

## 16. 非平衡 MD 法によるクエット流における流体相と糸相の 2 相共存状態の研究

山 田 敏 之

速度勾配のある流れ（クエット流）を非平衡分子動力学法（NEMD）によってつくったとき、糸相と流体相の境界面がいつも特別な方向を向くのは何故かを調べた。

NEMD は、線形応答理論を用いて得られる輸送係数の表式が Green-Kubo 公式と一致する様に摂動を加えた運動方程式を数値積分することによって、流れの場における粒子の運動を求める方式である。NEMD によってクエット流をつくり、流体相に加える速度勾配を大きくしていくと、糸相への転移がおこる。糸相は、流れに沿って粒子が糸状に並び、さらにその糸が流れに垂直な面内で三角格子をなす状態である。糸相と流体相が 2 相共存状態にあるとき、今までのシミュレーションではすべて、その境界面は、流れの方向、及び速度勾配の方向に平行であった。

本論文では、何故、この面の配向が安定であるのかを調べた。このために、共存状態を流れの方向を軸として  $90^\circ$  回転して、2 相の境界面が速度勾配に垂直になった状態を初期配置として NEMD によるシミュレーションを行なった結果、その境界面の配向は不安定で、一旦、流体相となりそこから又糸相が出現したが、その時境界面は、通常得られる向きになっていた。よって、いつもシミュレーションで見出される境界面の配向が安定であることが確かめられた。

### ○上智大学大学院理工学研究科物理学専攻

- |                                                   |         |
|---------------------------------------------------|---------|
| 1. CO <sub>2</sub> シークエンスレーザーにおける回転緩和（緩和パラメータの特性） | 藤 沢 忠 仁 |
| 2. 真空紫外分光法を用いた電子原子非弾性衝突の研究                        | 甲 田 泰 照 |
| 3. CO <sub>2</sub> レギュラーレーザーによる非線形現象              | 三 河 淳 一 |
| 4. 吸収電流法による電子スピン偏極度の測定                            | 成 井 禎   |
| 5. 4d 電子を含む原子の Auger 効果に関する研究                     | 田 中 靖 人 |
| 6. GaAs 単結晶からのスピン偏極電子線の生成                         | 山 崎 利 之 |
| 7. II <sub>B</sub> 族原子の電子衝撃による励起発光スペクトルの偏光特性      | 金 子 佳 由 |