

## 分子動力学シミュレーションによる相変化・界面に関する研究

慶應義塾大学理工学部機械工学科 泰岡顕治

分子動力学シミュレーションは、分子・原子の動きを解析することができるシミュレーションとして近年盛んに行われている。計算の大部分は、分子間の力を計算することに費やされるので、この部分を早くすることが大規模・長時間のシミュレーションを行うために重要となる。本研究では、分子動力学専用計算機 MDGRAPE-3 を用いて、計算を高速化した。発表では、界面に関する研究の例としてエタノール/シクロヘキサン混合溶液とシリカガラスとの界面におけるエタノールマクロクラスターの解析について取り上げる。また、相変化現象の例として気泡核生成現象についても紹介する。

固体/液体界面近傍における液体は、バルクとは異なる分子構造をとり、その物性は界面近傍での分子構造に強く依存している。そのため界面近傍の物性を制御するにはその分子構造の理解が必要不可欠である。栗原らは実験によりエタノール/シクロヘキサン混合溶液とシリカガラスとの界面におけるエタノール吸着膜内部の分子構造を調べた。その結果、その界面から 13~18 nm もの厚さのエタノール吸着層を形成すること、界面近傍のエタノール分子の OH 基が界面に対して垂直な方向と平均  $40 \pm 4^\circ$  の角度を成すことを明らかにした。我々は、エタノールマクロクラスターの詳細な構造およびその構造が物理量に与える影響を解明することを目的として研究を行った。その結果、エタノールマクロクラスターは実験結果から推定された 10~20 nm の直鎖状クラスターではなく、一般的なクラスターよりもやや大きく、シリカガラス表面と垂直方向に長い直鎖状のクラスターの集合体であることを明らかにした。また、本研究で解析されたクラスターは最大で 8 nm 程度のクラスターであることがわかった。さらに本研究で解析された自己拡散係数および水素結合緩和時間といった物理量はシリカガラスモデルやエタノールモル比に強く依存することがわかった。