

計算機シミュレーションによるせん断流動下での二成分混合系のスピノーダル分解過程に関する研究

京大院工 ○西辻 祥太郎・竹中 幹人・橋本 竹治、山形大工 谷口 貴志

緒言

本研究ではせん断流動が二成分混合系のスピノーダル分解過程の時間発展則や構造にどのような影響を及ぼすのかを計算機シミュレーションによって明らかにすることが目的である。

理論

本研究で用いた時間発展方程式は

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla^2 \mu - \nabla \cdot \phi \mathbf{v} \quad (1)$$

(ϕ : A 成分の体積分率、 μ : 化学ポテンシャル、 \mathbf{v} : 速度場)

である。右辺第 1 項の化学ポテンシャルは Ginzburg-Landau 型($\mu = -\phi + \phi^3 - \nabla^2 \phi$)を用いて、第 2 項は流れの効果に関する項である。速度場の式を下に示した。

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_s + \mathbf{v}_h \quad (2)$$

$$\mathbf{v}_s = \dot{\gamma} y \mathbf{e}_x \quad (3) \quad \Delta \mathbf{v}_h - \nabla \cdot \mathbf{p} + gK = 0 \quad g = \frac{t_0 \delta \phi_0 \mu_0}{\eta_0} \quad (4)$$

($\dot{\gamma}$: せん断速度、 y : 速度勾配方向の高さ、 \mathbf{e}_x : X 軸方向の単位ベクトル

\mathbf{p} : 圧力場、 K : 表面張力に基づいた項、 t_0 : 特性時間、 η_0 : 粘度)

\mathbf{v}_s はせん断流動による速度場で(3)式を用いて計算を行った。また \mathbf{v}_h は流体力学的相互作用による速度場で、(4)式で表されるように非圧縮条件下で記述される Stokes 方程式をもちいて計算を行った。ここで g は流体力学的相互作用の強さを表すもので本研究では $g = 2.5$ を用いている。

計算モデル

シミュレーションにおける実空間モデルとして図1に示すように、立方体型の3次元格子点モデルを用い、x軸を流動方向、y軸を速度勾配方向、z軸を中立方向とし、システムサイズは $64 \times 64 \times 64$ とした。境界条件には流動方向にはせん断流動による系のずれを考慮した Lees-Edwards 境界条件、他の二面については周期境界条件を用いた。

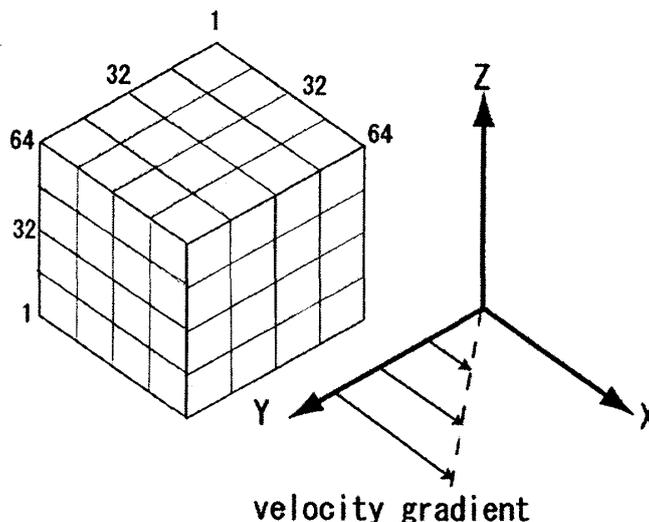


図1. 3次元格子点モデル

結果・考察

シミュレーション上で $\gamma=0.1$ で計算をおこなった。図2は shear が無い場合の $y=33$ における xz 面の体積分率 ϕ と $q_y=0$ における $qxqz$ 面の散乱関数で強度は log 表示してある。図3は shear が有る場合である。図4はシミュレーション時間 t に対する散乱関数の1次モーメントをとった波数 $\langle q_m \rangle$ のグラフで、shear が無い時は円環平均した散乱関数で shear が有る時 $qx=qy=0$ における qz 方向の散乱関数である。図2,3を見るとどちらも時間発展とともにドメインがおおきくなり散乱パターンも小角によっているのがわかる。さらに shear が有る場合は qz 方向に散乱ピークが伸びており強度が強くなっている。これは shear の効果によりドメインが X 方向に伸びているためである。また図4, 5を見るとせん断流動がない時 $\langle q_m \rangle \propto t^{-1.00}$ となっているが、せん断流動が加わると qx 方向は $\langle q_m \rangle \propto t^{-1.55}$ 、 qz 方向は $\langle q_m \rangle \propto t^{-1.95}$ となった。これよりせん断流動が加わっている時はべき乗則が大きくなることがわかった。

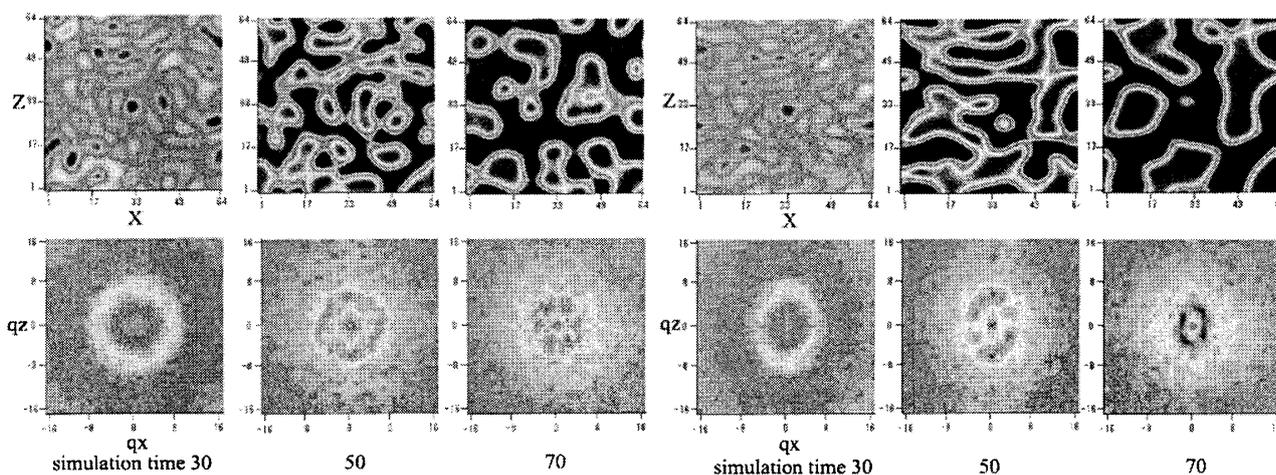


図 2. 体積分率 ϕ と散乱関数の時間発展
(shear が無い場合)

図 3. 体積分率 ϕ と散乱関数の時間発展
(shear が有る場合)

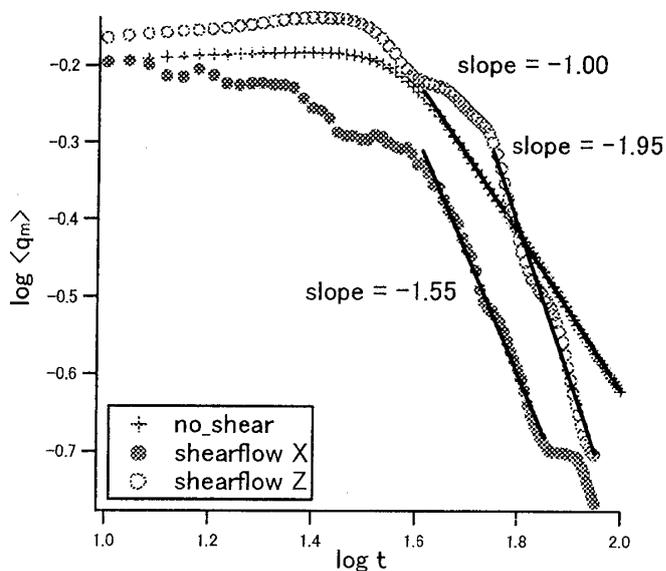


図 4. t に対する散乱関数の1次モーメントをとった波数 $\langle q_m \rangle$