

## 薄膜内の熱輸送に関する分子運動の数値計算

富村, 寿夫  
九州大学機能物質科学研究所

尾添, 紘之  
九州大学機能物質科学研究所

小竹, 進  
東京大学工学部

<https://doi.org/10.15017/6549>

---

出版情報 : 九州大学機能物質科学研究所報告. 2 (2), pp.287-294, 1988-12-28. 九州大学機能物質科学  
研究所  
バージョン :  
権利関係 :

## 薄膜内の熱輸送に関する分子運動の数値計算

富村 寿夫・尾添 紘之・小竹 進\*

### Numerical Computation for Molecular Energy Transfer in a Thin Film

Toshio TOMIMURA, Hiroyuki OZOE and Susumu KOTAKE\*

A two-dimensional spring model for molecular energy transfer was presented and computed for Argon molecules of 27 by 27 layers at 10 [K]. In  $10^4$  time steps ( $2.86 \times 10^{-12}$  [s]), the average temperature of molecules fluctuated in a range 9.3 to 10.9 [K]. When an upper surface molecular layer was heated to 25 [K], an average temperature of all molecules attained to this temperature in about  $2.6 \times 10^5$  time steps ( $7.44 \times 10^{-11}$  [s]). The transient temperature profiles similar to those of heat conduction appear to support this model and computations.

#### 1. 結 言

分子あるいは原子の冷却面への凝縮過程は先端産業での重要な工業プロセスであり、機能性薄膜の研究においても大きな課題の一つである。CVD (Chemical Vapor Deposition) 法は気体分子の化学反応による生成物を基板上に蒸着させる方法であるが、この過程には反応が含まれるため非常に複雑であり、本研究の範囲を越えている。一方、真空蒸着法などのように化学反応が含まれないかあるいは薄膜の成長に本質的でない方法は総称してPVD (Physical Vapor Deposition) 法と呼ばれ<sup>1)</sup>、気体分子は固体表面に凝集し、そのエネルギーは固体に伝えられる。この過程は明らかに凝縮現象であるが、分子の保有するエネルギーが気体-固体間で輸送される機構については未だ十分に解明されていない。しかし、凝縮層の構造を制御するためには、この機構を明らかにすることがきわめて重要であり、それが本研究の最終目的でもある。

電子計算機の大容量・高速化に伴い、最近、分子動力学 (Molecular Dynamics) 法による分子運動の計算機シミュレーションが盛んに行われており、数多くの応用例<sup>2)-4)</sup>が紹介されている。また、本報告に関連する従来の研究として以下の例が挙げられる。Alder-Wainwright<sup>5)</sup>は電子計算機が実用化に入った初期の頃、すでに分子運動に関する数値解析を行っている。彼らは井戸型ポテンシャルをもつ剛体球モデルを用い、32粒子による固体と液体状態および108粒子による気液二相状態における粒子軌跡を求めた。Verlet<sup>6)</sup>はアルゴンの864粒子系にLennard-Jones 12-6型の二体ポテンシャルを適用して液体状態での熱力学的諸量を計算し、実測値と良好に一致することを示した。Woodcock<sup>7)</sup>はVerlet<sup>6)</sup>の解析方法をさらに発展させ、イオン化したアルカリ熔融塩の216粒子系に関する数値計算を行った。温度1273 [K]でのKCl, NaCl, LiClの熱力学的諸量を求め、実測値と比較し満足できる結果を得ている。最近、Abraham<sup>8)</sup>は分子運動を二次元と仮定し、分子間力にLennard-Jones 12-6型ポテンシャルを用いてMonte Carlo法で解析された研究例をレビューし、二次元モデルでも定量的に

受理日 昭和63年12月28日

\* 東京大学工学部

九州大学機能物質科学研究所・客員教授

三次元モデルと同様な結果が得られることを示している。

ここでは、凝縮現象をミクロな観点から理解するための第一段階として行った、分子動力学法によるアルゴン薄膜内での非定常エネルギー輸送に関する数値計算結果について報告する。

使用記号

- $a$  : interatomic distance [m]
  - $f$  : force [N]
  - $F$  : dimensionless force =  $f/(a \cdot k)$  [-]
  - $k$  : spring constant [N/m]
  - $m$  : mass [kg]
  - $r$  : radius [m]
  - $RND$  : random numbers [-]
  - $t$  : time [s]
  - $t_0$  : reference time =  $\sqrt{m/k}$  [s]
  - $T$  : absolute temperature [K]
  - $T_a$  : initial temperature of a film [K]
  - $T_b$  : upper surface temperature when heated stepwise [K]
  - $v$  : velocity [m/s]
  - $v_0$  : reference velocity =  $a\sqrt{k/m}$  [m/s]
  - $V$  : dimensionless velocity =  $v/v_0$  [-]
  - $x$  : space coordinate in the depth of a film [m]
  - $X$  : dimensionless space coordinate =  $x/a$  [-]
  - $y$  : space coordinate parallel to the surface of a film [m]
  - $Y$  : dimensionless space coordinate =  $y/a$  [-]
- Greek Letters
- $\gamma$  : angle [rad]
  - $\epsilon$  : Lennard-Jones potential parameter [J]
  - $\theta$  : dimensionless temperature =  $T/T_a$  [-]
  - $\kappa$  : Boltzmann constant [J/K]
  - $\tau$  : dimensionless time =  $t/t_0$  [-]
  - $\phi$  : inter molecular potential energy function [J]
- Subscripts
- $i$  : node in x-direction

- $j$  : node in y-direction
  - $m$  : space averaged values
  - $M$  : number of particles in x-direction
  - $N$  : number of particles in y-direction
  - $o$  : reference values
  - $X$  : X-direction
  - $Y$  : Y-direction
  - 1 : ( $i, j$ )
  - 2 : ( $i+1, j$ )
  - 3 : ( $i, j-1$ )
  - 4 : ( $i, j+1$ )
  - 5 : ( $i-1, j$ )
- Superscript
- : time averaged values

2. 物理モデル、基礎方程式および境界条件

薄膜状固体内でのエネルギー輸送を解析対象とし、気体粒子との相互作用は考えない。Newtonの運動方程式に従う、質点-バネ系が本モデルの基礎である。系を三次元で取り扱うのは困難ではないが、ここでは二次元であるとする。図1に示すように、薄膜を形成する粒子は質点であるとし、分子間力は最隣接粒子間でのバネ力で表されるとする。原子間距離、すなわちバネの自然長を  $a$ 、バネ定数を  $k$  とする。粒子“1” - “2”間に働く力の  $x$  方向成分は自然長からの変位に比例し、Hookの法則から次式で与えられる。

$$k[\sqrt{(x_2-x_1)^2+(y_2-y_1)^2}-a] \times$$

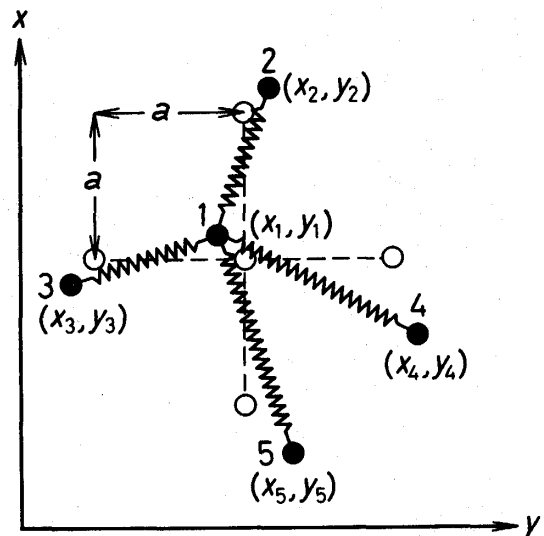


Fig. 1 A spring model for energy transfer between adjacent molecules.

$$=k\left[(x_2-x_1)-\frac{a(x_2-x_1)}{\sqrt{(x_2-x_1)^2+(y_2-y_1)^2}}\right] \quad (1)$$

ここで、 $(x_n, y_n)$  は粒子  $n$  の座標である。

式 (1) で、粒子 “1” - “2” 間の距離は、

$$\sqrt{(x_2-x_1)^2+(y_2-y_1)^2} \quad (2)$$

であり、その  $x$  方向成分は、

$$\frac{(x_2-x_1)}{\sqrt{(x_2-x_1)^2+(y_2-y_1)^2}} \quad (3)$$

を掛けて得られる。

同様の式が、粒子 “1” を取り囲む他の 4 つの粒子に関しても得られる。Newton の運動の法則から、例えば、粒子 “1” に作用する全ての力の  $x$  方向成分は、その粒子の  $x$  方向加速度と質量の積に等しいので、

$$m\frac{d^2x_1}{dt^2}=k\left[(x_2-x_1)-\frac{a}{\sqrt{1+(y_2-y_1)^2/(x_2-x_1)^2}}\right] +k\left[(x_5-x_1)+\frac{a}{\sqrt{1+(y_1-y_5)^2/(x_1-x_5)^2}}\right] +k\left[(x_3-x_1)+\frac{a}{\sqrt{1+(y_1-y_3)^2/(x_1-x_3)^2}}\right] +k\left[(x_4-x_1)+\frac{a}{\sqrt{1+(y_4-y_1)^2/(x_1-x_4)^2}}\right] \quad (4)$$

右辺第 1 項中の負号は、図 1 に示すように、粒子 “2” の  $x$  座標が粒子 “1” より大きいためである。

同様に、 $y$  方向の運動方程式は、

$$m\frac{d^2y_1}{dt^2}=k\left[(y_2-y_1)-\frac{a}{\sqrt{1+(x_2-x_1)^2/(y_2-y_1)^2}}\right]$$

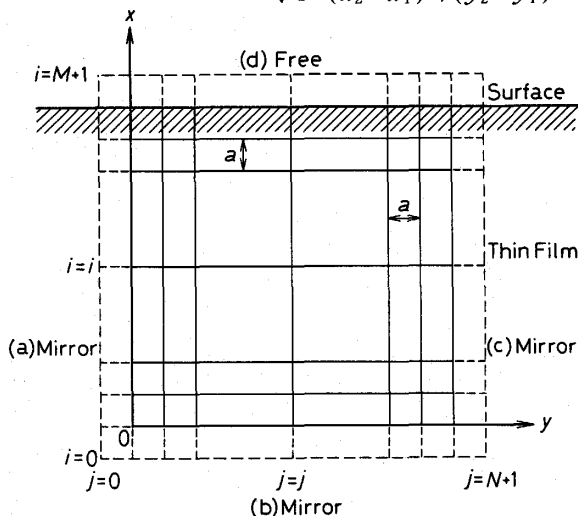


Fig. 2 Grid arrays for a two-dimensional molecular film.

$$+k\left[(y_5-y_1)-\frac{a}{\sqrt{1+(x_1-x_5)^2/(y_5-y_1)^2}}\right] +k\left[(y_3-y_1)+\frac{a}{\sqrt{1+(x_1-x_3)^2/(y_1-y_3)^2}}\right] +k\left[(y_4-y_1)-\frac{a}{\sqrt{1+(x_1-x_4)^2/(y_4-y_1)^2}}\right] \quad (5)$$

式 (4), (5) は薄膜内の全粒子に適用できる。実際に計算を行う場合、全領域を対象にするのは不可能なので、図 2 に示すように、その一部を  $M \times N$  個の粒子でモデル化した。

薄膜の境界 (a), (b), (c) には、図 3 に例示した鏡面境界条件を用いた。図から、系の領域外にある粒子 “3” は、粒子 “1” との間に関係がある。

$$x_3=x_1 \quad (6)$$

$$\frac{y_3+y_1}{2}=-\frac{a}{2} \quad (7)$$

この条件は、境界上の粒子がその鏡像と作用し合うことを表し、壁に衝突する波と同様な振舞いをする。

以上から、図 2 の境界 (a), (b), (c) に対して、次の条件式が得られる。

$$(a) \quad \left. \begin{aligned} x_{i,0} &= x_{i,1} \\ y_{i,0} &= -y_{i,1} - a \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

$$(b) \quad \left. \begin{aligned} x_{0,j} &= -x_{1,j} - a \\ y_{0,j} &= y_{1,j} \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

$$(c) \quad \left. \begin{aligned} x_{i,N+1} &= x_{i,N} \\ y_{i,N+1} &= -y_{i,N} + (2N-1)a \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

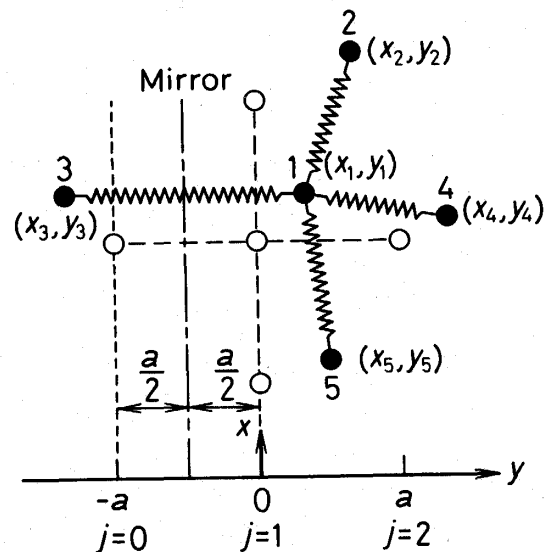


Fig. 3 Symmetric treatment for an outer molecule number 3 at a mirror boundary.

薄膜表面 (d) に対しては、自由境界条件として、次式が得られる。

$$(d) \quad \left. \begin{aligned} x_{M+1,j} &= x_{M,j} + a \\ y_{M+1,j} &= y_{M,j} \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

系を一般化して取り扱うため、次式を導入し式の無次元化を行う。

$$X_i = \frac{x_i}{x_o}, \quad Y_i = \frac{y_i}{x_o}, \quad \tau = \frac{t}{t_o} \quad (12)$$

例えば、式 (12) を式 (4) に代入し整理すると、

$$\frac{m}{t_o^2 k} \cdot \frac{d^2 X_1}{d\tau^2} = [(X_2 - X_1) - \frac{a/x_o}{\sqrt{1+(Y_2 - Y_1)^2/(X_2 - X_1)^2}} + [\dots] + [\dots] + [\dots]] \quad (13)$$

Hellums-Churchill<sup>9)</sup> に習い、未知のパラメータ  $t_o, x_o$  を含む無次元グループを 1 と置くと、次の関係が得られる。

$$\left. \begin{aligned} t_o &= \sqrt{m/k} \\ x_o &= a \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

以上から、時間と長さの代表値として式 (14) を用いて式 (4), (5) を無次元化すると、

$$\frac{d^2 X_1}{d\tau^2} = [(X_2 - X_1) - \frac{1}{\sqrt{1+(Y_2 - Y_1)^2/(X_2 - X_1)^2}} + [\dots] + [\dots] + [\dots]] \quad (15)$$

$$\frac{d^2 Y_1}{d\tau^2} = [(Y_2 - Y_1) - \frac{1}{\sqrt{1+(X_2 - X_1)^2/(Y_2 - Y_1)^2}} + [\dots] + [\dots] + [\dots]] \quad (16)$$

を得る。

### 3. 数値解析方法および系のパラメータ

粒子 ( $i, j$ ) の速度成分は、

$$V_{X,i,j} = dX_{i,j}/d\tau \quad (17)$$

$$V_{Y,i,j} = dY_{i,j}/d\tau \quad (18)$$

である。

一方、式 (15), (16) の右辺は粒子 ( $i, j$ ) に作用する  $X, Y$  方向の正味の力なので、これを  $F_{X,i,j}, F_{Y,i,j}$  と置くと、加速度成分は、

$$\frac{d^2 X_{i,j}}{d\tau^2} = F_{X,i,j} \quad (19)$$

$$\frac{d^2 Y_{i,j}}{d\tau^2} = F_{Y,i,j} \quad (20)$$

で与えられる。

式 (17) ~ (20) を  $\tau = \tau \sim \tau + \Delta\tau$  で積分すると、

$$X_{i,j}(\tau + \Delta\tau) = X_{i,j}(\tau) + V_{X,i,j}(\tau) \cdot \Delta\tau \quad (21)$$

$$Y_{i,j}(\tau + \Delta\tau) = Y_{i,j}(\tau) + V_{Y,i,j}(\tau) \cdot \Delta\tau \quad (22)$$

$$V_{X,i,j}(\tau + \Delta\tau) = V_{X,i,j}(\tau) + F_{X,i,j}(\tau) \cdot \Delta\tau \quad (23)$$

$$V_{Y,i,j}(\tau + \Delta\tau) = V_{Y,i,j}(\tau) + F_{Y,i,j}(\tau) \cdot \Delta\tau \quad (24)$$

を得る。本解析では、式 (21) ~ (24) を用い、時間  $\tau$  に関して前進的に積分し粒子の位置と速度成分を求めた。

初期条件に関しては、粒子 ( $i, j$ ) は各格子点上

$$X_{i,j} = i-1 \quad (25)$$

$$Y_{i,j} = j-1 \quad (26)$$

に配列されているとし、速度成分は一様乱数  $RND_{i,j}$  を用いて次式で与えられると仮定した。

$$V_{X,i,j} = V_a \cdot \sin r \quad (27)$$

$$V_{Y,i,j} = V_a \cdot \cos r \quad (28)$$

$$r = 2\pi \cdot RND_{i,j} \quad (0 \leq RND_{i,j} < 1) \quad (29)$$

ここで、無次元速度  $V_a$  は初期温度  $T_a$  に対応する速度である (式 (37) 参照)。

薄膜を形成する物質としてアルゴンを考え、以下のようにして系のパラメータを決めた。

まず、バネ定数  $k$  は、Lennard-Jones 12-6 型ポテンシャル

$$\phi(r) = \epsilon \left[ \left( \frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \cdot \left( \frac{a}{r} \right)^6 \right] \quad (30)$$

から次の方法で近似した。なお、 $\epsilon$  はポテンシャルの平衡点のエネルギーレベルである。式 (30) を距離  $r$  で微分すると二粒子間に作用する力  $f(r)$  が求まり、

$$f(r) = -\frac{d\phi}{dr} = 12 \cdot \frac{\epsilon}{a} \cdot \left[ \left( \frac{a}{r} \right)^{13} - \left( \frac{a}{r} \right)^7 \right] \quad (31)$$

となる。式 (31) を平衡点  $a$  の近傍で Taylor 展開し 1 次の項で打ち切ると、

$$\begin{aligned} f(a + \delta r) &= f(a) + \frac{df}{dr} \Big|_{r=a} \delta r + \dots \\ &= -72 \cdot \frac{\epsilon}{a^2} \cdot \delta r \end{aligned} \quad (32)$$

が得られ、力と変位間の比例定数として定義されるバネ定数  $k$  は次式で与えられる。

$$k = 72 \cdot \frac{\epsilon}{a^2} \quad (33)$$

二次元系での粒子の温度  $T$  と運動エネルギーの間に

は次の関係がある。

$$\frac{2}{2} \cdot \kappa T = \frac{1}{2} \cdot mv^2 \quad (34)$$

$\kappa$  は Boltzmann 定数,  $v$  は粒子の速度である。上式から, 粒子の速度はその温度と,

$$v = \sqrt{2\kappa T/m} \quad (35)$$

の関係で対応付けられる。一方, 代表速度  $v_0$  は代表時間  $t_0$  と代表長さである原子間距離  $a$  を用いて,

$$v_0 = a/t_0 = a\sqrt{k/m} \quad (36)$$

で与えられる。以上から, 粒子の無次元速度  $V$  を次式で定義する。

$$V = v/v_0 = \sqrt{2\kappa T/m} / (a\sqrt{k/m}) = \sqrt{2\kappa T/k} / a \quad (37)$$

無次元温度は初期温度  $T_a$  を用いて,

$$\theta = \frac{T}{T_a} = \left(\frac{V}{V_a}\right)^2 \quad (38)$$

で定義する。

アルゴンに対して次の値<sup>10)</sup>,

$$\left. \begin{aligned} a &= 3.83 \times 10^{-10} & [\text{m}] \\ m &= 6.63 \times 10^{-26} & [\text{kg}] \\ \epsilon &= 16.5 \times 10^{-22} & [\text{J}] \end{aligned} \right\} \quad (39)$$

を用いると, 系のパラメータは以下ようになる。

$$\left. \begin{aligned} k &= 72\epsilon/a^2 = 8.10 \times 10^{-1} & [\text{N/m}] \\ t_0 &= \sqrt{m/k} = 2.86 \times 10^{-13} & [\text{s}] \\ v_0 &= a\sqrt{k/m} = 1.34 \times 10^3 & [\text{m/s}] \end{aligned} \right\} \quad (40)$$

#### 4. 数値計算結果

27×27粒子から成るアルゴン薄膜を考え, 初期温度  $T_a=10$  [K] で熱平衡している状態から, 表面温度を  $T_b=25$  [K] にステップ加熱した場合の過渡応答について数値計算を行った。

まず,  $T_a=10$  [K] での熱平衡状態を得るために, 式 (21) ~ (24) を境界条件 (8) ~ (11) と初期条件 (25) ~ (29) のもとで解いた。最初の  $10^4$  時間ステップの間は各時刻毎に粒子の平均温度

$$\theta_m(\tau) = \frac{\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N \theta_{i,j}(\tau)}{M \cdot N} \quad (41)$$

と初期温度の比を計算し, その値が常に1となるように, 粒子速度を次式で修正した。

$$V_{X,i,j}(\tau) = \frac{V_{X,i,j}(\tau)}{\sqrt{\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N V_{i,j}^2(\tau) / (M \cdot N \cdot V_a^2)}} \quad (42)$$

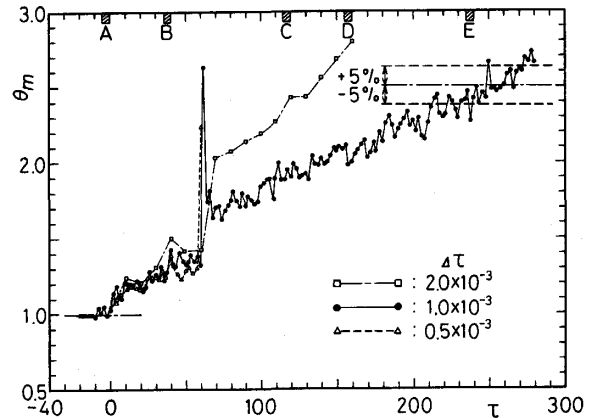


Fig. 4 Transient response of the average molecular temperature in a system after a step increase on the surface molecules.

$$V_{Y,i,j}(\tau) = \frac{V_{Y,i,j}(\tau)}{\sqrt{\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N V_{i,j}^2(\tau) / (M \cdot N \cdot V_a^2)}} \quad (43)$$

続く  $10^4$  時間ステップでは, 修正を加えずに計算を続行し, 計算が発散することなく系の平衡状態が保たれることを確かめた。その様子は図4に, 無次元時間が  $\tau=-10 \sim 0$  での  $\theta_m$  の動きに示されており, 平衡温度  $\theta_a=1$  のまわりでわずかに変動しているに過ぎない。

以上の計算に続き, 時刻  $\tau=0$  で表面粒子の温度  $\theta_{M,j}$  をステップ的に2.5に上げ, 薄膜内の非定常温度分布を計算した。なお, 式 (37) からわかるように, この操作は表面粒子の速度を  $V_b = \sqrt{2.5} V_a$  に上げたことに対応する。

非定常過程では表面粒子の平均温度が常に2.5となるように, 平衡状態の場合と同様に, 表面粒子のみの速度を次式で修正した。

$$V_{X,M,j}(\tau) = \frac{V_{X,M,j}(\tau)}{\sqrt{\sum_{j=1}^N V_{M,j}^2(\tau) / (N \cdot V_b^2)}} \quad (44)$$

$$V_{Y,M,j}(\tau) = \frac{V_{Y,M,j}(\tau)}{\sqrt{\sum_{j=1}^N V_{M,j}^2(\tau) / (N \cdot V_b^2)}} \quad (45)$$

図4の  $0 < \tau$  に, 非定常状態での  $\theta_m$  の変化を2000時間ステップ毎に示した。一点鎖線, 実線, 破線は  $\Delta\tau$  が  $1/500, 1/1000, 1/2000$  の場合の結果である。  $\Delta\tau = 1/500$  の応答曲線は  $70 < \tau$  で実線から大きく離れて

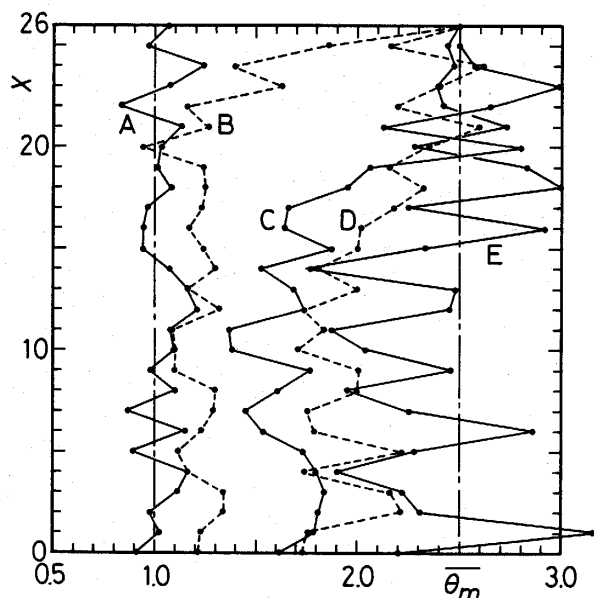


Fig. 5 The molecular temperature versus depth of a thin film.

いるが、 $\Delta\tau=1/2000$ での結果は $\tau=60$ に至るまで実線と良く一致している。そこで、本解析ではCPU時間と計算精度を考慮し、 $\Delta\tau=1/1000$ を採用した。

平均温度は $\tau=260$  ( $t=7.44\times 10^{-11}$  [s])で、次の平衡温度である $\theta_m=\theta_b=2.5$ に到達している。計算は $\tau=280$ で打ち切ったが、この時刻での $\theta_m$ は $\tau=60$ の値とほぼ同じで、平衡温度を5%以上うわまわっている。しかし、 $\tau=260$ までの曲線の傾向は上に凸であり、収束解が得られていると思われる。

図5に以下の5期間における薄膜の厚さ方向の温度分布を示す。参考のため、図4にも斜線でこの期間を示した。

期 間	A : $\tau = -5 \sim 0$
"	B : $\tau = 35 \sim 40$
"	C : $\tau = 115 \sim 120$
"	D : $\tau = 155 \sim 160$
"	E : $\tau = 235 \sim 240$

$X=26$ が表面である。温度 $\theta_m$ は各層の平均粒子温度を $\tau=\tau\sim\tau+5000\cdot\Delta\tau$ の期間に渡って時間平均したものであり、次式で定義した。

$$\overline{\theta}_m(X, \tau) = \frac{1}{5000} \sum_{k=1}^{5000} \left[ \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \theta_{i,j}(\tau+k\cdot\Delta\tau) \right] \quad (46)$$

期間Aでは $\overline{\theta}_m$ のX方向の平均値は初期温度 $\theta_a=1$ に等しい。期間Bでは表面温度が境界条件で常に2.5に保たれているので、その近傍は温度上昇しているが、

他の大部分は $\overline{\theta}_m=1.2$ 程度である。この分布は、裏面を断熱した無限平板の表面をステップ加熱した場合の非定常温度分布ときわめて良く似ている。期間Cでは、 $X=23$ 前後で表面温度2.5をかなり上回る部分が見られるが、 $X<20$ での分布はBの傾向と同様である。期間Eになると、温度が全体的に高くなるので、その変動はAと比較して大きくなっている。この段階では薄膜の温度が次の平衡温度 $\theta_b=2.5$ にはほぼ近づいているので、そのまわりで振動しているのがわかる。

期間A, C, Eに属する $\tau=0, 120, 24$ の瞬間での粒子速度 $V_{i,j}(\tau)$ のベクトルと、式(38)で計算される温度 $\theta_{i,j}(\tau)$ を図6-(a), (b), (c)および(a)', (b)', (c)'に示す。なお、粒子の温度が $\theta=1$  (10[K]), 2.5 (25[K])の場合の速度は $V=0.048$  (64.5[m/s]), 0.0762 (102[m/s])である。図を見やすくするため、ステップ加熱された表面( $X=26$ )を含む各境界上の温度は示していない。

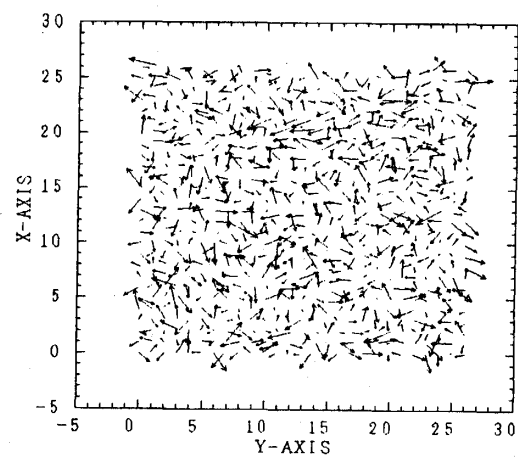
薄膜内での現象を瞬間的にとらえると、速度ベクトルに示したように、粒子のきわめて不規則な動きが観察される。時間経過と共に温度が上昇すると、運動がさらに激しくなっていく様子が見られる。この変化をスカラー量で表したのが粒子温度である。図(a)'に示した初期温度 $\theta_a=1$ で熱平衡を保っている比較的穏やかな状態から、ステップ加熱により凹凸の激しい温度分布に移っていく。しかし、このような分布も空間と時間に関して平均化すると、図5に示した温度分布として表される。

## 5. 結 言

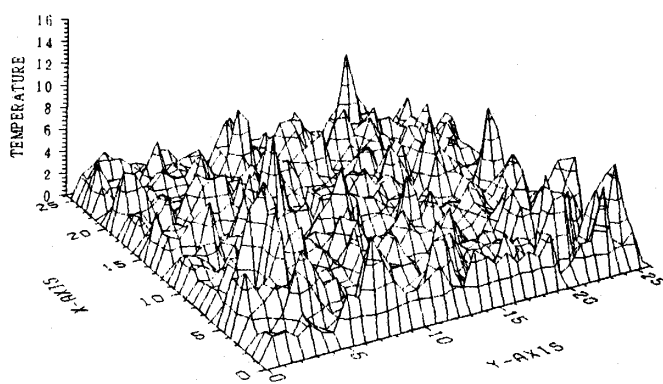
分子運動による薄膜内での非定常エネルギー輸送を理解するために、質点-バネ系から成る二次元モデルを構築した。このモデルを用いて $27\times 27$ 粒子で構成されるアルゴン薄膜の熱平衡状態をシミュレートできることを示し、表面をステップ加熱した場合の数値計算を行った。その結果、薄膜内の非定常温度分布は無限平板を同じ条件で加熱した場合の分布ときわめて良く似ていることがわかり、モデルと計算の妥当性を間接的に確かめることができた。

## 引 用 文 献

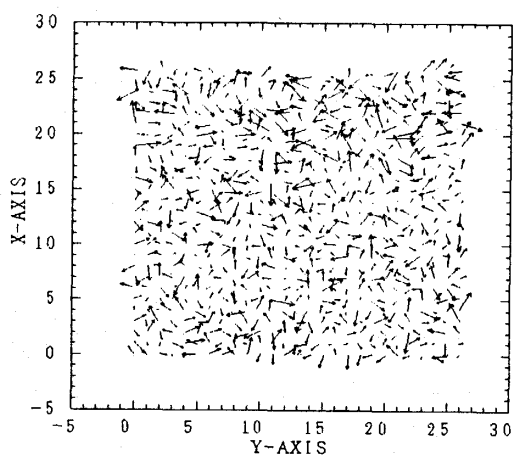
- 1) 金原 繁・藤原英夫, 薄膜, 裳華房(1987).
- 2) 堂山昌男・山本良一編, 計算材料科学, 海文堂(1987).
- 3) 田中 實・山本良一編, 計算物理学と計算化学,



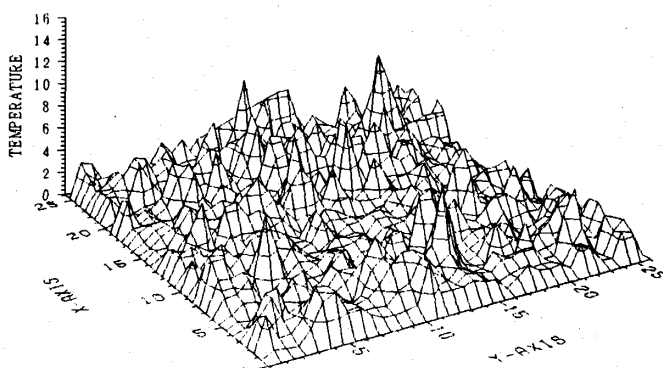
(c)



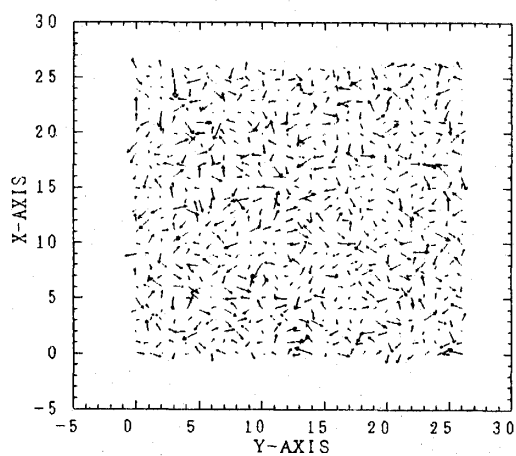
(c)'



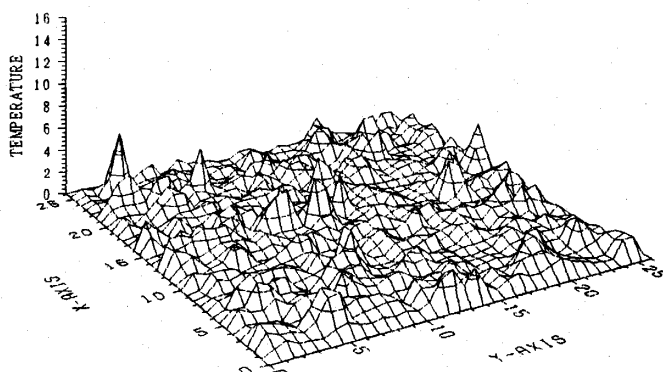
(b)



(b)'



(a)



(a)'

Fig. 6 Instantaneous velocity vectors at  $\tau=0, 120$  and  $240$  in (a), (b) and (c) respectively. The molecular temperatures, i.e., the square of the velocity, are graphically shown in (a)', (b)' and (c)' respectively.



- 海文堂 (1988).
- 4) 岡田 勲, 「解説 液体構造の計算機シミュレーション」, 日本結晶成長学会誌, Vol. 15, No. 2, 166-179 (1988).
  - 5) Alder, B.J. and Wainwright, T.E, "Studies in Molecular Dynamics. I. General Method", *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 31, No.2, 459-466 (1959).
  - 6) Verlet, L., "Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules", *Physical Review*, Vol.159, No.1, 98-103 (1967).
  - 7) Woodcock, L. V., "Isothermal Molecular Dynamics Calculations for Liquid Salts", *Chemical Physics Letters*, Vol.10, No.3, 257-261 (1971).
  - 8) Abraham, F. F., "The Phases of Two-Dimensional Matter, Their Transitions, and Solid-State Stability: A Perspective via Computer Simulation of Simple Atomic Systems", *Physics Reports (Review Section of Physics Letters)* 80, No.5, 339-374 (1981).
  - 9) Hellums, J. D. and Churchill, S. W., "Dimensional Analysis and Natural Circulation", *Chemical Engineering Progress Symposium Series*, Vol. 57, No. 32, 75-79 (1961).
  - 10) Hirschfelder, J. O., Curtiss, C. F. and Bird, R. B., *Molecular Theory of Gases and Liquids*, John Wiley & Sons, Inc., New York (1954).