

タイトル: Modelling shear thinning of Imidazolium-based ionic liquids

著者: Tatsuya Yamada*, Patrick A. Bonnaud*, Syogo Tejima*, Jun-ichi Fujita (*: RIST 所属)

雑誌名: Chem. Phys. Lett. 2023 年 4 月 816 巻 140387.

論文受理日時: 2023 年 2 月 26 日

オンライン掲載日時: 2023 年 2 月 21 日

概要

イオン液体である 1-ethyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate (emi-bf4) は、高せん断速度下でシアシニングを生じる。このシアシニングの仕組みについて、分子動力学シミュレーションを用いた解明を試みた。その結果、Eyring モデルに基づいた説明、即ち、イオンが流動するときに乗り越える必要があるイオン間のエネルギー障壁の大きさがせん断応力によって低められるという理解が妥当であることを明らかにした。さらに、イオンの電荷の大きさを様々なスケールで計算を行い、シアシニングに参与するエネルギー障壁の大きさのおよそ半分が静電相互作用由来していることを示した。

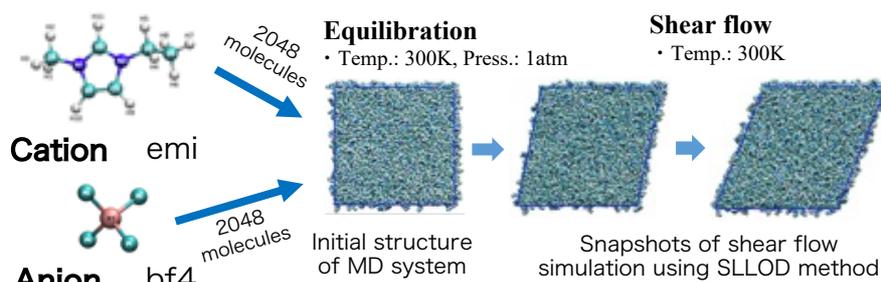


Figure 1

Figure 1: 分子動力学法に基づいたイオン液体 emi-bf4 のせん断流れの全原子シミュレーションの様子。

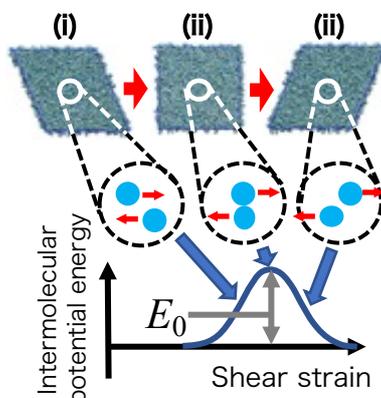


Figure 2

Figure 2: せん断流れの中でイオンは互いに近づいては離れることを繰り返す((i)→(ii)→(iii))。その結果、イオンは、その周りのイオンとの相互作用によって生み出されるエネルギー障壁 E_0 を絶えず乗り越えながら流動する。Eyring モデルによれば、このエネルギー障壁の見かけの大きさは、系の応力が大きいほど低められる。そして、せん断速度が十分に高い領域では大きな応力によってエネルギー障壁は十分に低められ、イオンの流動はより容易になって粘度が低下し、シアニングを示すと考えられる。

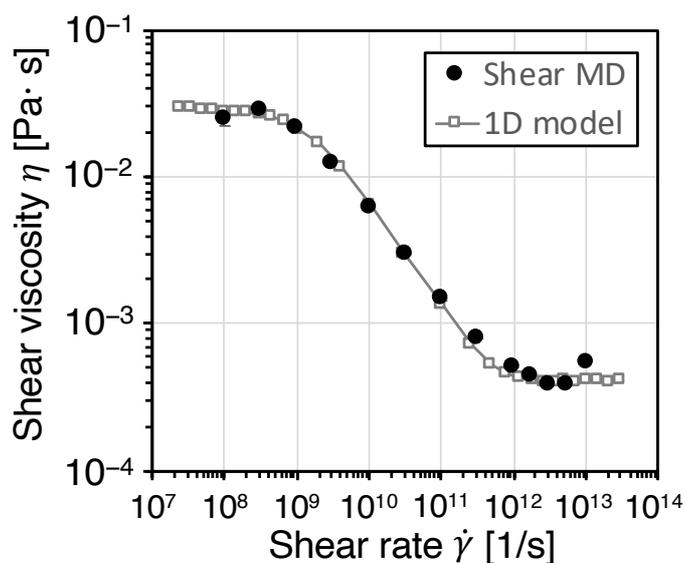


Figure 3

Figure 3: emi-bf4 のせん断速度に対するせん断粘度のプロット。全原子分子動力学シミュレーションによって得られた結果(黒丸印)は、一次元の Eyring モデルに基づく数値計算結果(灰四角)によってうまくフィッティングされた。このフィッティングの結果から、シアニングに関与するエネルギー障壁の高さは 18.7 kJ/mol と求められた。