K3-7

分子動力学シミュレーターLAMMPS を用いたペーストの流れの記憶の数値実験

Numerical simulation for memory of flow in paste using molecular dynamics simulator LAMMPS

○笹川将[1]，高橋秀典[2]，松尾洋介[3]，村松旦典[4]，中原明生[5]
*Sho Sasagawa[1]，Hidenori Takahashi[2]，Yousuke Matsuo[3]，Akinori Muramatsu[4]，Akio Nakahara[5]

It is found that a paste remembers the direction of the applied external force by its plasticity and the memory of such force is visualized as the direction of crack propagation (memory effect of paste). We know two different type of memories, memory of vibration and flow. Memory of flow has been studied using colloid suspension simulator KAPSEL. But that study could not investigate what are important parameters for memory of flow. Also the mechanism of memory effect of flow is not clear. In this study, we intend to reproduce the memory of flow and reveal the important parameter by using simulator for molecular dynamics called LAMMPS. Our goal is to investigate parameter supposed to be important for experiments.

1. 緒言

干上がった沼地などでは乾燥・収縮によって発生した等方的でランダムな亀裂を見ることができるが，近年実験において亀裂を制御し異方的なパターンを発生させることができるようになった．この現象は科学的に興味深く，工学への応用も期待できる．

具体的には塑性を持つ固液混合液（ペースト）において乾燥前に外力を加えることによって外力の方向を記憶させ，亀裂の制御ができることが分かった．例えば炭酸水酸化マグネシウムと水を混合したペーストでは２通りの現象を利用した方法で亀裂の制御をすることができる．比較的低密度のペーストにおいて水平加振をした後に乾燥させるとペーストが流れた方向と平行に縞状の亀裂が発生する（流れの記憶）．一方，比較的高密度のペーストにおいて水平加振をした後に乾燥させると揺れに垂直な平行な縞状の亀裂が発生する（揺れの記憶）（Fig1）．ペーストに用いた粉の体積比と加振の強さをパラメーターとして選ぶことによって，流れの記憶と揺れの記憶の領域やその境界を示すことができる[1]．このことにより，ペーストの流れや揺れの記憶を利用して亀裂パターンの制御ができるようになった．

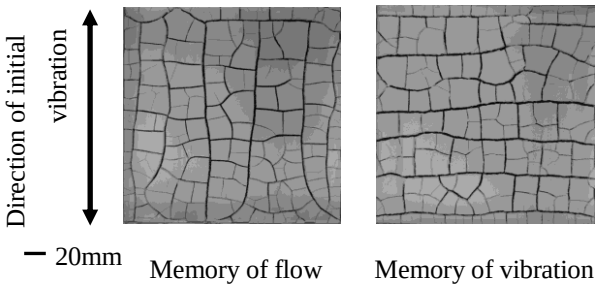

Fig1. Crack patterns induced by memory effects [1]

ペーストの揺れと流れの記憶であるが，高濃度ペーストでは揺れの記憶が広く見られるのに対し，比較的低濃度で発現する流れの記憶はコロイド粒子が帯電していないことが条件[2]になるなどその性質は大きく異なる．

揺れの記憶のメカニズムは弾塑性モデルである程度説明可能であるが，流れの記憶についてはいくつかの数値的な研究があるのみで流れの記憶の詳しいメカニズムはほとんどわかっていない．

これまでの数値的な研究では KAPSEL というコロイド・微粒子分散系に対するシミュレータを用いて，せん断下にあるペーストのコロイド粒子が作る流れに平行なネットワークやせん断を止めた後のネットワークの構造の維持から流れの記憶のメカニズムについて示唆した[3]． KAPSEL では粉粒子と溶媒を連動させるモデルとして，粒子表面に近接する格子点状に表面からの距離に応じた補助変数を置いて界面位置を指定する方法で粗視化し計算を行っている[4]．しかし, KAPSEL で用いられる補助変数の妥当性を判断することは難しい．また KAPSEL ではコロイド粒子が帯電した状態での計算には対応しておらず，実験との比較ができない側面もある．

以上の理由から本研究では実験との比較が可能と思われる LAMMPS という分子動力学法を用いたシミュレーターを利用する. LAMMPS を用いて流れの記憶の再現をすると共に実験で重要と思われているパラメーターの検証をする. LAMMPS には多様なコマンドが存在し，それらを組み合わせることで様々な条件の数値計算が可能となる[5]． LAMMPS はオープンソースであり, アメリカの SANDIA 研究所から配布されている．

日大理工・院（前）・航空[1]，日大理工・非常勤講師[2]，日大理工・研究員[3]，日大理工・教員・航空[4]，日大理工・教員・一般物理[5]

2.　LAMMPS によるシミュレーション

LAMMPS は分子動力学シミュレーターである．溶媒は溶媒分子として，コロイド粒子はそれを構成するコロイド分子の集合体として表現される．それらの間にポテンシャルを定義し，ニュートンの運動方程式に従って解くことで分子の運動状態を数値計算することができる．ポテンシャルは溶媒分子同士，コロイドと溶媒分子，コロイド粒子同士についてそれぞれ定義される．Lennard-Jones ポテンシャルを基にした 2 対ポテンシャルで引力項と斥力項を体積積分して和をとることでそれぞれのポテンシャルを求めている．

（A）溶媒分子-溶媒分子間のポテンシャル

溶媒分子間距離r，Hamaker 定数A_{ss}，分子間距離に対応するσを用いて全ポテンシャルU_{ss}は次のように表される．

$$U_{ss} = \frac{A_{ss}}{36}\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right] \tag{1}$$

(1)式は Lennard-Jones ポテンシャルである．なお溶媒分子の大きさは 0 として扱われる．

（B）コロイド粒子-溶媒分子間のポテンシャル

コロイド粒子の半径a，コロイド粒子の中心と溶媒分子間距離r，Hamaker 定数A_{cs}，分子間距離に対応するσを用いて引力のポテンシャルと斥力のポテンシャルの和である全ポテンシャルU_{cs}はコロイド粒子の大きさを考慮して体積積分して求められる．ポテンシャル関数が複雑なためポテンシャルの形を示す（Fig2）．このポテンシャルでは$r = a$で発散する．

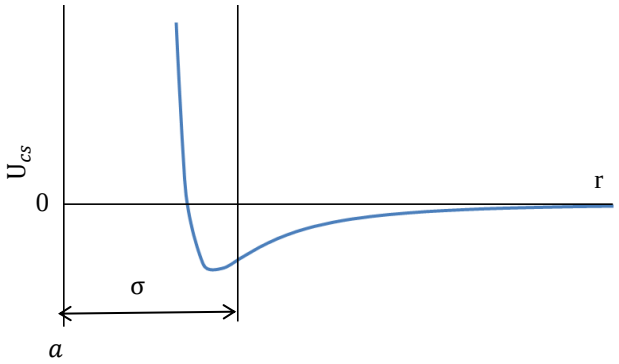

Fig2. Potential energy between colloid particle and solvent

（C）コロイド粒子-コロイド粒子間のポテンシャル

2 つのコロイド粒子のそれぞれの半径a_1，a_2，コロイド粒子中心間距離r，Hamaker 定数A_{cc}，分子間距離に対応するσを用いて引力のポテンシャルと斥力のポテンシャルの和である全ポテンシャルU_{cc}はコロイド粒子の大きさを考慮して体積積分して求められる．ポテンシャル関数が複雑なためポテンシャルの形を示す（Fig3）．なお、コロイド粒子の半径は等しいとして共にaとした．このポテンシャルでは$r = 2a$で発散する．

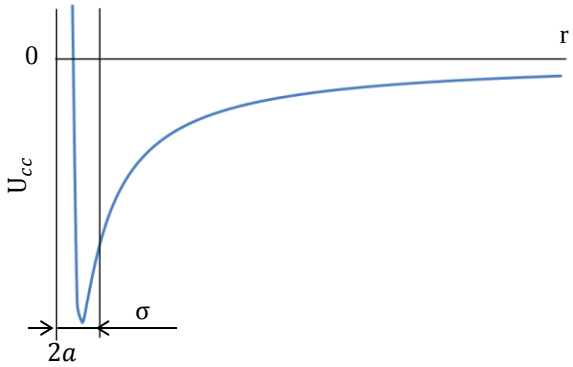

Fig3. Potential energy between colloid particle and colloid particle

現在は（A）溶媒分子間のポテンシャルを用いて溶媒分子のみを扱っている．気体状態の溶媒分子を確認することができたので，今後は液体状態の溶媒を再現することから始め，（B）や（C）を用いて溶媒にコロイド粒子を加える．そして，追加するコロイド粒子の数密度を増加させることやペーストにせん断を加えることでペーストの流れの記憶のメカニズム解明を目標に研究を進めていく．

3.　展望

本研究によりペーストの流れの記憶のメカニズムを解明することはサイエンスとして大変興味深い流れの記憶という現象を理解するだけでなく，他の固液混合液のレオロジー的な振る舞いの理解にも応用できる可能性もあり工学的応用につながる成果が得られるかもしれない．

参考文献

[1] A. Nakahara and Y. Matsuo, “Transition in the pattern of cracks resulting from memory effects in paste”, Phys. Rev. E **74** (2006) 045102(R).

[2] Y. Matsuo and A. Nakahara, "Effect of interaction on the formation of memories in paste", J. Phys. Soc. Jpn. **81** (2012) 024801.

[3]2015 年度日本大学大学院理工学研究科修士論文「ペーストの流れの記憶の数値実験」石川諒馬

[4] http://www-tph.cheme.kyoto-u.ac.jp/kapsel/

[5] http://lammps.sandia.gov/