

# DEMシミュレーションによる充填率と粒子間距離を考慮した見掛け配位数の関係式の検討

岡山大学 工学部 物質応用化学科 坂元玄太, 押谷潤, 後藤邦彰, 吉田幹生

**目的** 粒子層の配位数は層強度, 熱伝導, 固固反応などの分野で重要なパラメータである。充填率により配位数は変化するので, 充填率と配位数の関係式の導出是有用である。しかし, 非接触であってもそれらの現象に大きな影響を与える場合がある。例えば, 湿潤粒子の場合は粒子間が多少離れていても液架橋が生じ, 層強度が増加する。したがって, 充填率と粒子間距離をパラメータとして含んだ見掛け配位数の関係式が必要となるが, これまでそれらの報告はなされていない。そこで本研究ではDEMシミュレーションを用いて粒子層を作製し, 各粒子間距離での見掛け配位数を算出した。また, その結果を関係式として導出することを試みた。

**内容**  $400\text{mm} \times 400\text{mm}$  の周期境界空間に直径約10mmの球形粒子20000個を落下充填し, 粒子層を作製した。その後, 中間粒子層の充填率と平均見掛け配位数を算出した。結果より, この関係式の導出を試みた。

**結果** 充填率と見掛け配位数の関係は粒子間距離によらず3次関数で表現できることが示された。本結果を関係式で表し, シミュレーション結果と比較したところ, 本関係式は比較的高精度(両者の差が平均0.25個)であることが確かめられた。

利用した計算機 PCクラスタ; CPU時間 約60時間; 並列化 なし