

K3-9

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, 村松旦典², 中原明生³, 高橋秀典⁴, 松尾洋介⁴*Sho Sasagawa¹, Akinori Muramatsu², Akio Nakahara³, Hidenori Takahashi⁴, Yousuke Matsuo⁴

It is found that a paste remembers the direction of an applied external force by its plasticity. For example, a paste remembers the direction of flow motion and, when it is dried, desiccation cracks propagate parallel to flow direction. Although memory of flow has been studied using colloidal suspension simulator KAPSEL, the mechanism of memory effect of flow is still not clear. In this study, we intend to reproduce the memory effect of flow and reveal what is the important parameter by using simulator for molecular dynamics called LAMMPS. As a result, we find that, when attractive colloidal particles are set under flow, an anisotropic network of colloidal particles is formed as band structure along flow direction. The width of anisotropic band structure is found to be smaller than the thickness of the paste, which is consistent with the experimental result.

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、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ソフトな固液混合材料（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、乾燥後に発生する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、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）^[1]。

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ーを用いて、流れの記憶についてのシミュレーションが行われた^[2]。しかし、コロイド粒子の空間構造を解析すると揺らぎが大きすぎて流れの記憶に対応した異方的な空間構造が形成されたとは断定できていない。KAPSEL では帯電や境界条件などで実験との直接的な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^[3]を利用する。

2. LAMMPS でのシミュレーション

LAMMPS では Lennard-Jones ポテンシャルを基にした 2 対ポテンシャルで大きさのある球形コロイド粒子同士のポテンシャルが定義されている。

球形コロイド粒子の半径 a 、コロイド粒子中心間距離 r 、Hamaker 定数 A 、Lennard-Jones ポテンシャルにおける分子間距離に対応する σ を用いるとポテンシャルエネルギー U 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、実際に計算で使用する値を用いてポテンシャルの形を図 1 に示す。なお、コロイド粒子の半径 $a = 2.5$ とし、 $\sigma = 1$ 、 $A = 40$ を用いた。このポテンシャルでは $r = 2a = 5$ で発散する。

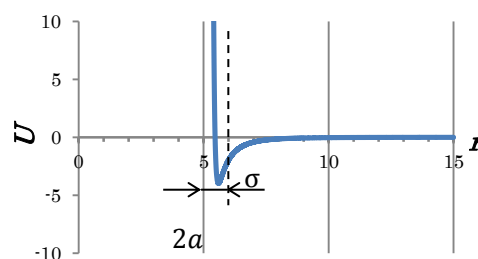


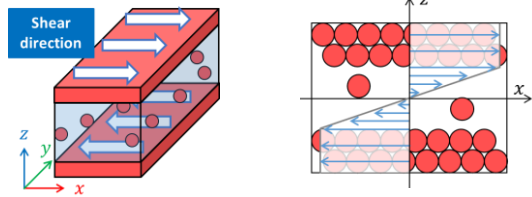
Fig1. Potential energy between colloidal particles, U , as a function of distance r between centers of these particles.

本研究では、コロイド粒子で作った粒子壁でペーストを上下からサンドイッチし、そこにペースト中のコロイド粒子を配置する。粒子壁の間の空間は実験のペーストに相当するが、溶媒の動きは図 2 に示すように単純せん断流としてバックグラウンド的に扱う。この粒子壁に挟まれた空間に存在するバックグラウンドとしての溶媒が単純せん断速度場 \mathbf{v}_s を持つと仮定し、速度 \mathbf{v}_c のコロイド粒子は溶媒から、溶媒とコロイド粒子の速度差に比例したストークス抵抗（抵抗係数は $\gamma > 0$ ）を受けるとする。また、コロイド粒子は図 1 で表されたコロイド粒子間の力を受けるとすると、コロイド粒子の運動方程式は式(1)のようになる。

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

$$F_i = -\gamma(v_{ci} - v_s) - \nabla U_i \quad (1)$$

$$v_s = (\alpha z, 0, 0)$$



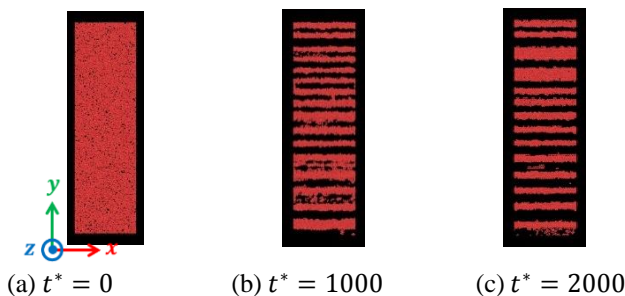
(a) 3D image (b) Velocity gradient

Fig. 2 Direction of applied shear in numerical simulations

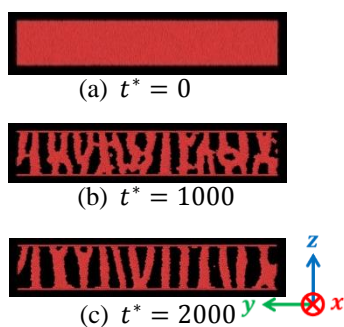
3. シミュレーション結果

3.1 粒子の作る縞構造

37,108 個のコロイド粒子（粒子壁を除く）を用いて計算を行ったところ、図 3 と 4 より単純せん断速度場では時間経過とともにコロイド粒子がクラスターを形成し始め、最終的にはせん断速度場と平行でペーストの厚さよりも細かい縞構造が形成され、その方向は乾燥時に発生する平行縞状亀裂の方向と一致する様子が確認された。



(a) $t^* = 0$ (b) $t^* = 1000$ (c) $t^* = 2000$
Fig. 3 Snapshot of spatial configuration of colloidal particles under velocity gradient of simple shear, shown as a top view, where the system size $40 \times 80 \times 20$



(a) $t^* = 0$ (b) $t^* = 1000$ (c) $t^* = 2000$
Fig. 4 Snapshot of colloidal particle configuration under velocity gradient of simple shear, shown as a side view, where the system size $40 \times 80 \times 20$

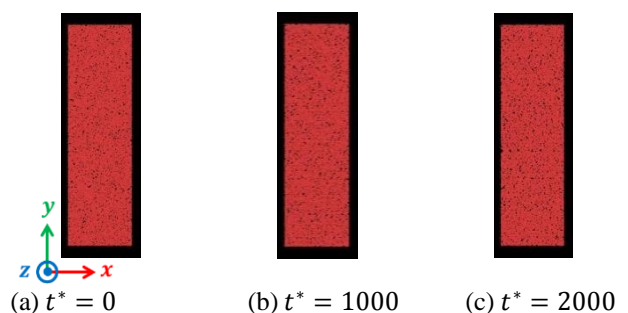
実験において平行縞状亀裂の発生位置がランダムであることから流れの記憶により発生する実際の亀裂間隔はペーストの厚さに依存するものの、亀裂を発生させる構造自体はその厚さよりも小さいと考えられてい

るが、本モデルでの結果はその仮説を支持している。

3.2 引力の効果

コロイド粒子同士の引力の効果を調べるために、システムサイズや粒子数は 3.1 の計算と同一条件下で、図 1 で引力の部分の値を 0 にした斥力みのポテンシャルで計算を行った。

その結果、図 5 のようにせん断をかけても異方的なネットワーク構造は現れなかった。つまり、せん断速度場と平行に異方的なネットワーク構造が発生するためにはコロイド粒子間の引力が必要であるということが分かる。同様の事実が実験においても確認されており、本モデルの正当性を示唆している^[4]。



(a) $t^* = 0$ (b) $t^* = 1000$ (c) $t^* = 2000$
Fig. 5 Snapshot of colloidal particles configuration without attraction under velocity gradient of simple shear, shown as a top view, where the system size $40 \times 80 \times 20$

4. まとめ

本研究ではバックグラウンドとして考えた流れ場が単純せん断速度場を持つようなモデルを使うことで、引力を持つコロイド粒子が最終的にはせん断速度場に平行な縞状のネットワーク構造を形成することが分かった。一方、コロイド粒子間に引力が働かない場合には一様な空間分布しか得られないことが示され、流れの記憶の形成のためにはコロイド粒子間の引力相互作用が不可欠であることが示された。また、縞状のネットワーク構造の間隔はペーストの厚さよりも小さいなど、実験で見られる様々な性質を再現する結果が得られた。

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] 石川諒馬, "ペーストの流れの記憶の数値実験", 日本大学大学院理工学研究科修士論文, (2016)
- [3] <http://lammps.sandia.gov/>
- [4] Y. Matsuo and A. Nakahara, "Effect of interaction on the formation of memories in paste", J. Phys. Soc. Jpn. **81** (2012) 024801.