

利用事例紹介 8

水と油の界面張力計算

分子動力学法により、2種類の液体分子の集合体で積層構造を作製し、界面における応力から界面張力を計算することができます。ここでは水と油(シリコンオイル、ステアリン酸ブチル)の計算例を紹介します。

◆ 計算フローチャート

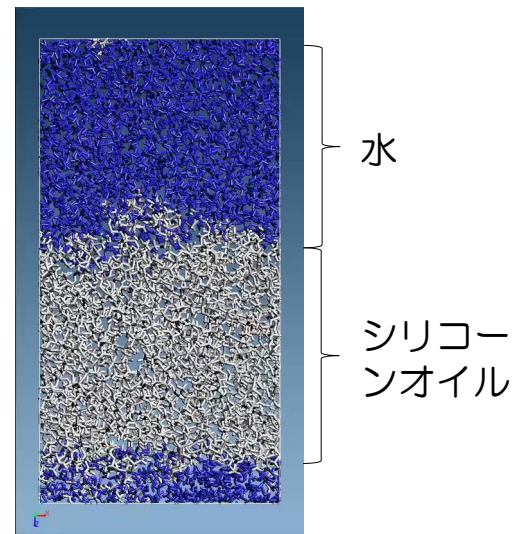
モノマーモデラ、ポリマーモデラ
全原子モデル、力場：dreiding

初期配置(積層構造)作製、緩和
(温度：300K)

界面張力の計算

$$\sigma = \frac{L}{2} \left(\langle p_{zz} \rangle - \frac{\langle p_{xx} \rangle + \langle p_{yy} \rangle}{2} \right)$$

σ : 界面張力
 L : 界面の法線方向のセルサイズ
 p_{xx} , p_{yy} , p_{zz} : ストレス



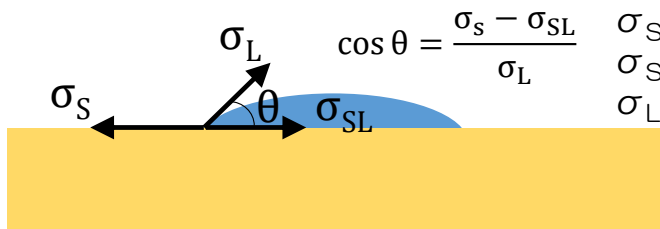
◆ 界面張力について

θ : 接触角

σ_{SL} : 固体/液体の界面張力

σ_S : 固体の表面張力

σ_L : 液体の表面張力



界面張力の例として、接触角を示す式に用いられます。2種類の物体の界面に平行方向に働く力が界面張力になります。

◆ 計算結果

	界面張力(dyn/cm)
シリコンオイル/水	67
ステアリン酸ブチル/水	45
シリコンオイル/ステアリン酸ブチル	5

油と油に比べて水と油では大きい界面張力が得られました。界面張力が大きいことは互いに混ざりにくい現象やはじきやすい現象の一因となります。