

高せん断速度下におけるイオン液体の粘性率のシミュレーション

Simulation of viscosity of ionic liquid under high shear rate conditions

高度情報科学技術研究機構¹, 筑波大数理²,

○山田 達矢¹, 牛山 浩¹, 手島 正吾¹, 藤田 淳一²

Research Organization for Information Science and Technology (RIST)¹, Univ. of Tsukuba²,

○Tatsuya Yamada¹, Hiroshi Ushiyama¹, Syogo Tejima¹, Jun-ichi Fujita²

E-mail: tyamada@rist.jp

優れた機械的特性を持つカーボンナノチューブをイオン液体中に分散させることで形成されるバッキーゲルは、流動性を持ちつつも耐衝撃性を備えた新素材開発の観点から非常に興味深い。このバッキーゲルは特徴的な粘弾性特性を持ち[1]、その分子的メカニズムには内部に含むイオン液体のせん断変形下での挙動が関与していると考えられるが、詳しく明らかになっていない。

本研究では、高せん断速度領域におけるイオン液体 (1-Ethyl-3-methylimidazolium Tetrafluoroborate) の粘性率のせん断速度依存性を、全原子分子動力学(MD)シミュレーションを用いて調査した。粘性率は、イオン液体系にせん断変形を加えた時に生じる応力の大きさより評価した。MDシミュレーションは、Lees-Edwards 境界条件、及び、SLLOD 法を適用した LAMMPS プログラムパッケージを用いて実行した。

応力の大きさから計算した粘性率(Fig. 1. ○)は、せん断速度が 10^9 [1/s] 以下ではほぼ一定値となり、アインシュタイン=ストークスの関係式を用いて拡散係数から求めた粘性率(Fig. 1. □)とほぼ一致した。せん断速度が 10^9 [1/s] より大きい場合は、粘性率はせん断速度の上昇に伴って低下した。この顕著なシェアシンニングは、静電相互作用を考慮しない MD 計算 (Fig. 1. +) において粘性率の低下量が小さかったことから、イオン液体に大きな粘性率を与えている流動活性化エネルギーの静電相互作用成分が高速せん断流下で減少することが原因であると考えられた。

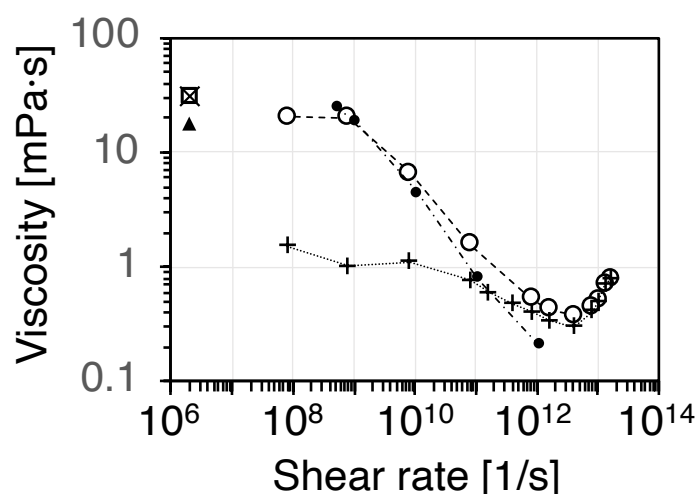


Fig. 1. The dependence of the viscosity of ionic liquid on the shear rate calculated by the MD simulations.

○ (+): Calculated with (without) the electrostatic interactions under continuous shear flow, ●: Calculated with the electrostatic interactions under vibrational shear flow, □ (▲): Calculated from the diffusion coefficient in the MD simulations (experiments), and ×: Experimental value.

本研究は、防衛装備庁安全保障技術研究推進制度 JPJ004596 の支援を受けて実施した。

[1] T. Fukushima *et. al.*, *SCIENCE* **300**, p2072–2074 (2003).