

鳥取大・工(正) 松岡 広成 鳥取大・工(正) 福井 茂寿 鳥取大・院(学) *山根 加津子

1. はじめに

二つの固体表面が、液体を介して分子の直径の十倍(数～数十nm)程度まで近づくと、二面間には、構造力と呼ばれる力が働くことがわかっている^{1), 2)}。

本研究では、液体で満たされた平面・球面間に働く液体構造圧力を考慮し、平面に球体を近づけた時、球体がどのような運動をするかを、コンピュータシミュレーションによって解析した。

前報³⁾では、二面間に介在する液体分子の直径は1nmに固定して計算を行っていたが、本報では特に液体分子の大きさをさまざまに変化させた時の、運動への影響に注目し解析を行った。

2. 構造力のしくみ^{1), 2)}

図1は、固体表面間の液体分子の状態を模式的に示したものである。この図から、二面間距離 D が液体分子の直径 σ の整数倍となるところでは液体分子の密度が高くなり、その間では密度が低くなることわかる。このような、固体表面間の液体分子の周期的な密度変化によって、構造力は発生する。

図2は、構造圧力を模式的に表したものであり、図中のaからdは、図1の(a)から(d)に対応している。密度の高い所では斥力が、密度の低い所では引力が発生していることを示している。構造力は、二面間距離に対して指数関数的に減衰する振動力であり、また振動の周期は二面間に介在する液体分子の分子直径にほぼ等しい、という性質がある。

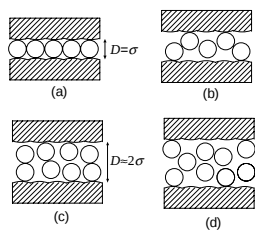


Fig. 1 Density of liquid molecules

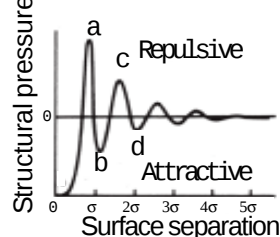


Fig. 2 Structural pressure

3. 解析モデル

図3のように、平面に向かって、質量 m 、半径 R の球が衝突するような運動を考えると、式(1)が成り立つ。ただし、 F は二面間に働く力、 p は構造圧力を表している。式

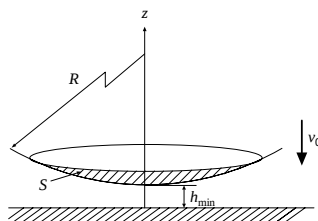


Fig. 3 Coordinate for impact motion

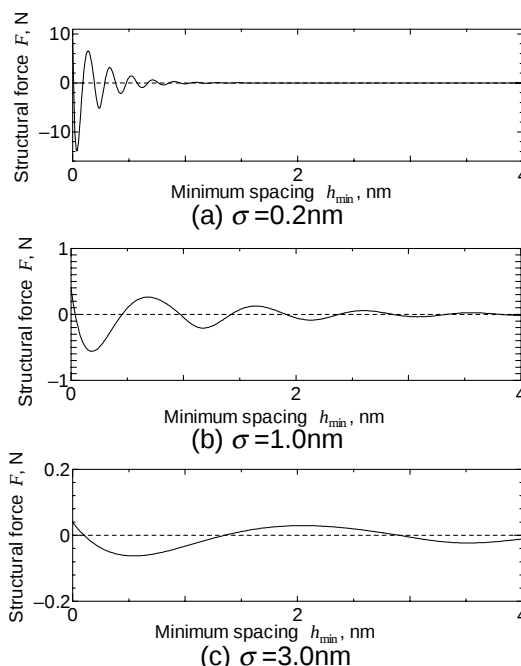


Fig. 4 Relation between minimum spacing and structural force ($R=20m$)

(1)を数値的に解くことによって解析を行った。

$$m\ddot{z} = F = \iint_S p dS \quad (1)$$

4. 解析結果

4.1 最小すきまとその間に働く力の関係

図4は、球面半径 $R=20m$ の場合について、二面間に介在する液体の分子直径 s を0.2, 1.0, 3.0nmと変化させて、二面間の最小すきま h_{min} とその間に働く力 F との関係を計算したものである。

この図から、二面間のすきまが大きいときはほとんど力は働かないが、すきまが小さくなるほど振幅が大きくなることわかる。

また、液体分子の直径が大きくなるほど振動の周期が長くなることわかる。さらに、液体分子の直径が小さくなるほど振動の振幅が大きくなることもわかる。

4.2 衝突運動の時間変化

図5は、衝突運動を行った際の、二面間の最小すきま h_{min} の時間変化を表したものである。計算条件は、球の質量 m を1.0mg、初速度 v_0 を-2.0mm/s、半径 R を0.5mとした。

図5(a)は、液体分子の直径 s を3.0nmとして計算した結果である。この図から、構造力を考えない場合は一定の速度で落下し、7.5μsec過ぎたところで平面に衝突するが、構造力を考慮すると球は速度を変動

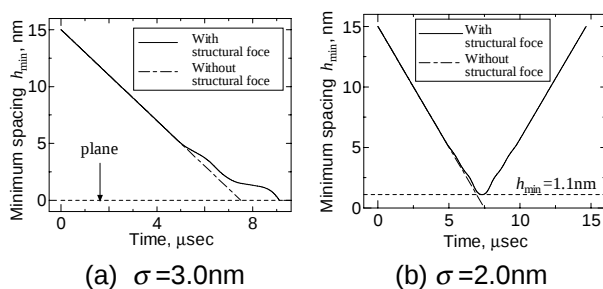


Fig. 5 Calculation results

させながら平面に近づき、約9μsec過ぎたあたりで平面に衝突することがわかる。

図5(b)は、液体分子の直径 σ を2.0nmとして計算した結果である。この場合も先ほどと同じように、球は速度を変動させながら平面に近づくことがわかる。しかし、この場合は二面間の最小すきまが約1.1nmとなったところで跳ね返され、平面に衝突しないことがわかった。

4.3 最小すきまとポテンシャルエネルギーの関係

図6は、図4に示した二面間に働く力を積分して、ポテンシャルエネルギーを求めたものである。二面間のすきまの大きいところでは構造力によるポテンシャルエネルギー U_0 はほとんど0である。したがって、初期の力学的エネルギーは運動エネルギー E_0 のみとなり、 $E_0 = mv_0^2/2$ で求められる。図6から、 $E_0 = 0.015\text{ nJ}$ のときの球が跳ね返される位置は、 $\sigma = 3.0\text{ nm}$ の場合は $h_{\min} = 1.62\text{ nm}$ (図6のA)、 $\sigma = 1.0\text{ nm}$ の場合は $h_{\min} = 1.56\text{ nm}$ (同B)、 $\sigma = 0.2\text{ nm}$ の場合は $h_{\min} = 0.69\text{ nm}$ (同C)となり、それぞれ異なることがわかる。さらに、質量や初速度を大きくし、初期の力学的エネルギーを大きくしていくと、跳ね返される位置は離散的に平面に近づき、ポテンシャルエネルギーの最大値を超えると平面に衝突する。

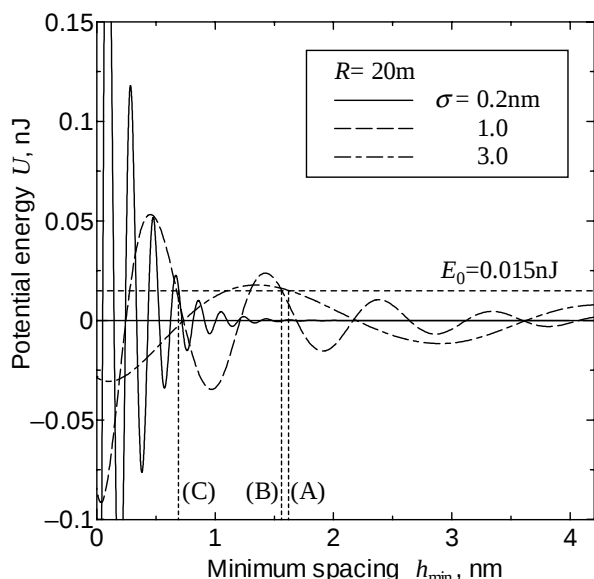


Fig. 6 Relation between minimum spacing $h_{\min}$ and potential energy U ($\sigma = 0.2, 1.0, 3.0\text{ nm}$)

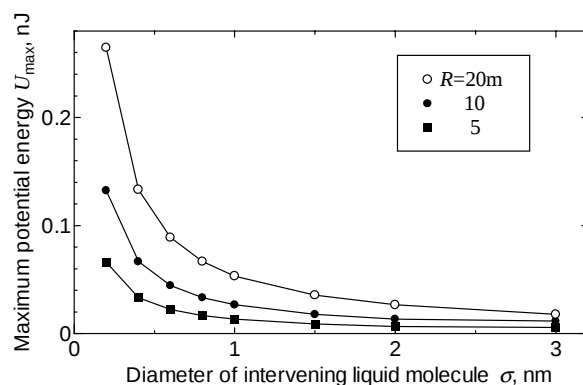


Fig. 7 Relation between maximum potential energy $U_{\max}$ and diameter of intervening liquid molecule σ ($R = 5, 10, 20\text{ nm}$)

図7は、球の半径 R を5, 10, 20nmと変化させたときの、液体分子の直径と最大ポテンシャルエネルギーの関係を示したものである。最大ポテンシャルエネルギーは、介在する液体が球を平面に衝突させずに跳ね返すことのできる、球の最大運動エネルギーを意味する。

この図から、最大ポテンシャルエネルギーは液体分子の直径の増加に対して急激に小さくなることがわかる。また、球の直径が大きいほど最大ポテンシャルエネルギーは大きくなることがわかる。

以上から、液体分子の直径 σ は小さいほど球が跳ね返される位置は平面に近づく。また、液体分子の直径 σ は小さいほど、球は平面に衝突しにくくなる。

5. おわりに

本研究では、液体で満たされた非常に狭いすきまにおいて発生する液体構造力を考慮して、平面に向かって球が衝突する運動を想定し、二面間に介在する液体分子の大きさに注目してシミュレーションを行った。得られた結果は以下のとおりである。

- 1) 二面間には二面間距離に対して振動する力が発生するが、その振幅は分子直径が小さくなるほど大きくなる。
- 2) 球の運動エネルギー等の条件によって、球が平面に衝突したり、衝突する前に跳ね返されたりするが、球が跳ね返される位置は、液体分子の大きさを変えることにより様々に変化する。液体分子の直径 s が小さいほど球が跳ね返される位置は平面に近づき、その反面、球は平面に衝突しにくくなる。

参考文献

- 1) J. N. イスラエルアチヴィリ, 分子間力と表面力, 朝倉書店, (1996)
- 2) 松岡広成, 分子オーダーの流体潤滑膜厚さに関する研究, 東京大学博士論文, (1995)
- 3) 松岡, 福井, 山根, トライボロジー会議予稿集(東京), (2001), 65-66