

令和 4 年 5 月 23 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2018～2021

課題番号：18K03978

研究課題名(和文) ピニングを有する不均一な固体面上での微視的Youngの式

研究課題名(英文) Microscopic Young's equation on heterogeneous solid surfaces with pinning sites

研究代表者

山口 康隆 (YAMAGUCHI, Yasutaka)

大阪大学・工学研究科・准教授

研究者番号：30346192

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：しずくなどの液体が固体を濡らす現象において、そのしずくが動かずに留まるためには、何らかの形でしずくの縁が固体にピン止めされなければならない。このピンニングという現象について、分子動力学シミュレーションにより解析を行い、どのような場合にどのような力が働くかというメカニズムを明らかにし、また、この結果から、ピンニング力を理論的に予測する方法を提案した。この結果は、コーティングなど、様々な工学的分野での応用にも役立つと考えられる。

研究成果の学術的意義や社会的意義

液体が固体に触れる濡れという現象は、日常生活で目にしないことはないほど我々の生活に密着しているが、それでいて、流体力学の問題としては界面という部分を含むためきわめて難しい。本研究はその課題に分子動力学シミュレーションという手法を用いて取り組み、ピンニングが起きるメカニズムの一部を明らかに、またそれを予測する方法を提案した。

研究成果の概要(英文)：Upon wetting of a liquid on a solid surface, droplet on solid for instance, a certain force has to be exerted on the edge of the droplet to keep the droplet immobile. We carried out molecular dynamics simulations of the pinning phenomena and elucidated the mechanism, e. g., what force acts on what situation. From this result, we proposed a theoretical model to predict the pinning force. These results can be applied to various engineering fields including coating etc.

研究分野：液体の界面に関するナノスケール解析

キーワード：分子動力学 濡れ 液体の界面

## 1. 研究開始当初の背景

固体面上の液体の濡れ挙動について、これまで基礎、工学応用の両面から広く研究が行われてきた。その基礎となる Young の式は、静止平衡状態で接触線において固液、気液、固気の界面張力 $\gamma_{SL}$ ,  $\gamma_{LV}$ ,  $\gamma_{SV}$ が、接触角 $\theta$ を介して力学的に釣り合うことを仮定して、

$$\gamma_{SL} - \gamma_{SV} + \gamma_{SV} \cos\theta = 0$$

と表される。しかし、 $\gamma_{SL}$ ,  $\gamma_{SV}$ の実験的な測定は困難であり、上式の力学的な意味は明確ではない。また一般に、平衡状態、固液接触面が動的に拡大または縮小する過程の3つの接触角は全て異なり、工学的には各々を経験的に与えるが、その支配要因も明らかではない。このように未解明の点が多い一方で、濡れは微細加工、製膜など応用上の様々な場面で現れ、特に界面の影響が大きい微小スケールで現象を大きく支配する。例えば半導体の線幅は10 nm以下に達したが、その製造工程に含まれる液体によるエッチングと洗浄過程は濡れに大きく依存する。しかし後述のように、濡れは界面が交わるマクロとミクロの複合的現象であり、その本質的な理解は容易ではない。基礎研究として濡れをミクロからとらえる分子動力学(MD)解析を行った例もあり、初期には Nijmeijer ら[1]が単原子分子のアルゴン(以下 Ar)について、液液及び固液間に Lennard-Jones(以下 LJ)型の分子間相互作用を仮定し、平衡状態において、平滑な固体結晶面上の接触角と固液の相互作用の間に一次相関があることを示した。近年では Errington ら[2]や Leroy ら[3]が、同様な分子モデルの系について、自由エネルギーから $\gamma_{SL}$ を見積もり、ナノスケールの Young の式について熱力学パス(thermodynamic path[3])と呼ばれる解釈を示している。一方、代表者らは、平滑な固体結晶面上の Ar の液滴について、接触線付近の応力場を抽出し、ここから求めた $\gamma_{SL}$ ,  $\gamma_{SV}$ ,  $\gamma_{LV}$ が Young の式を満たすことを確認し、界面張力の釣り合いが分子スケールにまで拡張できることを示した[4]。同じく代表者らは、平滑面上の水-アルコール混合系の液滴でも、等価な準一次元系を構成することで $\gamma$ を求めることが可能であり、実在流体についても Young の式を適用できることを示した[5]。このような解釈は力学パス (mechanical path[3]) と呼ばれる。

[1] M.J.P. Nijmeijer, et al., Phys. Rev. A 42, 6052 (1990).

[2] E.M. Grzelak & J.R. Errington, J. Chem. Phys. 128, 014710 (2008).

[3] F. Leroy & F. Müller-Plathe, J. Chem. Phys. 133, 044110 (2010).

[4] Y. Yamaguchi, et al., J. Chem. Phys. 150, 044701 (2019).

## 2. 研究の目的

本研究では、上記の[4]を発展させ、固体面の凹凸や相互作用の不均一性の影響を、特に接触線のピンギングに着目して取り扱う。Wenzel や Cassie などのマクロモデルでは、この不均一性を熱力学的に平均された実質的な界面積、ないし界面エネルギーとして扱い、平衡接触角の変化を表すが、不均質の影響はピンギング、前進、後退接触角の差、stick-slip 運動等の要因となる。本研究では、[4]と同様の液滴を不均一面上に形成してこの影響を力学パスから検討するほか、新たに熱力学パスからも解析を行う。研究の意味を明確にするため、まず平面状の気液界面の力学的な描像と、[4]の成果について示す。ミクロには界面における物理量は連続的に変化し、静止平衡下でも応力はバルクと異なり非等方となる。これを $\gamma_{LV}$ に集約する関係は、Bakker の方程式と呼ばれる。この mechanical path を前提として、接触線近傍の領域を十分に包括する矩形の検査体積を考えたものが[4]であり、ミクロの Young の式は、固体から平均的に水平方向の力が働かない前提の下で、接触線を囲む検査体積に働く応力の釣り合いを表すものであることが示された。逆にいえば、ピンギングが生じる不均一面上では、前記の前提が明らかに成り立たないが、ミクロの応力場を介してこのピンギングを力学的に定量評価できれば、接触角に与える不均一の影響を含んだ Young の式を再構成できる。これが本研究の目的である。

## 3. 研究の方法

分子動力学法により、濡れ性の異なる部分を有する固体壁面上において、とくに濡れ性の境界近傍で、液体にはたらく力を求め、これを理論的にモデル化する。具体的には、濡れ性の異なる各部分について、[4]などで開発した熱力学積分法などの手法を用いて $\gamma_{SL}$ を求め、これと液体にはたらく力を比較することでモデル化していく。対象とする系は、単純な Lennard-Jones 流体と固体結晶面から開始するが、水と SiO<sub>2</sub>表面などに拡張していく。単純な Lennard-Jones 流体の系については、詳細な応力場などを求める必要があることなどを加味してインハウスの計算コードを用い、理論構築を進める。一方、水と SiO<sub>2</sub>表面などについては、コーディングの負荷などを考え、分子動力学解析パッケージである LAMMPS を用い、単純系で構築した理論の適用可能性を探る。

#### 4. 研究成果

接触線にピンング力がはたらく系を分子動力学シミュレーションにより再現した。その結果、ピンング力を正しく見積もり界面エネルギーから予想される接触角を補正すれば、両者が一致することを示した。この結果を踏まえて、OH 終端された SiO<sub>2</sub> 面上、およびグラフェン上の水について、熱力学積分を用いた固液界面エネルギーの抽出と、液滴の見かけの接触角、およびピンング力の計算を行い、単純流体のモデルと同様に、理論的に予測される接触角と見かけの接触角が概ね一致することが分かった。特に固体壁面が OH 基により部分的に終端されている場合は、その部分がピンングを引き起こすことで、Young の式から予想される理想的な接触角とはずれることも明らかになった。

加えて、新たな試みとして、液槽に固体平板、または固体円柱を浸し、メニスカスを構成し、そこにはたらく力から界面張力を求める方法 (Wilhelmy 法) を分子動力学系に拡張することに成功し、単一の系で小さい計算負荷で界面張力が求められることを示した。さらに固体面の曲率の効果などについても解析した。

これらの一連の成果について、以下の国際学術誌 8 報、国内学術誌 1 報にまとめたほか、国内会議において 20 件程度の発表を行った。なお、コロナ禍の影響により、予定していた国際会議のほとんどが中止となったため、この部分については予定よりも少なくなった。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計17件（うち査読付論文 17件 / うち国際共著 7件 / うちオープンアクセス 15件）

1. 著者名 Watanabe Keitaro, Kusudo Hiroki, Bistafa Carlos, Omori Takeshi, Yamaguchi Yasutaka	4. 巻 156
2. 論文標題 Quantifying the solid?fluid interfacial tensions depending on the substrate curvature: Young ' s equation holds for wetting around nanoscale cylinder	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 054701_1-15
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0079816	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Teshima Hideaki, Kusudo Hiroki, Bistafa Carlos, Yamaguchi Yasutaka	4. 巻 14
2. 論文標題 Quantifying interfacial tensions of surface nanobubbles: How far can Young's equation explain?	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Nanoscale	6. 最初と最後の頁 2446 ~ 2455
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1NR07428H	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Kusudo Hiroki, Omori Takeshi, Yamaguchi Yasutaka	4. 巻 155
2. 論文標題 Local stress tensor calculation by the method-of-plane in microscopic systems with macroscopic flow: A formulation based on the velocity distribution function	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 184103_1-12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0062889	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Bistafa Carlos, Surblys Donatas, Kusudo Hiroki, Yamaguchi Yasutaka	4. 巻 155
2. 論文標題 Water on hydroxylated silica surfaces: Work of adhesion, interfacial entropy, and droplet wetting	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 064703_1-16
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0056718	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Oga Haruki, Omori Takeshi, Herrero Cecilia, Merabia Samy, Joly Laurent, Yamaguchi Yasutaka	4. 巻 3
2. 論文標題 Theoretical framework for the atomistic modeling of frequency-dependent liquid-solid friction	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 L032019_1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.3.L032019	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Omori Takeshi, Inoue Naoki, Joly Laurent, Merabia Samy, Yamaguchi Yasutaka	4. 巻 4
2. 論文標題 Full characterization of the hydrodynamic boundary condition at the atomic scale using an oscillating channel: Identification of the viscoelastic interfacial friction and the hydrodynamic boundary position	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Fluids	6. 最初と最後の頁 114201_1-13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevFluids.4.114201	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Imaizumi Yuta, Omori Takeshi, Kusudo Hiroki, Bistafa Carlos, Yamaguchi Yasutaka	4. 巻 153
2. 論文標題 Wilhelmy equation revisited: A lightweight method to measure liquid-vapor, solid-liquid, and solid-vapor interfacial tensions from a single molecular dynamics simulation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 034701_1-16
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0011979	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Cecilia Herrero, Takeshi Omori, Yasutaka Yamaguchi, Laurent Joly	4. 巻 151
2. 論文標題 Shear force measurement of the hydrodynamic wall position in molecular dynamics	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics Communications	6. 最初と最後の頁 041103_1-5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5111966	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Hiroki Kusudo, Takeshi Omori, Yasutaka Yamaguchi	4. 巻 151
2. 論文標題 Extraction of the equilibrium pinning force on a contact line exerted from a wettability boundary of a solid surface through the connection between mechanical and thermodynamic routes	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 154501_1-13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5124014	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Takeshi Omori, Yosuke Kobayashi, Yasutaka Yamaguchi, Takeo Kajishima	4. 巻 15
2. 論文標題 Understanding the asymmetry between advancing and receding microscopic contact angles	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Soft Matter	6. 最初と最後の頁 3923-3928
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9SM00521H	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Koshun Ogawa, Haruki Oga, Hiroki Kusudo, Yasutaka Yamaguchi, Takeshi Omori, Samy Merabia, Laurent Joly	4. 巻 100
2. 論文標題 Large effect of lateral box size in molecular dynamics simulations of liquid-solid friction	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 023101_1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.100.023101	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Haruki Oga, Yasutaka Yamaguchi, Takeshi Omori, Samy Merabia, Laurent Joly	4. 巻 151
2. 論文標題 Green-Kubo measurement of liquid-solid friction in finite-size systems	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 054502_1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5104335	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Yasutaka Yamaguchi, Satoshi Nakaoka, Takuya Hayashi, Masayuki Kawakami, Daisaku Yano	4. 巻 92
2. 論文標題 (Invited) Molecular Dynamics Analysis on the Behavior of Water and Alcohol Liquids on a OH-Terminated SiO <sub>2</sub> Surface	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ECS Transactions	6. 最初と最後の頁 87-94
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1149/09202.0087ecst	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Takeshi Omori, Naoki Inoue, Laurent Joly, Samy Merabia, Yasutaka Yamaguchi	4. 巻 4
2. 論文標題 Full characterization of the hydrodynamic boundary condition at the atomic scale using an oscillating channel: Identification of the viscoelastic interfacial friction and the hydrodynamic boundary position	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Fluids	6. 最初と最後の頁 114201_1-13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevFluids.4.114201	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Surblys Donatas, Leroy Frederic, Yamaguchi Yasutaka, Mueller-Plathe Florian	4. 巻 148
2. 論文標題 Molecular dynamics analysis of the influence of Coulomb and van der Waals interactions on the work of adhesion at the solid-liquid interface	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 134707 ~ 134707
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5019185	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Yamaguchi Yasutaka, Kusudo Hiroki, Surblys Donatas, Omori Takeshi, Kikugawa Gota	4. 巻 150
2. 論文標題 Interpretation of Young's equation for a liquid droplet on a flat and smooth solid surface: Mechanical and thermodynamic routes with a simple Lennard-Jones liquid	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 044701 ~ 044701
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5053881	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 山口 康隆,、川上 雅之、矢野 大作	4. 巻 32
2. 論文標題 ナノスケールの液体の浸入過程 (半導体の洗浄過程を前提とした分子動力学解析)	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 混相流学会誌	6. 最初と最後の頁 218 ~ 222
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3811/jjmf.2018.T002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計48件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 5件)

1. 発表者名 Kuan-Ting Chen, Qin-Yi Li, Takeshi Omori, Yasutaka Yamaguchi, Tatsuya Ikuta, Koji Takahashi
2. 発表標題 The Analysis of Capillary Filling in SiO <sub>2</sub> and Graphene Nanochannels
3. 学会等名 2nd Asian Conference on Thermal Sciences (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hideaki Teshima, Hiroki Kusudo, Carlos Bistafa, Yasutaka Yamaguchi
2. 発表標題 Density-dependence of interfacial tensions of solid-liquid interfacial nanobubbles
3. 学会等名 2nd Asian Conference on Thermal Sciences (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Haruki Oga, Takeshi Omori, Cecilia Herrero, Samy Merabia, Laurent Joly, Yasutaka Yamaguchi
2. 発表標題 Extraction of frequency-dependent solid-liquid friction by using equilibrium molecular dynamics analysis
3. 学会等名 2nd Asian Conference on Thermal Sciences
4. 発表年 2021年



1. 発表者名 千崎 亮平, 大賀 春輝, 山口 康隆
2. 発表標題 縞状の濡れ性の分布をもつ壁面の固液摩擦の異方性に関する非平衡分子動力学解析
3. 学会等名 第35回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 手嶋 秀彰, 楠戸 宏城, Bistafa Carlos, 山口 康隆
2. 発表標題 固液界面ナノバブルの界面張力の定量化
3. 学会等名 第35回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 新宅 実慶, 楠戸 宏城, 山口 康隆
2. 発表標題 固体面に接するナノ液滴の線張力の熱力学的算出
3. 学会等名 第35回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大賀 春輝, 大森 健史, Herrero, C., Merabia, S., Joly, L., 山口 康隆
2. 発表標題 固液摩擦力の揺らぎを用いた固液摩擦の周波数特性の抽出
3. 学会等名 流体力学学会年会2021
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 楠戸 宏城, 大森 健史, 山口 康隆
2. 発表標題 マクロの流れを伴うミクロの系における局所的応力テンソルの計算: 速度分布関数に基づくMethod-of-Planeの定式化
3. 学会等名 流体力学会年会2021
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 手嶋 秀彰, 楠戸 宏城, Bistafa Carlos, 山口 康隆
2. 発表標題 界面ナノバブルの接触角の密度依存性に関する分子動力学解析
3. 学会等名 混相流シンポジウム2021
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 渡部 桂太郎, 楠戸 宏城, 山口 康隆
2. 発表標題 Lennard-Jones液体面に浸されたナノスケールの固体円筒に働く毛管力の分子動力学解析
3. 学会等名 第58回日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 楠戸 宏城, 大森 健史, 山口 康隆
2. 発表標題 Lennard-Jones 流体の動的接触線近傍の流れ場と粘性応力の抽出
3. 学会等名 第58回日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 千崎 亮平, 大賀 春輝, 大森 健史, 山口 康隆
2. 発表標題 縞状の濡れ性の分布を持つ固体面と単純液体の間の摩擦に関する非平衡分子動力学解析
3. 学会等名 第58回日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 嶋 秀彰, 楠戸 宏城, Bistafa Carlos, 山口 康隆
2. 発表標題 界面ナノバブルの界面張力の密度依存性に関する分子動力学解析
3. 学会等名 第58回日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 楠戸 宏城, 大森 健史, 山口 康隆
2. 発表標題 定常な動的接触線近傍の応力分布に関する分子動力学解析
3. 学会等名 第34回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 大賀春輝, 大森健史, 山口康隆
2. 発表標題 平衡MDとLFHによる固液間剪断力の自己相関係数算出
3. 学会等名 第34回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 渡部 桂太郎, 楠戸 宏城, 大森 健史, 山口 康隆
2. 発表標題 Lennard-Jones液体面に浸されたナノスケールの固体円筒に働く毛管力の曲率依存性
3. 学会等名 第34回数值流体力学シンポジウム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 今泉 優太, 大森 健史, 楠戸 宏城, Bistafa, Carlos, 山口 康隆
2. 発表標題 Wilhelmyの関係式の再考: 単一のシミュレーションによる固気液の3つの界面張力の算出
3. 学会等名 第34回数值流体力学シンポジウム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 山口 康隆
2. 発表標題 分子動力学シミュレーション2 ~ 分子の動きから何が求まるか: 液体の物性を中心に ~
3. 学会等名 MRMフォーラム2020 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 楠戸宏城, 大森健史, 山口康隆
2. 発表標題 MoPによる定常な動的接触線近傍の応力分布に関する考察
3. 学会等名 日本流体力学学会 年会2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 大賀 春輝, 大森 健史, 山口 康隆
2. 発表標題 固液界面における摩擦力の揺らぎと流体力学の関係 : Langevin方程式を介した接続
3. 学会等名 日本流体力学会 年会2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Bistafa, Carlos, Surblys, Donatas, 大森健史, 山口康隆
2. 発表標題 OH終端されたシリカ表面上の濡れに関する理論解析
3. 学会等名 日本流体力学会 年会2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 新宅 実慶, 楠戸 宏城, 大森 健史, 山口 康隆
2. 発表標題 固体壁面に接する 3 次元 Lennard-Jones 液滴の接触線近傍における力学的バランス
3. 学会等名 日本流体力学会 年会2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 赤井 優斗, 大島 洋喜, 大森 健史, 山口 康隆, 梶島 岳夫
2. 発表標題 接触線近傍での流体界面の易動度
3. 学会等名 日本流体力学会 年会2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 楠戸 宏城, 大森 健史, 山口 康隆
2. 発表標題 MoPlによる定常な動的接触線近傍の応力解析
3. 学会等名 第57回日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 今泉 優太, 大森 健史, 山口 康隆
2. 発表標題 Lennard-Jones液体面に浸された固体にはたらく毛管力の解析
3. 学会等名 第57回日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yasutaka Yamaguchi
2. 発表標題 Molecular Dynamics Analysis on the Behavior of Water and Alcohol Liquids on a OH-Terminated SiO <sub>2</sub> Surface
3. 学会等名 236th ECS Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Yamaguchi, K. Oda, H. Kusudo, M. Kawakami and D. Yano
2. 発表標題 Molecular Dynamics Analysis on the Water Behavior on OH-terminated SiO <sub>2</sub> surfaces
3. 学会等名 Atomic Level Characterization (ALC) '19 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 楠戸 宏城, 大森 健史, 山口 康隆
2. 発表標題 Method of Planeの拡張による定常非平衡分子動力学シミュレーションにおける応力計算手法
3. 学会等名 第33回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 今泉 優太, 大森 健史, 山口 康隆
2. 発表標題 Lennard-Jones液体面に浸されたナノスケールの固体に働く毛管力に関する分子動力学解析
3. 学会等名 第33回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 楠戸 宏城, 大森 健史, 山口 康隆
2. 発表標題 定常せん断を受ける壁面間のLennard-Jones流体の動的接触角に関する分子動力学解析
3. 学会等名 日本流体力学会 年会2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大森 健史, 山口 康隆, 梶島 岳夫
2. 発表標題 接触線運動の運動方向に対する非対称性 (不均一性のない壁面上における局所的前進・後退接触角)
3. 学会等名 混相流シンポジウム2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 今泉 優太, 今立 呼南, 山口 康隆, 香川 勝, 藤村 秀夫
2. 発表標題 応力計算を介したナノスケールの固体円筒近傍におけるキャピラリー力に関する分子動力学解析
3. 学会等名 第56回日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 楠戸 宏城, 山口 康隆, 大森 健史, 香川 勝, 藤村 秀夫
2. 発表標題 非平衡流れ場の応力分布の算出による固気液三相の動的接触角に関する分子動力学解析
3. 学会等名 第56回日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小田 浩太郎, 山口 康隆, スルプリス ドナタス
2. 発表標題 OH終端されたシリカ表面の水の濡れに関する分子動力学解析
3. 学会等名 第56回日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kotaro Oda, Donatas Surblys, Yasutaka Yamaguchi, Masayuki Kawakami, Daisaku Yano
2. 発表標題 Calculation of solid-liquid interfacial energy between OH-terminated SiO <sub>2</sub> and water
3. 学会等名 Water on Materials Surface (国際学会)
4. 発表年 2018年



1. 発表者名 小川 皓俊, 大賀 春輝, 井上 直樹, 山口 康隆, 大森 健史, 香川 勝, 藤村 秀夫
2. 発表標題 固液摩擦係数に対する計算セルのアスペクト比依存性に関する非平衡分子動力学解析
3. 学会等名 第32回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 小田 浩太郎, Surblys Donatas, 山口 康隆, 矢野 大作, 川上 雅之
2. 発表標題 熱力学積分法による水とOH終端されたシリカの固液界面エネルギーの算出
3. 学会等名 第32回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 今泉 優太, 今立 呼南, 山口 康隆, 平原 佳織
2. 発表標題 ナノスケールの固体円筒に働く力に与える濡れ性と曲率の影響に関する分子動力学解析
3. 学会等名 第32回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 大森 健史, 小林 要佑, 山口 康隆, 梶島 岳夫
2. 発表標題 分子動力学法による微視的動的接触角の解析
3. 学会等名 日本流体力学学会 年会2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 楠戸 宏城, 山口康隆
2. 発表標題 外力が作用する固気液三相の接触角に関する分子動力学解析
3. 学会等名 日本流体力学会 年会2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山口 康隆, 楠戸 宏城, 菊地 智洋
2. 発表標題 固液間相互作用の不連続性によるピニングを伴うアルゴン液滴の濡れに関する分子動力学解析
3. 学会等名 日本流体力学会 年会2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 D. Surbllys, F.Leroy, Y.Yamaguchi, F. Mueller-Plathe
2. 発表標題 固液付着仕事への van der Waals 力及びクーロン力の寄与についての分子動力学解析
3. 学会等名 日本流体力学会 年会2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 今立 呼南, 今泉 優太, 平原 佳織, 山口 康隆
2. 発表標題 カーボンナノチューブの濡れと力学的バランスに関する分子動力学解析
3. 学会等名 第55回日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 井上 直樹, 小川 皓俊, 大森 健史, 山口 康隆, 梶島 岳夫
2. 発表標題 固液摩擦係数に対するGreen-Kubo関係式 (有限サイズ効果についての考察)
3. 学会等名 第55回日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 楠戸 宏城, 菊地 智洋, 山口 康隆, 香川 勝, 藤村 秀夫
2. 発表標題 固気液三相の接触線のピンングに関する分子動力学解析
3. 学会等名 第55回日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 小川 皓俊, 井上 直樹, 山口 康隆, 大森 健史
2. 発表標題 液摩擦係数に対する Green-Kubo 関係式 (計算セルのアスペクト比の影響)
3. 学会等名 第55回日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 小田 浩太郎, Donatas Surblys, 山口 康隆, 川上 雅之, 矢野 大作
2. 発表標題 OH 終端された SiO <sub>2</sub> と水の間での固液界面エネルギーの抽出
3. 学会等名 第55回日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 今泉 優太, 今立 呼南, 山口 康隆, 平原 佳織
2. 発表標題 ナノスケールの固体円柱に働くキャピラリー力に与える濡れ性と曲率の影響に関する分子動力学解析
3. 学会等名 第55回日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 山口 康隆	4. 発行年 2021年
2. 出版社 株式会社エヌ・ティー・エス	5. 総ページ数 808
3. 書名 マイクロ・ナノ熱工学の進展	

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分担 者	大森 健史  (Omori Takeshi)  (70467546)	大阪市立大学・大学院工学研究科・准教授   (24402)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関		
フランス	リヨン第1大学		