

Title	熱揺らぎが支配的な系の衝突現象とゆらぎの定理(粉体物理の現状と展望,2006年度後期基礎物理学研究所研究会)
Author(s)	國仲, 寛人; 早川, 尚男
Citation	物性研究 (2007), 88(2): 196-199
Issue Date	2007-05-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/110815
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

熱揺らぎが支配的な系の衝突現象とゆらぎの定理

中央大学 理工学部 物理学科 國仲 寛人¹
 京都大学 基礎物理学研究所 早川 尚男

1 はじめに

砂やガラスビーズ等の一般に粉体と呼ばれる系はマイクロメートルオーダー以上のサイズを持つ粒子の集団のことであり、そこでは粒子の弾性に起因する斥力や、内部散逸に起因する散逸力、また表面の化学的な吸着力等の粒子間相互作用が素過程となり、全体のダイナミクスが決定される。粉体を構成する粒子はマイクロメートルオーダー以上のサイズを持つため、熱揺らぎの影響がほとんど無視できるというのが粉体のダイナミクスの特徴であるが、ナノスケール程度まで粒子サイズが小さくなると、熱揺らぎの影響が粒子間相互作用において無視できない程大きくなる。この研究の目的は、そのような小さな系の衝突現象を調べることで、熱揺らぎの効果が反発係数等の衝突を特徴づける量にどのように影響するかを探ることにある。

これまでの先行研究では、ナノスケール程度のクラスターの衝突現象に関して、散乱や分裂、融合などの現象が、主に数値シミュレーションによって調べられている [1]。ここでは分子動力学法に基づいたナノスケールのクラスター衝突のシミュレーションを行い、反発係数と衝突速度の関係や、反発係数の出現確率について揺らぎの定理との関連を調べる。

2 モデル

我々の用いたシミュレーションモデルは図 1 に示すようなレナード-ジョーンズ粒子から構成される、同質な 2 つのクラスターである。座標軸は 2 つのクラスターの重心を結ぶ方向を Z 軸とする。1 つのクラスターを構成する 682 個の「原子」は面心立方の初期配置を取り、「原子」同士はレナード-ジョーンズポテンシャル、

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

で結合している。ここで、 r は構成粒子間の距離、 ϵ は結合エネルギー、 σ は格子定数を表している。

¹E-mail:kuninaka@phys.chuo-u.ac.jp

2つのクラスター間の相互作用は以下のようにモデル化する。クラスター C^u の下表面の粒子とクラスター C^l の上表面の粒子間には、次のようなポテンシャルで表されるような相互作用が働くとする。

$$V(r) = 4\epsilon \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} \quad (2)$$

すなわち、クラスター間には吸着等の引力ではなく、レナード-ジョーンズポテンシャルの斥力部分で表される斥力のみが働くものとしてクラスター間相互作用をモデル化した。

このモデルを用いた基本的なシミュレーションのセットアップは次の通りである。まず2つのクラスターを $z = 0$ 面に対して鏡対称に配置する。そしてクラスターを構成する各粒子に、マックスウェル-ボルツマン分布に従う乱数により初期速度を与え、その分散に相当する初期温度を与える。そして速度スケージング法 [2] で熱平衡化した後に、並進速度を与え二つのクラスターを互いに正面衝突させる。

ここでサンプル平均は、初期温度として与えるマックスウェル-ボルツマン分布に従う速度の組を変えることで複数のサンプルを取り、その平均を計算することで取る。また、クラスターの初期配向によっても結果が異なるため、 Z 軸の周りのクラスター C^u の角度 θ (C^u と C^l が鏡対称の配置の時に $\theta = 0$ と定義) を変化させてシミュレーションを行い、角度によっても平均を取った。

計算はクラスターの構成粒子の運動方程式を、速度ベルレ法で時間刻み $dt = 1.0 \times 10^{-2} \sigma^2 m / \epsilon$ で解いた。また、計算時間の短縮のため、レナード-ジョーンズ相互作用のカットオフを $\sigma_c = 2.5\sigma$ で入れた。また、長さ、質量、及び時間をそれぞれ σ 、一粒子の質量 m 、及び $\sigma^2 m / \epsilon$ で無次元化し、パラメータの値はアルゴンの値と比較して²シミュレーションを行った。

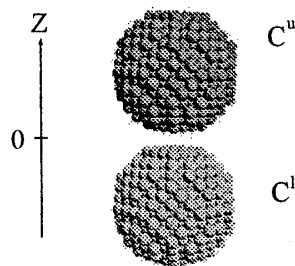


図 1: レナード-ジョーンズ粒子から構成される、クラスターモデル。各クラスターは 682 個の構成粒子から成る。

3 シミュレーション結果

図 2 に示すのは衝突速度と反発係数の関係である。反発係数は衝突前後の相対速度の Z 成分の比を用いて、 $e = -V'_z / V_z$ で定義する。図 2 にはクラスターの初期温度が $T = 0.02\epsilon$

²アルゴンの場合、 $\sigma = 3.4 \times 10^{-10} m$ 、 $m = 6.69 \times 10^{-26} kg$ 、 $\epsilon = 1.65 \times 10^{-21} J$

と $T = 0.03\epsilon$ の二つの場合を示す。サンプル平均は、各速度に対して、粒子に温度として与える初期速度の組を 100 通り変化させ、初期配向を $\theta = 0$ から $\pi/2$ の間で等間隔に 10 分割して得られた、計 1000 サンプルのデータを平均した。

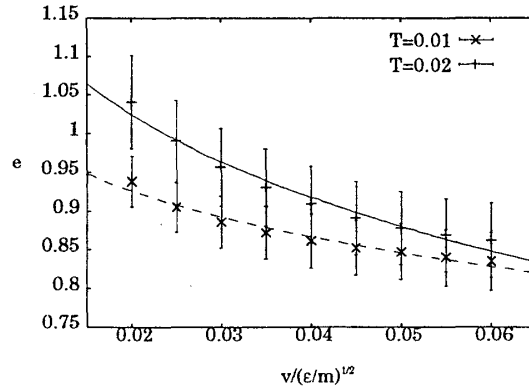


図 2: クラスターの衝突速度と反発係数の関係。

シミュレーションで得られたデータを、低速衝突の準静理論 [3] の結果と比較した。これは、巨視的な物体が衝突時に受ける力を Hertz 理論に基づく弾性力と、内部粘性に由来する散逸力の和で表せると仮定し、物体に生じる歪の時間発展から、衝突後の速度を求めたものである。それによると、衝突速度 v と反発係数 e の関係は、

$$e \simeq a - b \left(v \sqrt{\epsilon/m} \right)^{1/5} \quad (3)$$

と表すことができる。ここで a は通常 1 であり、 b は物性値で決まる定数である。ここでは、 a, b をフィッティングパラメータとしてデータのフィットを行った。

図 2 の実線と破線は、それぞれ $(a, b) = (1.744, 1.572), (1.323, 0.869)$ で式 (3) をプロットしたものである。これからわかるように、式 (3) によるデータのフィットはよいが、 a の値は 1 よりも大きな値になる。これは低速の衝突において、反発係数の平均値が 1 以上になることを表している。

ここで反発係数の出現確率について定量的な議論を試みる。熱揺らぎの影響が無視できないような小さな系においては、有限の確率でエントロピーが減少する現象が観測されることが知られており、それを定量するのがゆらぎの定理 [4] である。これを非弾性衝突に適用したものは、次のようになる³。

$$\exp(\beta W) P(X_0 \rightarrow X_1) = \bar{P}(\bar{X}_1 \rightarrow \bar{X}_0). \quad (4)$$

ここで、 β は逆温度を表している。 X_0, X_1 はそれぞれ重心自由度の初期状態と終状態を表しており、 $P(X_0 \rightarrow X_1)$ は初期状態 X_0 から終状態 X_1 に遷移する確率分布である。また、 $\bar{P}(\bar{X}_1 \rightarrow \bar{X}_0)$ は、衝突を時間反転した時に、終状態から初期状態に戻る確率分布を表す。 W は衝突により重心自由度が失う (または内部自由度が獲得する) エネルギーを表し、

$$W = \frac{1}{2} M V^2 (1 - e^2) \quad (5)$$

³この定式化は学習院大の田崎晴明氏によるものである。

で表される。このように W は $1 - e^2$ の関数で表すことができるので、 $1 - e^2$ の出現確率分布 $P(1 - e^2)$ と、衝突を時間反転した時の $\bar{P}(1 - \bar{e}^2)$ とを求めて、式 (4) の成立を確かめる。

シミュレーションは初期温度 $T = 0.02\epsilon$ 、 $T = 0.03\epsilon$ のそれぞれの場合について行った。衝突速度 $v = 0.02(\epsilon/m)^{1/2}$ で衝突させ、初期の高さにクラスタが戻ってきたら e を測定し、もう一度熱平衡化した後に重心速度を反転させて、反発係数 \bar{e} を測定する。これを 1 サンプルとし、初期の各粒子に与えるマックスウェル-ボルツマン分布に従う初期速度のセットを 3000 サンプル用意し、更に初期配向を $\theta = 0, \pi/8, \pi/4$ と変え、計 9000 サンプルのデータを平均した。図 3、4 にそれぞれ初期温度 $T = 0.02\epsilon$ 、 $T = 0.03\epsilon$ の時の結果を示

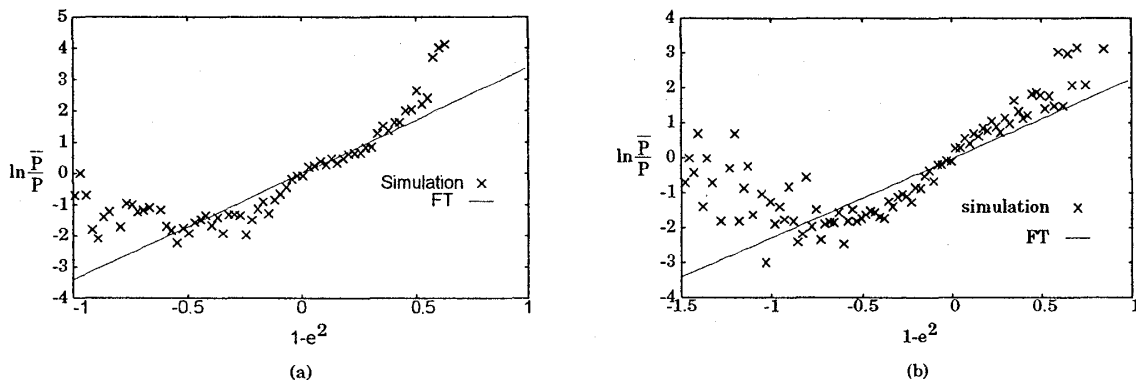


図 3: ゆらぎの定理との比較。 $T = 0.02\epsilon$ の場合。 図 4: ゆらぎの定理との比較。 $T = 0.03\epsilon$ の場合。

す。横軸に $1 - e^2$ 、縦軸に $\ln \bar{P}/P$ を取った。実線は各温度に対して、 $1 - e^2$ と W の関係をプロットしたものである。これを見ると両端の領域では一致は悪いものの、中間領域の一致は悪くないことがわかる。ただしシミュレーション初期の速度スケージングによる熱平衡化の際にクラスタに回転が励起され、これが反発に大きく影響することがわかっている。非弾性衝突のゆらぎの定理に重心まわりの回転自由度を取り入れ、シミュレーション結果と比較することは今後の課題として残されている。

参考文献

- [1] See, e.g., M. Kalweit and D. Drikakis, J. Comput. Theor. Nanoscience **1** (2004), 367.
- [2] J. M. Haile and S. Gupta, J. Chem. Phys. **79** (1983), 3067; H. C. Andersen, J. Chem. Phys. **72** (1980), 2384.
- [3] G. Kuwabara and K. Kono, Jpn. J. Appl. Phys. **26** (1987), 1230.
- [4] See, e.g., D. J. Evans, E. G. D. Cohen, and G. P. Morris, Phys. Rev. Lett. **71** (1993), 2401; D. J. Evans and D. J. Searls, Adv. Phys. **51** (2002), 1529.