 では、ほとんど固体壁近傍が吸着層で覆われていることが分かる。

3.2 速度分布

流速は、図 2 に示すようなチャンネル内の流体分子が、想定したセル内に飛び込んでくる分子の運動量を時間平均することによって得られる。空間のセル分割数は、 x 方向には周期境界条件を課しているため、 y, z 方向に 1×10 としている。ただし、 y 方向のセルの大きさは、side wall の表面近傍を除いた空間中央 $3/5$ の領域とした。これは、side wall の表面がミラー指数 (112) 断面であり、凹凸の影響が大きく出てしまうためである。系が熱平衡状態に至ってからの総ステップ数を 6×10^5 とし、100 ステップごとにサンプリングした。

case1~case4 の速度分布を図 4 に示す。ここで、 z 軸座標の原点は、lower wall の表面としている。case1, case2 において、lower wall の表面近傍では y の負の方向に、upper wall の表面近傍では正の方向に流速を得ていることがわかる。これは、個々の流体分子がポテンシャルエネルギーが小さくなる方向に運動量を得ていることを表している。これにより、空間内で流体が回転していることが分かる。また、case1 では、upper wall, lower wall にせん断速度を与えた時の速度分布形状に似ている [3]。すなわち、ポテンシャル勾配を与えることによって、あたかも固体壁面を駆動しているときと、類似の速度分布を得ることができることを示している。一方、case3, 4 の速度分布は、全体的にほぼ 0 近傍に一樣分布を示す。今回の計算では、流体分子数の少なさによる統計誤差が原因で、そのゆらぎが大きく、速度分布の特徴を細かく読み取れないが、さらに精度をあげる事が今後の課題である。

Fig. 4: Velocity profile (case1 ~ case4)

4 結論

壁面に沿って与えられたポテンシャル勾配による流れの駆動を行った。ポテンシャルエネルギーの大きい場所から小さい場所に向かって流れを駆動させることが確認できた。これにより、外部から常時エネルギーを与えることなく流体を駆動させる可能性を示唆することができた。なお、今後の課題として、ポテンシャル勾配による駆動性能と、吸着分子との関係を明らかにする予定である。

Fig. 5: Potential field in the case1

Fig. 6: Potential field in the case3

参考文献

- [1] 齋藤賢一, 行天義幸, 稲葉武彦. ナノ空間に制約された窒素分子流動の非平衡分子動力学. 日本機械学会流体工学部門講演会講演論文集, 2000.
- [2] Y. Sone. Thermal creep in rarefied gas. *J. Phys. Soc. Jpn.*, Vol. 21, pp. 1836-1837, 1966.
- [3] 関伸彦. 分子動力学法を用いた固体表面近傍における非平衡流動構造の解明, 1999. 東京大学修士論文.
- [4] 小竹進. 熱流体の分子動力学. 丸善, 1998.

Link 1: case1 における分子運動 (QuickTime 形式)

Link 2: case3 における分子運動 (QuickTime 形式)