

分子動力学を用いた運動接触線近傍の流れ場解析

研究代表者：伊藤 高啓（中部大学 工学部 機械工学科）

インクジェットプリントやコーティングなど液体が固体表面を濡れ拡がる際には濡れ縁の先端である接触線の挙動やそこでの液体界面と固体面のなす角である接触角の振る舞いが重要となる。接触角は一般に接触線の移動速度によって変化するが、このような依存性は、接触線から分子スケール程度の距離での界面の傾きから定義される「微視的接触角」の速度依存性と、それよりも離れた領域での粘性応力による界面湾曲（粘性湾曲）の速度依存性とのふたつによって決まると言われている [1,2]。後者の粘性湾曲は理論や実験によりその詳細が明らかにされているが、微視的接触角については不明確な点が多い。いくつかの研究はアルゴンなどで代表される単原子分子の分子間引力を模擬した液体や固体を対象として微視的接触角などを評価しているが、工業的に用いられる液体と固体の組み合わせで微視的接触角の接触線速度依存性を明らかにした例はほとんど見当たらない。

本研究では自己組織化単分子膜（Self-Assembled Monolayer, SAM）上を移動するエチレングリコールを対象として、微視的接触角や接触線の運動性と流れ場の関係を明らかにすることを目的として分子動力学解析を行った。

計算は図 1 に示すような、互いに逆方向に動く 2 枚の固体壁面でエチレングリコールが

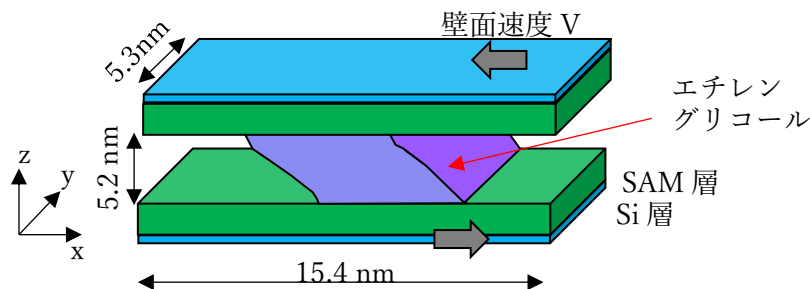


図 1 計算体系

はさまれた擬 Couette 体系で行った。なお、これ以降 z の小さい方の固体壁が動く方向を x 軸とする。固体壁は一番外側の Si 層に SAM 分子が結合された構造となっている。SAM 分子は 18 個の炭素からなるアルキル鎖とした。計算には汎用の分子動力学コードである LAMMPS を用いた。SAM およびエチレングリコールの分子モデルには有機分子の分子動力学計算で広く使われている OPLS-AA を用いた。クーロン力の計算には Particle-Particle Particle-Mesh 法を用いた。境界条件はいずれの方向とも周期境界条件とした。 z 方向は本来周期境界条件である必要はないため、隣接するセルからの影響の緩和を目的として z が大きい方の固体面の上面から計算セルの上端までの間に 5nm の空隙を設けている。計算では、まず静止平衡状態を 100 万ステップ（2000ps）程度とった後、壁面を一定の加速度で目標速度まで加速させ、その後壁面を一定速度で動かし続けることで、ほぼ定常な擬 Couette 流れ場を作成した。このときの壁面速度を V とする。なお、壁面の加速に要する時

間は最大で 20ps である。

図 2 には $V=1$ m/s のときの定常状態におけるスナップショットを示す。せん断により液滴が平行四辺形状になっているのがわかる。図 3 には定常状態における接触角 θ_m を接触線の壁面に対する速度 V_{CL} に対してプロットしたものを示す。図から接触角は接触線速度に対して概ね線形に変化することがわかる。このような速度依存性はしばしば壁面における流体と固体の「滑り」を用いて説明される[2]。この際の滑りは摩擦係数 β 、液面での摩擦によるせん断応力 τ とそこでの固液の速度差(滑り速度 v_s)を用いて以下のように定量化される。

$$\tau = \beta v_s \quad (1)$$

一般に β は定数とみなされるが、本計算体系における β を求めたところ、過去の単原子分子流体を用いた研究と同様にせん断ひずみ速度に対する依存性を示した。したがって今後は β が非一様である場合の接触線近傍流れ場のモデル化が必要となる。

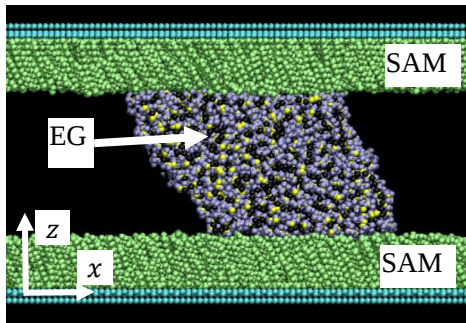


図 2 せん断を受ける液滴のスナップショット ($V=1$ m/s, $t=7080$ ps).

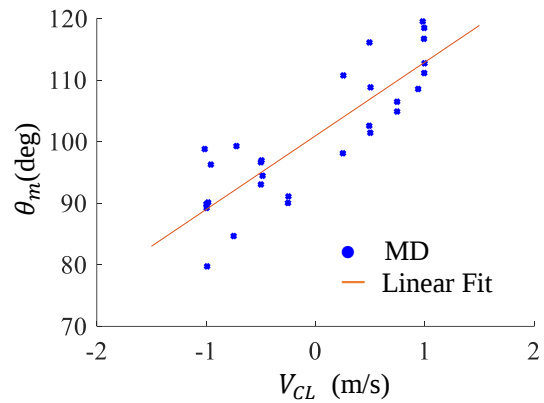


図 3 微視的接触角の接触線速度 V_{CL} への依存性

[1]Cox, R. G.: The dynamics of the spreading of liquids on a solid surface. Part 1. Viscous flow, *J. Fluid Mech.*, **168** (1986), 169-194.

[2]Qian, T., Wang, X. -P. and Sheng, P.: Molecular scale contact line hydrodynamics of immiscible flows, *Phys. Rev. E*, **68** (2003), 016306.

成果発表

1. 森田 浩生, 伊藤 高啓, 加藤健司, 脇本辰郎, 自己組織化単分子膜上における微視的接触角の流れ体系依存性に関する分子動力学解析, 混相流シンポジウム 2024(2024).
2. 伊藤 高啓, 森田 浩生, 加藤 健司, 脇本 辰郎, 固液界面での滑りと三相接触線近傍の界面形状, 第 38 回数値流体力学シンポジウム(2024).