

# 講演会

## 直鎖アルコールの粘弾性緩和：直鎖アルカンとの比較

(名大院工)山口 毅

日時：平成 28 年 9 月 2 日 (金) 17:00～

会場：物質生産棟 751 号室

概要：直鎖アルコールやイオン液体のような、分子内に極性部と非極性部を合わせ持つ分子からなる液体は、X 線・中性子散乱実験で得られる構造因子の低波数領域に、極性部と非極性部がマイクロに分離したドメイン構造に起因するといわれているプレピークを示すことが知られている。この特徴的なドメイン構造がこれらの液体の粘度をはじめとする輸送物性にどのような影響を与えるかは興味をもたれるところであり、発表者はこれまでに、モデルイオン液体に対するモード結合理論を用いた研究により、ドメイン構造が極端に発達した場合には、ドメイン構造の遅いダイナミクスがずり応力と結合し、遅い粘弾性緩和を与えることによって粘度を増加させる可能性があることを示している[1]。

本研究では、イオン液体と同様にプレピーク構造を示す高級アルコール、およびその比較対象としての直鎖アルカンについて、分子動力学シミュレーションを行い、粘弾性緩和スペクトルおよび中間散乱関数を計算した。両液体ともに、緩和時間が数百ピコ秒領域の遅い粘弾性緩和が見られた。両液体に共通する遅い粘弾性緩和の機構として並進配向結合を検討したところ、直鎖アルカンについては並進配向結合機構で遅い緩和が説明できるものの、直鎖アルコールに関しては並進配向結合機構による説明では不十分であり、不均一構造のダイナミクスと粘弾性との間の結合の存在が示唆された。

[1] T. Yamaguchi, *J. Chem. Phys.*, 144(12), 124514 (2016).

ユビキタスグリーンケミカルエネルギー連携教育研究センター共催

連絡先：吉森 明（物理学科） 内線：6196 E-mail: a.yoshimori@phys.sc.niigata-u.ac.jp